



МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ТЕОРИЯ
ПЛАНИРОВАНИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТА



СПРАВОЧНАЯ
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ БИБЛИОТЕКА

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Под редакцией С. М. ЕРМАКОВА



МОСКВА «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
1983

22.18
М 33
УДК 519.6

КОЛЛЕКТИВ АВТОРОВ:

ЕРМАКОВ С. М., БРОДСКИЙ В. З., ЖИГЛЯВСКИЙ А. А., КОЗЛОВ В. П.,
МАЛЮТОВ М. Б., МЕЛАС В. Б., СЕДУНОВ Е. В., ФЕДОРОВ В. В.

Математическая теория планирования эксперимента. / Под редакцией С. М. Ермакова. — М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1983. — 392 с.

Книга содержит систематическое изложение методов планирования эксперимента, применяющихся при решении широкого класса прикладных задач. Она представляет собой справочное руководство, посвященное кругу вопросов, связанных с математическими методами планирования экспериментов. Справочник предназначен для математиков, развивающих теорию оптимального планирования экспериментов, инженеров и научных работников из других областей науки и техники, применяющих методы этой теории в практических задачах.

Рис. 2. Табл. 3. Библ. 196 назв.

М $\frac{1702070000-166}{053(02)-83}$ 65-83

© Издательство «Наука».
Главная редакция
физико-математической
литературы, 1983

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Введение	9
Глава 1. Сведения из статистической теории оценивания	18
§ 1. Параметрические задачи статистического оценивания	18
§ 2. Линейная регрессионная модель	23
§ 3. Линейный регрессионный анализ при наличии априорной информации о параметрах	34
§ 4. Нелинейная регрессионная модель	40
Глава 2. Теория эквивалентности и двойственности в задачах планирования регрессионных экспериментов	50
§ 1. Основные понятия	50
§ 2. Свойства информационной матрицы	53
§ 3. Необходимые и достаточные условия оптимальности для выпуклых критериев оптимальности	54
§ 4. Критерий D -оптимальности и теорема Кифера — Вольфовица	57
§ 5. Линейные критерии оптимальности	59
§ 6. Критерии минимаксного типа	61
§ 7. Теория двойственности	63
§ 8. Общая теорема эквивалентности	65
§ 9. Теория двойственности для D - и E -критериев	67
Глава 3. Аналитическая теория оптимальных непрерывных планов	69
§ 1. D - и G -оптимальные планы в одномерном случае	69
§ 2. D - и G -оптимальные планы в многомерном случае	71
§ 3. Оптимальные планы для оценки одного параметра	80
§ 4. Линейно оптимальные планы	84
§ 5. Асимптотически оптимальные планы	87
Глава 4. Численные методы оптимизации и построения оптимальных планов	95
§ 1. Построение непрерывных оптимальных планов	95
§ 2. Дискретные точные планы	99
§ 3. Методы поиска локального экстремума	101
§ 4. Поиск глобального экстремума	110
§ 5. Оптимальные решения многокритериальных задач	125
Глава 5. Последовательное планирование экспериментов	131
§ 1. Основные понятия последовательного планирования	131
§ 2. Нижние границы для квадратичного риска оценивания с известной регулярной плотностью	134
§ 3. Нижние границы для квадратичного риска последовательной стратегии оценивания параметров регрессии	136

§ 4. Асимптотически оптимальные последовательные планы для оценивания параметров регрессии	138
§ 5. Последовательное планирование эксперимента при проверке гипотез	140
§ 6. Байесовские и минимаксные оптимальные планы для оценивания параметров нелинейной регрессии	143
Глава 6. Учет неадекватности в задачах планирования регрессионных и имитационных экспериментов	148
§ 1. Критерии оптимальности и планы, связанные с неадекватностью модели	148
§ 2. Рандомизованные процедуры планирования и анализа регрессионного эксперимента	155
§ 3. Оптимальное несмещенное планирование при условии, что функция регрессии принадлежит конечномерным пространствам функций	161
§ 4. Имитационные модели и планирование эксперимента	181
Глава 7. Задачи планирования эксперимента с областью действия в функциональном пространстве	189
§ 1. Модель регрессии, область планирования и план в функциональном пространстве	189
§ 2. Восстановление функционалов плана	192
§ 3. Регрессионный эксперимент в пространстве обобщенных мер	197
§ 4. Примеры оптимальных планов для оценивания параметров распределений	202
§ 5. Планы для оценивания одного из параметров регрессии, связь с теорией наилучших приближений	205
Глава 8. Некоторые задачи планирования экспериментов для случайных процессов и полей	209
§ 1. Планирование регрессионного эксперимента с коррелируемыми наблюдениями	209
§ 2. Оптимальная интерполяция случайных полей второго порядка	214
Глава 9. Планирование экспериментов, связанных с обратными задачами математической физики	216
§ 1. Общая постановка обратной задачи, связанной с регрессионным экспериментом	216
§ 2. Планирование экспериментов для некоторых классов обратных задач	233
Глава 10. Факторные модели	246
§ 1. Основные определения и вспомогательные результаты	247
§ 2. Факторные модели для количественных факторов	253
§ 3. Факторная модель для качественных факторов	257
§ 4. Смешанная факторная модель	259
Глава 11. Эффективность факторных планов	264
§ 1. Критерии оптимальности	264
§ 2. Оптимальность регулярных планов	266
§ 3. Классификация регулярных планов	268
Глава 12. Геометрические планы	272
§ 1. Расщепление степеней свободы в полном плане	272
§ 2. Геометрический метод построения дробных планов	275
§ 3. Обратная задача построения геометрических планов	279
§ 4. Частные методы построения	283

Глава 13. Негеометрические планы	287
§ 1. Симметричные регулярные планы	287
§ 2. Несимметричные регулярные планы	291
§ 3. Нерегулярные планы	298
Глава 14. Планирование экстремальных экспериментов	306
§ 1. Сходимость и скорость сходимости итеративных алгоритмов	306
§ 2. Сходимость итеративных алгоритмов в задачах условной оптимизации	316
§ 3. Оптимальность итеративных алгоритмов	322
§ 4. Некоторые алгоритмы планирования экстремальных экспериментов	329
Глава 15. Планирование отсеивающих экспериментов	348
§ 1. Основные понятия	348
§ 2. Слабо разделяющие планы	352
§ 3. Сильно разделяющие планы	358
Глава 16. Дискриминирующие эксперименты	366
§ 1. Постановка задачи	366
§ 2. Свойства T -оптимальных планов	368
§ 3. Построение T -оптимальных планов	373
Литература	378
Предметный указатель	386

ПРЕДИСЛОВИЕ

Значительное число математических работ, имеющих целью решение задач, связанных с оптимизацией условий протекания эксперимента, обусловили издание настоящей книги в серии «Справочная математическая библиотека». Можно добавить также, что многие из упомянутых работ содержат глубокие и красивые математические результаты и что с точки зрения принятой классификаций разделов математики результаты, связанные с планированием эксперимента, часто принадлежат различным разделам. Последнее обстоятельство делает особенно актуальным издание справочного руководства, охватывающего основные факты, относящиеся к математической теории планирования эксперимента.

Авторы сознательно имели дело с математическими моделями эксперимента и не затрагивали вопросы, связанные с какими-либо экспериментальными устройствами. Книга также сравнительно бедна примерами конкретных планов, ибо ее предметом является методика построения планов.

Основное содержание современной теории планирования эксперимента составляет теория конструирования критериев оптимальности и решения получаемых экстремальных задач постольку, поскольку последние обладают определенным своеобразием. Наличие случайной ошибки в экспериментальных данных обуславливает первостепенную роль математической статистики при конструировании критериев оптимальности. Очевидно также, что при изучении регрессионного эксперимента важную роль играют методы теории аппроксимации. Перечисленные вопросы и составляют основное содержание книги.

Естественным в теории планирования эксперимента оказывается также многокритериальный подход. По-видимому, впервые с точки зрения этого подхода удастся трактовать с единых позиций ряд разнородных задач планирования эксперимента, и авторы использовали это обстоятельство при написании данной книги.

В соответствии с традицией изложение начато с классического регрессионного анализа и планирования регрессионного эксперимента при отсутствии систематической погрешности, но материал, относящийся к учету априорной информации о коэффици-

ентах регрессии и планировании регрессионного эксперимента с учетом систематической ошибки, уже имеет непосредственную связь с многокритериальным подходом.

Методы оптимизации (в том числе векторной) являются необходимым разделом теории планирования эксперимента. При этом они, с одной стороны, являются средством минимизации построенных критериев, а с другой, имеют самостоятельное значение при решении задач теории оптимального эксперимента. Эти две стороны взаимосвязаны при изложении.

Авторский коллектив уделял большое внимание вопросам планирования эксперимента при изучении свойств операторов, когда в качестве множеств их определений и значений фигурируют множества функций,— может быть, даже в ущерб некоторым задачам, связанным с классической регрессионной моделью.

Ограниченный объем книги не позволил в равной мере охватить все разделы математической теории планирования эксперимента, а на отборе материала не могли не сказаться научные интересы авторов, которые сформировались под несомненным влиянием классической теории статистического эксперимента с одной стороны и новых подходов к решению широкого круга прикладных задач, развиваемых академиком Г. И. Марчуком, с другой.

Основное внимание в книге уделено регрессионному эксперименту и его обобщениям. Вопросы, связанные с факторными моделями (особенно последние результаты в этой области) нашли меньшее отражение: они затронуты лишь в той мере, в какой имеется тесная связь между этими двумя типами эксперимента. Вероятно, математические методы построения факторных планов и приложения этих планов заслуживают отдельного справочного руководства.

Книга является коллективным трудом. Тем не менее за содержание разных глав ответственность несут разные лица: предисловие, введение — С. М. Ермаков; гл. 1 — С. М. Ермаков (§§ 1—3), А. А. Жиглявский (§§ 1, 2, 4), М. Б. Малютов (§ 4), В. Б. Мелас (§ 3), Е. В. Седунов (§ 2); гл. 2 — В. В. Федоров (§§ 1—6), В. Б. Мелас (§§ 7—9); гл. 3 — Е. В. Седунов (§§ 1—4), С. М. Ермаков, А. А. Жиглявский, В. П. Козлов (§ 5); гл. 4 — В. В. Федоров (§§ 1, 2), А. А. Жиглявский (§§ 3—5); гл. 5 — М. Б. Малютов (§§ 1—5), В. В. Федоров, В. Б. Мелас (§ 6); гл. 6 — С. М. Ермаков (§§ 1, 2, 4), Е. В. Седунов (§ 3); гл. 7—9 — В. П. Козлов; гл. 10—13 — В. З. Бродский; гл. 14 — А. А. Жиглявский; гл. 15 — М. Б. Малютов; гл. 16 — В. В. Федоров.

Следует отметить, что при систематизации достаточно обширного материала, составившего содержание книги, удалось установить новые связи между известными результатами, что равносильно в ряде случаев получению новых результатов. Удалось также наметить новые подходы и постановки задач. Сказанное относится, главным образом, к §§ 4.4, 5.1—5.5, гл. 9, и частично к введению, §§ 3.5, 6.1, 6.2, 6.4, 14.4, гл. 7 и 15.

Относительно применяемой нумерации следует заметить, что при ссылке на параграфы, формулы, теоремы и алгоритмы из других глав первое число обозначает номер главы; при ссылке на пункт его номер записывается в одной из трех форм: **а. б. в.**, **б. в** или **в**, где **а** — номер главы (опускается, если ссылка на пункт внутри главы), **б** — номер параграфа (опускается при ссылках внутри параграфа), **в** — номер пункта.

Литература дана общим списком. Ссылки, как правило, приведены в конце каждого параграфа. Литература по планированию эксперимента чрезвычайно обширна, и авторы не пытались ее полностью охватить. Работы, в которых можно найти обзоры по отдельным разделам теории планирования эксперимента, отмечены звездочкой.

Авторы благодарны Л. И. Бродскому, М. С. Ермакову, А. В. Иванову, А. П. Коростелеву, М. В. Терентьевой, принявшим участие в написании отдельных пунктов, В. В. Налимову и В. В. Пененко, в немалой степени способствовавшим написанию книги.

С. М. Ермаков

ВВЕДЕНИЕ

1. Обычно под *экспериментом* понимают создание некоторого комплекса условий \mathcal{A} , в результате которых могут наступать или не наступать события из некоторого заданного множества \mathcal{B} , и поэтому предметом теории эксперимента служит изучение отображения множества \mathcal{A} элементов, именуемого комплексом условий, на множество событий результатов эксперимента \mathcal{B} .

Если результат эксперимента зависит от случая, то эксперимент называют *статистическим*. При описании такого эксперимента без каких-либо оговорок мы будем пользоваться средствами и терминами теории вероятностей и математической статистики. Можно сразу же заметить, что понятие случайной функции $y(x, \omega)$, где x — параметр из заданного множества X , а ω — элементарное событие из Ω при заданной σ -алгебре \mathcal{G} и вероятностной мере P , является достаточно общим для наших целей, а эксперимент, результатом которого являются реализации этой функции при фиксированных значениях параметра x , достаточной общей моделью эксперимента.

Переходя от реальных экспериментальных устройств к математическому описанию, мы по понятным причинам неизбежно говорим о математической модели эксперимента.

С появлением ЭВМ возникло понятие имитационного эксперимента, который направлен не на изучение природы, а на изучение достаточно сложной (имитационной) модели. Такая модель часто также требует имитации случайности и, несмотря на принципиальное различие между экспериментом, имеющим дело с природой, и имитационным экспериментом, широкий класс последних также укладывается в схему получения реализаций случайной функции $y(x, \omega)$ при заданных значениях x . Ясно тем не менее, что не всякий эксперимент следует относить к числу статистических. Прежде всего следует выделить класс экспериментов, где влияние случая пренебрежимо. И хотя формально результаты, полученные для статистических моделей, справедливы и для детерминированных, постановки задач и методы исследования здесь другие. Можно выделить также экспериментальные ситуации, в которых об ошибке измерений известно, что она не превосходит заданной величины, но невозможно

получить сведения о ее распределении. Здесь методы исследования также могут быть не связаны с теорией вероятностей. Наконец, можно упомянуть о нечетком задании условий эксперимента.

Было бы неразумным претендовать на какую-либо полную классификацию экспериментов, но важно отметить их разнообразие. Для нас далее будет представлять интерес эксперименты, которые можно планировать.

Возможность планирования эксперимента обусловлена тем обстоятельством, что во многих случаях экспериментатор может получить интересующий его результат при различном, вообще говоря, комплексе условий \mathfrak{A} . Обозначим множество таких \mathfrak{A} через $\mathfrak{A}(\xi)$, где $\xi \in \Xi$, Ξ — некоторое множество условий, и ξ может быть дополнительно выбрано экспериментатором.

Если множество Ξ не пусто и стоимость эксперимента s (материальные затраты) зависит от параметра ξ , $s = s(\xi)$, то такой эксперимент называют *активным*. Здесь уместно заметить, что материальные затраты на эксперимент зависят, как правило, от величин, определяемых в процессе эксперимента, и априори не могут быть подсчитаны. По этой причине априорные сведения о данных эксперимента используются для конструирования с использованием сведений о $s(\xi)$ критерия качества эксперимента $\Phi(\xi)$, зависящего уже только от ξ . Естественно предполагать ограниченность $\Phi(\xi)$ снизу на множестве Ξ и требовать такого его определения, при котором в Ξ существует ξ_0 , обладающее свойством

$$\xi_0 = \arg \inf_{\xi \in \Xi} \Phi(\xi). \quad (1)$$

Параметр ξ называют *планом эксперимента*, а его значение ξ_0 , удовлетворяющее соотношению (1), *оптимальным планом* по отношению к критерию Φ .

Многие экспериментальные ситуации таковы, что нельзя (по крайней мере без дополнительных экспериментов) задать один критерий оптимальности, но можно указать множество критериев $\{\Phi_\alpha(\xi)\}$, каждый из которых желательно минимизировать выбором ξ . При этих условиях задача планирования многокритериальна. С помощью векторного критерия $\{\Phi_\alpha(\xi)\}$ планы могут быть частично упорядочены. Вводимое отношение порядка будем называть *доминируемостью* по отношению к критерию $\{\Phi_\alpha(\xi)\}$.

Для ξ и ξ' из Ξ будем говорить, что ξ *доминирует* ξ' в Ξ по отношению к $\{\Phi_\alpha\}$, если $\Phi_\alpha(\xi) \leq \Phi_\alpha(\xi')$ для всех α и хотя бы для одного $\alpha = \alpha_0$, $\Phi_{\alpha_0}(\xi) < \Phi_{\alpha_0}(\xi')$.

Множество Ξ_0 тех ξ , для которых в Ξ нет доминирующих по отношению $\{\Phi_\alpha\}$, называется *множеством Парето* критерия $\{\Phi_\alpha\}$.

Оптимальным по Парето называется всякий план ξ из множества Ξ_0 .

Если ξ является точкой n -мерного евклидова пространства, $\xi \in \mathbb{R}^n$, и α принимает конечное число s значений $\alpha = 1, 2, \dots, s$, каждый критерий $\Phi_\alpha(\xi)$ — выпуклая функция ξ , то множество Парето критерия $\{\Phi_\alpha(\xi)\}$ является, вообще говоря, $(s-1)$ -мерным многообразием и определяется как множество решений следующей задачи:

$$\text{Arg max}_{\xi} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \Phi_{\alpha}(\xi), \quad (2)$$

где $\lambda_{\alpha} \geq 0$ — вещественные параметры (один из них может быть фиксирован).

Если выпуклость всех $\Phi_{\alpha}(\xi)$ не имеет места, то точки параметрического множества (2) принадлежат множеству Парето, но множество Парето в этом случае может содержать точки, не являющиеся решением задачи (2) ни при каких значениях параметров λ_{α} . Очевидно, выделение множества Парето позволяет отбросить заведомо «плохие» по отношению к критерию $\{\Phi_{\alpha}\}$ планы — те, для которых в E существуют планы их доминирующие. Формулировка задачи нахождения плана эксперимента в многокритериальной постановке часто является важным этапом при построении единого критерия оптимальности. Если требования различных критериев Φ_{α} к оптимальному плану отличаются незначительно, то в сущности безразлично какой из Φ_{α} мы выберем в качестве единого критерия. Если же требования существенно различны, то проведение дополнительных экспериментов обычно позволяет понять, насколько улучшение плана в смысле одного из критериев ухудшает другие критерии, и остановиться на некотором «компромиссном» критерии. Для выпуклых Φ_{α} компромиссный критерий обычно выбирается в виде их линейной комбинации. Другим типом компромиссного критерия является критерий $\sup_{\alpha} \Phi_{\alpha}(\xi)$.

Можно утверждать, что специфической задачей теории планирования эксперимента является конструирование критерия его оптимальности. Второй задачей является экстремальная (может быть очень сложная) задача. Можно выделять некоторые классы экстремальных задач теории планирования эксперимента, допускающих специальные методы исследования, но роль общей теории решения экстремальных задач приуменьшить нельзя. В соответствии с этой точкой зрения во Введении (как и во всей книге) основное внимание уделяется критериям оптимальности, их конструированию и их свойствам.

2. Как уже отмечалось, при конструировании критерия важную роль играет априорная информация, находящая свое отражение в высказываемой экспериментатором гипотезе модели изучаемого явления.

Понятия «модель» и «априорная информация» играют значительную роль в планировании эксперимента и неоднократно встречаются в книге. Под априорной информацией обычно по-

нимают все, что известно экспериментатору до проведения эксперимента об изучаемом в процессе эксперимента явлении. Это обычно физические представления (если эксперимент физический) и анализ данных предшествующих экспериментов или близких по характеру экспериментов. Для применения математической теории требуется формализация этой информации — ее учет при построении критерия оптимальности эксперимента и модели.

Здесь уместно более конкретно обсудить высказанные соображения, конкретизировав характер эксперимента.

Рассмотрим более подробно уже упоминавшийся случай, когда результатом эксперимента является реализация (числовой) случайной функции $y = y(x, \omega)$, $x \in X \subset \mathbb{R}^k$.

Если получение при фиксированных x_j из X ($j = 1, \dots, N$) значений $y_j = y(x_j, \omega_j)$ имеет целью восстановление в X функции $Ey(x, \omega) = \eta(x)$, то такой эксперимент относят к числу так называемых *регрессионных*.

Известно, что без дополнительной информации о гладкости функции $\eta(x)$ задача ее восстановления по наблюдаемым с ошибками значениям не имеет смысла. Следовательно, задача для своей корректной постановки требует «априорной информации» — указания множества \mathcal{F} функций, которому априори принадлежит $\eta(x)$. Наиболее простым случаем является случай параметрического задания — $\eta(x) = \eta_0(x, \theta)$. Здесь η_0 — известная функция, а параметр θ из заданного параметрического множества Θ определяется по значениям y_j . Как правило, считают $\Theta \subset \mathbb{R}^m$. Функцию $\eta_0(x, \theta)$ часто называют *регрессионной моделью*.

Для подбора параметра θ необходимы также сведения о распределении ошибки $\varepsilon_j = y(x_j, \omega_j) - \eta(x_j)$. Если совместное распределение ε_j ($j = 1, \dots, N$) известно также с точностью до параметра κ , то задача определения (κ, θ) является параметрической задачей математической статистики. Параметр θ оценивается с помощью статистики $\hat{\theta}(x_1, \dots, x_N; y_1, \dots, y_N)$, κ — с помощью $\hat{\kappa}(x_1, \dots, x_N; y_1, \dots, y_N)$. При этом, как правило, оказывается, что погрешность $\theta_{\text{ист}} - \hat{\theta}$ определения истинного значения параметра $\theta_{\text{ист}}$ зависит от выбора точек x_1, \dots, x_N , в которых измеряется (вычисляется) функция y . Это дает возможность построить критерий качества эксперимента (обычно некоторую норму ошибки параметра θ) и планировать эксперимент, если экспериментатор может распоряжаться выбором точек x_1, \dots, x_N .

Более сложным оказывается случай, когда \mathcal{F} задается свойствами гладкости функции η . В этом случае для восстановления η нужно использовать либо непараметрические оценки, свойства оптимальности которых при малых N изучены плохо, либо пытаться подобрать удобный параметрический класс (например, многочленов или сплайн-функций). И в том, и в другом случае мы будем иметь дело с ошибками двух сортов: систематической

ошибкой (ошибкой модели) и случайной ошибкой (ошибкой определения параметров модели).

Пусть выбрана параметрическая модель и m фиксировано. Имеем следующее разложение погрешности $\eta(x) - \hat{\eta}_0(x, \hat{\theta})$:

$$\eta(x) - \hat{\eta}_0(x, \hat{\theta}) = [\eta(x) - \eta_0(x, \theta_{\text{ист}})] + [\eta_0(x, \theta_{\text{ист}}) - \eta_0(x, \hat{\theta})].$$

Причем $\theta_{\text{ист}}$ в данном случае обозначает такое значение параметра θ , при котором $\eta_0(x, \theta_{\text{ист}})$ наилучшим образом в выбранной метрике приближает $\eta(x)$. Вводя метрику ρ на множестве функций, к которому принадлежат $\eta(x)$ и $\eta_0(x, \theta)$, $\theta \in \Theta$, имеем

$$\rho(\eta(x) - \hat{\eta}_0(x, \hat{\theta})) \leq$$

$$\leq \rho(\eta(x) - \eta_0(x, \theta_{\text{ист}})) + \rho(\eta_0(x, \theta_{\text{ист}}) - \eta_0(x, \hat{\theta})). \quad (3)$$

Каждое из слагаемых в правой части этого неравенства можно выбрать в качестве критерия оптимальности эксперимента. Со вторым слагаемым в (3) снова связана параметрическая задача математической статистики, что же касается первого, то оно содержит неизвестные нам функции, которые и надлежит восстановить в процессе эксперимента. Заметим, что $\theta_{\text{ист}}$ зависит от $\eta(x)$ и, может быть, точек, в которых производятся измерения. Подстановка в первое слагаемое вместо $\eta(x)$ каждой конкретной функции из множества \mathcal{F} приводит нас к некоторому критерию, зависящему теперь уже только от выбора точек x_1, \dots, x_n . Так, априорное предположение о том, что \mathcal{F} содержит конечное число n функций, делает нашу задачу $(n+1)$ -критериальной, так что $\eta(x)$ играет роль индекса α в общей постановке многокритериальной задачи. В соответствии со сказанным с первым слагаемым связывают один компромиссный минимаксный критерий

$$\sup_{\eta \in \mathcal{F}} \rho(\eta(x) - \eta_0(x, \theta_{\text{ист}})) \quad (4)$$

либо, если на множестве \mathcal{F} можно определить меру μ , отражающую дополнительные сведения о функции η , критерий

$$\int_{\mathcal{F}} \rho(\eta - \eta_0) \mu(d\eta), \quad (5)$$

называемый *байесовским критерием* (аналог линейной комбинации критериев). После этого остается два критерия, которые определяют оптимальность плана эксперимента. Они могут быть объединены в один (компромиссный), если известно, в какой пропорции они должны быть смешаны, т. е. определена мера на множестве этих двух критериев. Другая возможность состоит в минимизации их максимума.

Изложенное может служить примером того, как понятия «модель» и «априорная информация» используются при конструировании критерия оптимальности эксперимента.

Как мы увидим далее, критерий, связанный со случайной погрешностью, также может зависеть от параметров, для которых

известно априори лишь множество, к которому они принадлежат, т. е. второе слагаемое в (3) также может представлять в нашей трактовке некоторое множество критериев, для которых нужно разумным образом определить компромиссный.

Структура критериев оптимальности в случае измерения значений случайной функции типична для задач планирования эксперимента. Проведенный здесь общий анализ этой структуры позволяет трактовать с общей точки зрения ряд частных случаев. С другой стороны, возможны обобщения, связанные с рассмотрением параметрических множеств Y , X и \mathcal{F} сложной природы (Y — множество значений функции y).

Полезно заметить, что при отсутствии случайной ошибки понятие планирования эксперимента не теряет своего смысла. Остается критерий, отражающий погрешность модели, и становится очевидным, что задача выбора оптимальных узлов интерполяции, например, укладывается в описанную схему. С этой точки зрения ясно, что при имитационном эксперименте, в котором исследуется сложная детерминированная модель и па ее основе строится более простая, понятие планирования эксперимента может играть важную роль, хотя случайная погрешность при имитации может отсутствовать. Противоположный случай отсутствия систематической ошибки (погрешности модели) сравнительно хорошо исследован, и именно его часто считают методом планирования эксперимента.

Специальные задачи возникают в связи с изучением асимптотического поведения критериев оптимальности при увеличении числа экспериментов. Для простоты остановимся на примере постановки такого рода задачи для упомянутого случая двух критериев, характеризующих соответственно систематическую и случайную ошибку. При возрастании числа экспериментов параметрическая модель $\eta_0(x, \theta_{\text{ист}})$ обладает следующими очевидными свойствами:

а) Выражение $\rho(\eta - \eta_0)$ (а тем более (4) и (5)) не стремится к нулю при фиксированном m . Стремление систематической погрешности к нулю возможно лишь при возрастании m с ростом N ($m = m(N)$).

б) Повторение эксперимента в одних и тех же точках не влияет на $\rho(\eta - \eta_0)$, но уменьшает (кроме, может быть, специальных патологических случаев) величину случайной составляющей погрешности.

Кроме выбора при каждом фиксированном N точек наблюдения, интерес представляет выбор функции $m(N)$, обеспечивающей оптимальный порядок стремления к нулю суммарной погрешности. Для компромиссного критерия может быть поставлена и задача об обеспечении оптимального убывания суммарной погрешности (не только с точностью до порядка).

При таком подходе естественным образом может быть использован аппарат непараметрического оценивания функции регрессии.

Перечисленные постановки задач планирования допускают многочисленные обобщения, из которых в первую очередь пужно отметить практически важные случаи, когда X и Y являются множествами функций и предметом эксперимента является восстановление неизвестного оператора. Часто элементы X и Y в этих задачах подчинены ограничениям типа интегро-дифференциальных равенств и это создает специфические особенности при конструировании критерия: Здесь необходимо определять меру на множествах функций, подчиненных сложным ограничениям или находить верхнюю грань функционалов на таких множествах. Уместно заметить, что при столь общей трактовке в задачах, связанных с изучением динамических систем, теория планирования эксперимента оказывается разделом теории оптимального управления и должна использовать развитые в теории оптимального управления средства и методы.

3. Результаты в области планирования эксперимента имеют очевидное прикладное значение. Дорогостоящие эксперименты, а также эксперименты, которые невозможно воспроизвести повторно, требуют предварительного квалифицированного планирования. С развитием ЭВМ практически любые затраты на численное построение планов могут оказаться оправданными. Различные разделы теории планирования эксперимента в настоящее время развиты существенно в разной степени, но практические потребности требуют активной разработки всех разделов. По-видимому, в ближайшее время следует ожидать появления также новых разделов, при разработке которых существенную роль могут играть разделы, ставшие ныне классическими.

Ниже дается перечень основных разделов теории планирования эксперимента, затронутых в книге, с краткой их характеристикой. В п. 2 был кратко охарактеризован регрессионный эксперимент — теория его планирования наиболее развита. Здесь можно выделить разделы, характеризующиеся следующими типами моделей и критериев (табл. 1). В таблицу не вошли разделы, по которым результаты практически отсутствуют. Так, по планированию эксперимента при наличии систематической погрешности и нелинейной по параметрам модели регрессии результаты авторам неизвестны.

Следующий по обилию результатов раздел составляет планирование факторного эксперимента, отличающегося от регрессионного допущением, что независимые переменные могут принимать не только количественные, но и качественные значения. Оптимальное планирование здесь приводит к экстремальным задачам на перестановках и других структурах комбинаторного типа. Хотя формально регрессионные задачи можно рассматривать с позиции факторных моделей и наоборот, методика исследования в каждом случае индивидуальна.

В связи с планированием принято также выделять следующие типы эксперимента.

Таблица 1

№ п/п	Вид модели	Зависимость от параметров	Ошибки наблюдений	Систематическая ошибка	Область изменения контролируемой переменной X	Степень изученности проблемы
1	Параметрическая	Линейная	Некоррелированы	Отсутствует	Подмножество R^k	Имеется обширная литература
2	»	»	Зависимы с заданной ковариационной функцией	»	»	То же
3	»	»	Другие модели	»	»	Имеются отдельные результаты
4	»	Нелинейная	Различные модели из пп. 1—3	»	»	То же
5	»	Линейная	Имеют конечную дисперсию	Присутствует	»	Изучены отдельные частные случаи
6	»	»	То же	Отсутствует	Подмножество функционального пространства	Получен ряд результатов, аналогичных результатам п. 1
7	»	Линейная и нелинейная	Пренебрежимо малы	Присутствует	Подмножество векторного метрического пространства	Изучается теорией аппроксимации, наибольшее число результатов для случая $m = 1$
8	Непараметрическая	То же	Различные модели	Отсутствует	Подмножество функционального пространства	Намечены отдельные подходы

Экстремальный эксперимент, задача которого состоит в определении экстремальных значений функции регрессии (или комбинации факторов, при которых функция отклика принимает экстремальные значения). Методы его планирования тесно связаны с методами планирования регрессионного и факторного экспериментов, с одной стороны, и методами стохастического программирования, с другой. В этой области имеется обширная литература.

Эксперимент по проверке конкретной статистической гипотезы (дискриминирующий эксперимент). Это сравнительно изученный раздел, который также связан с планированием в регрессионных и факторных моделях.

Отсеивающий эксперимент, задача которого состоит в выделении значимых факторов. Теория его планирования активно развивается в последнем десятилетии.

Имитационный эксперимент, который, как правило, связан с имитацией изучаемого явления на ЭВМ или другом устройстве, позволяющем воспроизводить это явление с приемлемой точностью. Ряд результатов по его планированию получен в связи с использованием метода Монте-Карло, а также исследованием сложных систем (типа моделей ядерного реактора).

Перечисленные типы не исчерпывают всего многообразия экспериментальных ситуаций, но для них имеются математические модели и методы. Развитие методов анализа этих моделей позволяет, как правило, формулировать и исследовать задачи планирования эксперимента в более сложных ситуациях.

Следует отметить также, что многие из модификаций, аналогичных отмеченным в регрессионном эксперименте, свойственны и другим типам эксперимента.

СВЕДЕНИЯ ИЗ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

§ 1. Параметрические задачи статистического оценивания

Задачи планирования эксперимента тесно связаны с задачами математической статистики и обычно рассматриваются как ее составная часть. Это обусловлено наличием случайной ошибки эксперимента. С несколько более общей точкой зрения, высказанной во Введении, статистическая теория дает возможность конструировать критерий качества эксперимента. Подавляющее число содержательных результатов в теории планирования эксперимента получено в связи с задачами математической статистики и, более того, в связи с параметрическими ее задачами.

Далее кратко излагаются некоторые сведения, связанные с параметрической моделью случайной погрешности, изучаемой статистической теорией.

Параметрическая задача оценивания предполагает заданной модель — семейство распределений P_θ с неизвестным параметром θ из некоторого заданного множества Θ . Модель выбирается статистиком, исходя из априорной информации, из свойств, которым должно удовлетворять распределение наблюдаемых случайных величин.

Параметрическая задача оценивания обычно заключается в том, чтобы по совокупности выборочных значений случайной величины оценить значение нужной статистики функции $\gamma(\theta)$. Пусть d — оценка для $\gamma(\theta)$. Для нахождения погрешности от выбора оценки d значения $\gamma(\theta)$ вводится функция потерь $\varphi(d, \gamma(\theta))$. Функция потерь показывает, какой проигрыш будет иметь место, если по выборке $\Xi = \{x_1, \dots, x_n\}$ ($x_i \in X$) будет принята оценка $d = d(\Xi)$ при истинном значении параметра θ . Критерием качества оценки является функция риска $R(\theta, d) = E_\theta \varphi(d, \gamma(\theta))$. Статистик ищет оценку d , которая удовлетворяет его требованиям, т. е. принадлежит определенному классу оценок, и функция риска которой в нужном ему смысле оптимальна или близка к оптимальной. Обычно функция потерь, критерий оптимальности, требования, предъявляемые к оценке, как и сама модель в целом, выбираются из стандартных, широко применяемых в

статистике. Так, в качестве функции потерь чаще всего фигурирует квадратичная $(d - \gamma(\theta))^2$.

Ниже приведены определения и сведения, связанные с наиболее распространенными оценками.

1) Оценка d называется *допустимой* в классе оценок \mathcal{D} , если нет такой оценки $d_1 \in \mathcal{D}$, что $R(\theta, d_1) \leq R(\theta, d)$ для всех $\theta \in \Theta$ и $R(\theta, d_1) \neq R(\theta, d)$ для некоторого $\theta \in \Theta$. Таким образом, если оценка допустима, то в классе \mathcal{D} не найдется оценки d_1 , которая была бы не хуже, чем d для всех θ и лучше для некоторого θ . Допустимых оценок обычно существует очень много.

2) Оценка $d = \arg \min_{d_1 \in \mathcal{D}} \max_{\theta \in \Theta} R(\theta, d_1)$ называется *минимаксной* в классе оценок \mathcal{D} . При минимаксном подходе статистик исходит из того, что для минимаксной оценки риск в худшем случае оказывается минимальным.

3) Оценка $d = \arg \min_{d_1 \in \mathcal{D}} \int_{\Theta} R(\theta, d_1) \pi(\theta) d\theta$ называется *байесовской* для априорной плотности $\pi(\theta)$ в классе оценок \mathcal{D} .

Байесовский подход к оцениванию заключается в том, что считается известной априорная информация об истинном значении параметра θ , и эта априорная информация дана в виде некоторого априорного распределения на множестве Θ . Статистик пытается минимизировать ожидаемые потери, найдя оценку, минимизирующую математическое ожидание риска по априорному распределению.

4) Оценка d называется *несмещенной*, если $E_{\theta} d = \gamma(\theta)$ для всех $\theta \in \Theta$. Требование, чтобы математическое ожидание оценки давало истинное значение $\gamma(\theta)$, представляется довольно естественным. Величина $E_{\theta} d - \gamma(\theta)$ называется *смещением* оценки.

5) Пусть $\varphi(d, \gamma(\theta)) = (d - \gamma(\theta))^2$. Оценка d называется *несмещенной оценкой с минимальной дисперсией*, если для всех $\theta \in \Theta$

$$\text{var}(d, \gamma(\theta)) = E_{\theta} (d - \gamma(\theta))^2 = \min_{d_1 \in \mathcal{D}_1} E_{\theta} (d_1 - \gamma(\theta))^2$$

в классе \mathcal{D}_1 всех несмещенных оценок.

Для квадратичной функции потерь в классе несмещенных оценок существует граница снизу для функции риска. Ниже сформулирован соответствующий результат для задачи оценивания векторного параметра.

Теорема 1 (неравенство Крамера — Рао). Пусть $\{f(\Xi, \theta), \theta \in \mathbb{R}^m\}$ — семейство плотностей распределения на X^n (относительно некоторой меры $\nu(d\Xi)$), $G(\theta) = (g_1(\theta), \dots, g_k(\theta))^T$ — некоторая вектор-функция, $\hat{G}(\Xi)$ — несмещенная оценка $G(\theta)$, для всех $\theta \in \Theta$ существует матрица $\mathcal{D}(\theta) = [\partial g_i(\theta) / \partial \theta_j]$ ($i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, m$) частных производных функции $G(\theta)$, конечная непрерывная информационная матрица Фишера

$$I(\theta) = \left[\int_{X^n} \frac{\partial f(\Xi, \theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial f(\Xi, \theta)}{\partial \theta_j} \frac{\nu(d\Xi)}{f(\Xi, \theta)} \right]_{i,j=1}^m,$$

и выполнено условие регулярности в) из [35, с. 93]. Тогда, если $I(\theta) > 0$, то

$$E_{\theta}(\widehat{G}(\Xi) - G(\theta))(\widehat{G}(\Xi) - G(\theta))^T \geq D(\theta)I^{-1}(\theta)D^T(\theta). \quad (1)$$

Два обобщения неравенства (1) содержатся в гл. 5.

Отметим, что для случая, когда элементы x_1, \dots, x_n выборки Ξ независимы,

$$f(\Xi, \theta) \nu(d\Xi) = \prod_{j=1}^n P_{\theta}(dx_j) = \prod_{j=1}^n p(x_j, \theta) \mu(dx_j)$$

($\mu(dx)$ — некоторая мера на X),

$$I(\theta) = n \left[\int_X \frac{\partial p(x, \theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial p(x, \theta)}{\partial \theta_j} \frac{\mu(dx)}{p(x, \theta)} \right]_{i,j=1}^m$$

Оценка \widehat{G} , для которой в (1) достигается знак равенства, называется *эффективной* в классе несмещенных оценок.

В одномерном случае ($m = k = 1$) (1) означает

$$E(\widehat{G}(x) - G(\theta))^2 \geq [D(\theta)]^2/I(\theta),$$

а $I(\theta)$ называется *информационным количеством Фишера*.

б) Важным методом улучшения качества оценок является метод перехода к оценкам, зависящим только от достаточных статистик. Статистика T называется *достаточной*, если существуют такие мера $\nu(d\Xi)$ и измеримая функция g_{θ} , что $P_{\theta}(d\Xi) = g_{\theta}(T(\Xi))\nu(d\Xi)$, где $P_{\theta}(d\Xi)$ — распределение выборки Ξ .

Достаточная статистика обладает тем свойством, что она несет всю информацию о неизвестном параметре. Математически точный смысл этим словам придает следующее утверждение.

Если $\varphi(d, \gamma(\theta)) = w(d - \gamma(\theta))$, где w — выпуклая функция потерь, то для всех $\theta \in \Theta$ и произвольной оценки d имеет место неравенство

$$Ew(d_1 - \gamma(\theta)) \leq Ew(d - \gamma(\theta)),$$

где $d_1(T) = E_{\theta}(d|T)$.

Указанными выше критериями 1)–6) обычно руководствуются для конечных объемов выборок. В такой ситуации очень важную роль играет априорная информация о модели, вид функции потерь, характер требований, предъявляемых к поведению функции риска, несмещенность оценки, выбор класса оценок, сложность вычислений оценки.

Для того чтобы проводить сравнение оценок для больших объемов выборок, предполагается, что существует целая последовательность оценок $d_n = d_n(x_1, \dots, x_n)$ ($n = 1, 2, \dots$), построенных по одному к тому же методу (например, выборочные средние), и изучаются статистические свойства уже последовательностей оценок d_n .

Последовательность оценок d_n называется:

1а) *состоятельной* или *слабо состоятельной*, если для всех $\theta \in \Theta$ оценки d_n сходятся по P_θ -вероятности к θ , т. е. для любого $\alpha > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_\theta (|d_n - \theta| > \alpha) = 0$$

(здесь и в дальнейшем предполагается, что $\gamma(\theta) = \theta$, $\Theta \subset \mathbb{R}^m$);

2а) *сильно состоятельной*, если для всех $\theta \in \Theta$ с P_θ -вероятностью 1, оценки d_n сходятся к θ , т. е.

$$P_\theta (\lim_n d_n = \theta) = 1;$$

3а) *состоятельной в среднеквадратичном*, если для всех

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_\theta (d_n - \theta)^2 = 0;$$

4а) \sqrt{n} -*состоятельной*, если для всех $\theta \in \Theta$ и для любого $\delta > 0$ найдется такое $A > 0$, что $P_\theta (\sqrt{n}|d_n - \theta| > A) < \delta$ для всех n ;

5а) *асимптотически нормальной*, если для всех $\theta \in \Theta$ распределение случайного вектора $\sqrt{n}(d_n - \theta)$ сходится при $n \rightarrow \infty$ к нормальному вектору с нулевым средним и конечной дисперсионной матрицей $\Sigma(\theta)$;

6а) *асимптотически эффективной в точке* $\theta_0 \in \Theta$, если не существует такой последовательности оценок b_n , что

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{|\theta - \theta_0| < \delta} \frac{E_\theta \Phi(b_n, \theta)}{E_\theta \Phi(d_n, \theta)} < 1;$$

7а) *асимптотически эффективной в* Θ , если она асимптотически эффективна для всех $\theta \in \Theta$.

Ясно, что из выполнения одного из свойств 2а)—4а) следует выполнение свойства 1а). Свойство асимптотической эффективности обычно является гораздо более сильным свойством, чем свойства 1а)—4а). Если свойства 1а)—4а) в реальных ситуациях оказываются всегда выполненными, то о свойствах 5а)—7а) это сказать нельзя.

Интересным является вопрос об оценке снизу границы рисков последовательностей. В этом направлении для случая $\Theta = \mathbb{R}^1$ имеет место следующий результат.

Пусть семейство распределений $P_\theta(d \in \Xi)$ имеет непрерывно дифференцируемую по θ плотность $f(\Xi, \theta)$ и непрерывное информационное количество Фишера $I(\theta)$. Тогда для любых $\delta > 0$, $t \in \mathbb{R}^1$, произвольной последовательности оценок d_n параметра θ и любой выпуклой функции потерь w справедливо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{|\theta - t| < \delta} E_\theta w((nI(\theta))^{1/2} (d_n - \theta)) \geq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int w(x) \exp\{-|x|^2/2\} dx. \quad (2)$$

Всякая асимптотически эффективная последовательность оценок d_n после нормирования $(nI^{-1}(\theta))^{1/2}(d_n - \theta)$ имеет предельным нормальное распределение $\mathcal{N}(0, 1)$, и для любых двух асимптотически эффективных последовательностей оценок T_{n_1} , T_{n_2} по вероятности $\sqrt{n}(T_{n_1} - T_{n_2})$ стремится к 0 при $n \rightarrow \infty$.

Для квадратичной функции потерь неравенство (2) принимает вид

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{|\theta - \theta| < \delta} nE_{\theta}(d_n - \theta)^2 \geq I^{-1}(\theta),$$

т. е. граница снизу совпадает с границей, полученной для несмещенных оценок.

Для случая векторного параметра из \mathbb{R}^m при аналогичных условиях регулярности неравенство (2) также справедливо с заменой $\sqrt{2\pi}$ на $(2\pi)^{m/2}$.

Наиболее распространенными оценками параметра, для которых при широких предположениях [35] имеет место асимптотическая эффективность, являются оценки максимальной вероятности

$$\hat{\theta}_n = \arg \max_{\theta} \prod_{j=1}^n f(x_j, \theta) \pi(\theta), \quad (3)$$

где $\pi(\theta)$ — априорная плотность, задаваемая статистиком. Для случая $\pi(\theta) = 1$ оценка максимальной вероятности называется *оценкой максимального правдоподобия*. Если P_{θ} — многомерное нормальное распределение с вектором средних a и ковариационной матрицей D , то оценками максимального правдоподобия a, D являются выборочные средние и выборочная ковариационная матрица. Если $f(x, \theta)$ непрерывно дифференцируема по θ , то оценка максимума правдоподобия есть решение уравнения $\sum_{j=1}^n d \log f(x_j, \hat{\theta}) / d\theta = 0$. По аналогии с оценками максимума правдоподобия были введены M -оценки, как оценки \hat{t} , являющиеся решениями уравнений $\sum_{j=1}^n g(x_j, \hat{t}) = 0$, где g — некоторая функция [35]. Часто оказывается, что неприемлемую из вычислительных соображений или из соображений устойчивости модели оценку максимального правдоподобия можно заменить M -оценкой, имеющей предельное нормальное распределение с дисперсией, близкой к дисперсии предельного нормального распределения оценки максимума правдоподобия.

Отметим, что выше говорилось только о выборе оценок в рамках модели, однако статистик должен помнить, что в реальных задачах потери, которые он понесет, складываются из потерь в рамках модели и потерь из-за приближенного описания моделью реальной задачи.

Литература к § 1: [35]

§ 2. Линейная регрессионная модель

1. Основная схема линейного регрессионного анализа. Пусть в точках $x_j \in X$ ($j = 1, \dots, n$) наблюдаются случайные величины y_j , представимые в виде

$$y_j = \eta(x_j, \theta) + \varepsilon_j = \theta^T f(x_j) + \varepsilon_j,$$

где ε_j — случайные величины, $E\varepsilon_j = 0$, $E\varepsilon_i \varepsilon_r = \sigma_i^2 \delta_{ir}$, $\sigma_j = \sigma$ ($i = 1, \dots, n$, δ_{jr} — символ Кронекера), $\eta(x, \theta)$ — функция регрессии, зависящая от вектора неизвестных параметров $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)^T$ из \mathbf{R}^m ; $f(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))^T$ — вектор заданных линейно независимых на множестве X функций; $x_i \in X$ ($i = 1, \dots, n$). Задача состоит в оценивании θ . В матричных обозначениях $Y = (y_1, \dots, y_n)^T$, $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)^T$ и $F = (f_1(x_j), \dots, f_m(x_j))_{j=1}^n$ рассматриваемая схема записывается в виде $Y = F\theta + \varepsilon$, где $EY = F\theta$, и ковариационная матрица DY равна $\sigma^2 I_n$, где I_n — единичная матрица.

Приведенная схема носит название *схемы Гаусса — Маркова* и обозначается $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 I_n)$.

Задача оценивания параметров $\theta_1, \dots, \theta_m$ или линейных функционалов $t^T \theta$ ($t = (t_1, \dots, t_m)^T$) в линейном регрессионном анализе решается в классе линейных несмещенных оценок.

Оценка $\hat{\tau}$ векторной параметрической функции $\tau = T\theta$ (где T — произвольная матрица порядка $q \times m$) называется *линейной*, если $\hat{\tau} = AY$, где матрица A (порядка $q \times n$) не зависит от результатов наблюдений y_1, \dots, y_n . Пусть \mathcal{D}_τ — класс линейных несмещенных оценок для τ .

Наилучшей линейной несмещенной (НЛН) оценкой для τ называется оценка $\hat{\tau} = \text{Arg} \min_{\tilde{\theta} \in \mathcal{D}_\tau} D(\tilde{\theta})$, т. е. эффективная в классе \mathcal{D}_τ оценка.

Оценкой *метода наименьших квадратов (МНК)* называется оценка

$$\hat{\theta} = \hat{\theta}_n = \arg \min_{\theta \in \Theta} \sum_{j=1}^n \sigma_j^{-2} [y_j - \eta(x_j, \theta)]^2. \quad (4)$$

2. НЛН-оценки. Рассмотрим задачу линейного регрессионного анализа для схемы Гаусса — Маркова $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 I_n)$ и моделей полного ранга, т. е. таких моделей у которых ранг матрицы F равен числу оцениваемых параметров: $\text{rg}(F) = m$.

Теорема 2. Для схемы регрессионного анализа $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 I_n)$ справедливо:

1) НЛН-оценки параметров θ существуют, единственны и вычисляются по формуле $\hat{\theta} = (F^T F)^{-1} F^T Y$;

2) ковариационная матрица оценок $\hat{\theta}$ равна $D(\hat{\theta}) = \sigma^2 (F^T F)^{-1}$;

3) несмещенной оценкой для дисперсии σ^2 служит $s^2 = R_0^2 / (n - m)$, где $R_0^2 = (Y - F\hat{\theta})^T (Y - F\hat{\theta})$ — сумма квадратов остатков;

4) если $\tilde{\theta}$ — любая другая линейная несмещенная оценка для θ , то $D(\hat{\theta}) \leq D(\tilde{\theta})$ (и, следовательно, $D_{ii}(\hat{\theta}) \leq D_{ii}(\tilde{\theta})$ ($i = 1, \dots, m$), $|D(\hat{\theta})| \leq |D(\tilde{\theta})|$);

5) НЛН-оценки совпадают с МНК-оценками, т. е.

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\text{Arg min}} (Y - F\theta)^T (Y - F\theta). \quad (5)$$

Решение задачи (5) сводится к решению системы нормальных уравнений $F^T F \theta = F^T Y$, которая для моделей полного ранга имеет единственное решение, совпадающее с НЛН-оценками.

Минимизации суммы квадратов отклонений (4) можно дать и геометрическую интерпретацию: требуется найти следующее представление (оно всегда существует и единственно) вектора Y :

$$Y = F\hat{\theta} + (Y - F\hat{\theta}),$$

где $F\hat{\theta}$ — проекция Y на $\mathcal{L}(F)$, $(Y - F\hat{\theta})$ — вектор, ортогональный $\mathcal{L}(F)$, где $\mathcal{L}(F)$ — линейное подпространство, порожденное столбцами матрицы F . Далее, если разложить $F\hat{\theta}$ по базису $\mathcal{L}(F)$, то вектор коэффициентов этого разложения и есть $\hat{\theta}$, причем единственность этого разложения нарушается, если $\text{rg}(F) < m$.

Важно отметить, что система нормальных уравнений всегда совместна, так как $F^T Y \in \mathcal{L}(F^T) = \mathcal{L}(F^T F)$.

Если требуется оценить не все компоненты θ , а произвольную векторную параметрическую функцию $\tau = T\theta$, где T — $q \times m$ -матрица, то НЛН-оценкой для τ служит $\hat{\tau} = T\hat{\theta}$ с ковариационной матрицей $D(\hat{\tau}) = \sigma^2 T (F^T F)^{-1} T^T$. При этом, если $\tilde{\tau}$ — любая линейная несмещенная оценка для τ , то $D(\hat{\tau}) \leq D(\tilde{\tau})$.

* В частности, НЛН-оценкой функции регрессии $\eta(x, \theta)$ в произвольной точке x является $\hat{\eta}(x) = f^T(x)\hat{\theta}$ с дисперсией $d(x) = D(\hat{\eta}(x)) = f^T(x)D(\hat{\theta})f(x)$.

Пусть в точках x_j ($j = 1, \dots, n$) проведено по r_j измерений $y_{j1}, \dots, y_{jr_j}, \dots, y_{nr_n}$. Тогда НЛН-оценка $\hat{\theta}$ и ее ковариационная матрица могут быть вычислены по формулам

$$\hat{\theta} = (F^T R F)^{-1} F^T R Y, \quad D(\theta) = \sigma^2 (F^T R F)^{-1},$$

где $R = (r_j \delta_{jl})_{j,l=1}^n$, $Y = (\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_n)^T$, $\bar{y}_j = r_j^{-1} \sum_{r=1}^{r_j} y_{jr}$. Последнее свойство полезно при большом объеме экспериментальных данных, так как позволяет в процессе вычислений уменьшить размерность матриц. В этом случае НЛН-оценки совпадают с оценками (взвешенного) метода наименьших квадратов, в котором роль матрицы весов играет матрица R . Если ошибки

измерений распределены по нормальному закону $\mathcal{N}(\theta, \sigma^2 I_n)$, то НЛН-оценки эффективны в классе всех несмещенных оценок, совпадают с оценками максимума правдоподобия и распределены по нормальному закону $\mathcal{N}(\theta, \sigma^2 (F^T F)^{-1})$.

Приведем два асимптотических свойства НЛН-оценок при увеличении числа наблюдений $N = \sum_{j=1}^n r_j$.

1) НЛН-оценка вектора θ состоятельна в среднеквадратичном смысле, если $\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} (F_N^T F_N) = C$ (условие сильной регулярности), где C — невырожденная конечная матрица размера $m \times m$.

2) НЛН-оценка вектора θ состоятельна в среднеквадратичном смысле тогда и только тогда, когда минимальное собственное число матрицы $F_N^T F_N$ стремится к $+\infty$ при $N \rightarrow +\infty$ (условие Эйкера).

Для асимптотической нормальности НЛН-оценки недостаточно просто некоррелированности, а требуется независимость и одинаковая распределенность ошибок измерений $\{\epsilon_j\}$. В этих предположениях:

1) НЛН-оценка асимптотически нормальна тогда и только тогда, когда $\max_{i,j} (c_{Nij}^2) \rightarrow 0$ ($N \rightarrow \infty$), где c_{Nij} — (i, j) -й элемент матрицы

$$C_N = \frac{1}{\sigma} (F_N^T F_N)^{-1/2} F_N^T.$$

2) НЛН-оценка асимптотически нормальна, если последовательность матрицы F_N сильно регулярна и для любого $i = 1, \dots, m$

$$\frac{1}{N} \max_{j=1, \dots, N} f_i^2(x_j) \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty,$$

причем при выполнении одного из этих условий

$$\sqrt{n}(\hat{\theta}_N - \theta) \rightarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2 C), \quad N \rightarrow \infty.$$

Кроме НЛН-оценок иногда для оценивания θ используют гребневые оценки (см. § 4).

3. НЛН-оценки для моделей неполного ранга. Рассмотрим задачу регрессионного анализа, оставаясь в рамках основной схемы Гаусса—Маркова, но в предположении $\text{rg}(F) = r < m$.

Говорят, что векторная параметрическая функция $\tau = T\theta$ допускает оценку, если существует линейная функция от Y , математическое ожидание которой равно $T\theta$.

Справедливо следующее утверждение:

1) $\tau = T\theta$ допускает оценку тогда и только тогда, когда $t_i^T \in \mathcal{L}(F^T)$, где t_i ($i = 1, \dots, q$) — строки матрицы T .

2) Все векторные параметрические функции $\tau = T\theta$ допускают оценку тогда и только тогда, когда $\text{rg}(F) = m$.

По этой причине, если $\text{rg } F < m$, то нельзя оценить полный вектор параметров θ , и задача регрессионного анализа может быть сформулирована только как задача нахождения наилучших линейных несмещенных оценок некоторых функций от неизвестных параметров.

Теорема 3 (Гаусс, Марков). Если в схеме Гаусса — Маркова $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 I_n)$ векторная параметрическая функция $\tau = T\theta$ допускает оценку и $\hat{\theta}$ — произвольное решение системы нормальных уравнений, то:

- 1) $\hat{\tau} = T\hat{\theta}$ является НЛН-оценкой вектора $\tau = T\theta$;
- 2) оценка $\hat{\tau} = T\hat{\theta}$ единственна;
- 3) несмещенной оценкой для дисперсии σ^2 служит

$$\hat{\sigma}^2 = R_0^2 / (n - r).$$

Из теоремы Гаусса — Маркова следует, что для нахождения НЛН-оценки $T\theta$ достаточно иметь любое решение $\hat{\theta}$ системы нормальных уравнений. К решению последней задачи хорошо приспособлен аппарат обобщенного обращения матриц.

Обобщенная обратная матрица для произвольной матрицы S размера $n \times m$ определяется как любая матрица S^- , удовлетворяющая условию $SS^-S = S$. Так определенная матрица S^- всегда существует, но не единственна. Иногда к обобщенной обратной матрице предъявляются дополнительные требования. Например, можно определить обобщенную обратную матрицу S^+ , в отличие от S^- , как матрицу, для которой выполняются следующие четыре свойства:

$$SS^+S = S, \quad S^+SS^+ = S^+, \quad (SS^+)^T = SS^+, \quad (S^+S)^T = S^+S.$$

Матрица S^+ существует и единственна. Она называется *обобщенной обратной в смысле Мура и Пенроуза* или *псевдообратной*. Полезной оказывается такая характеристика псевдообратной матрицы:

$$S^+ = \lim_{\delta \rightarrow 0} (S^T S + \delta^2 I_m)^{-1} S^T = \lim_{\delta \rightarrow 0} S^T (SS^T + \delta^2 I_n)^{-1}.$$

Обобщенные обратные матрицы позволяют записать все решения совместной системы нормальных уравнений в виде

$$\hat{\theta} = (F^T F)^{-1} F^T Y + (H - I_m) z,$$

где $H = (F^T F)^{-1} F^T F$, z — произвольный m -мерный вектор. Отсюда $E\hat{\theta} = H\theta + (H - I_m)z$, и $\hat{\theta}$ является несмещенной оценкой θ тогда и только тогда, когда $r = m$, а число линейно независимых решений $\hat{\theta}$ равно $m - r + 1$.

По теореме Гаусса — Маркова вычисление единственной НЛН-оценки $\hat{\tau}$ для $\tau = T\theta$, допускающей оценку, можно осуществить по формуле $\hat{\tau} = T\hat{\theta} = T(F^T F)^{-1} F^T Y$, где использована одна из форм условий допустимости оценивания $T\theta$: $TH = T$.

Для ковариационной матрицы вектора $\hat{\tau}$ имеем

$$D(\hat{\tau}) = \sigma^2 T(F^T F)^{-1} T^T,$$

Не нарушая общности, можно считать параметрические функции τ_1, \dots, τ_q линейно независимыми, т. е. принять, что $\text{rg}(T) = q$. Тогда ковариационная матрица $D(\hat{\tau})$ невырождена. Как и в случае моделей полного ранга,

$$D(\hat{\tau}) \leq D(\tilde{\tau}),$$

где $\tilde{\tau}$ — любая линейная несмещенная оценка $T\theta$.

4. Проверка гипотез и построение доверительных множеств в линейном регрессионном анализе. Многомерные задачи проверки гипотез в линейном регрессионном анализе обычно решаются в предположении, что ошибки ε_i нормально распределены, т. е. $Y \sim \mathcal{N}(F\theta, \sigma^2 I_n)$. Это объясняется тем, что в реальных задачах часто распределение ε_i близко к нормальному, а для распределений, отличных от нормального, вычислительные процедуры имеют крайне сложный вид. Предлагаемые здесь критерии проверки гипотез являются равномерно наиболее мощными критериями в некоторых естественных классах инвариантных критериев. Они построены при предположении, что параметр σ неизвестен.

Начнем с проверки гипотез для случая скалярной параметрической функции $\tau = t^T \theta$: гипотеза $H_0: \tau = t^T \theta$ и альтернатива $H_1: \tau \neq t^T \theta$. Статистикой для проверки гипотезы H_0 будет $\hat{l} = (\hat{\tau} - \tau) / \gamma s$, где $\hat{\tau}$ — НЛН-оценка $t^T \theta$, $\hat{\tau} = t^T (F^T F)^{-1} F^T Y$, $s^2 = R_0^2 / (n - r)$ — оценка дисперсии σ^2 , $R_0^2 = Y^T [I_n - F(F^T F)^{-1} F^T] Y$, $\gamma^2 \sigma^2 = \sigma^2 t^T (F^T F)^{-1} t$ — дисперсия $\hat{\tau}$. Статистика \hat{l} имеет распределение Стьюдента, и для уровня значимости α гипотеза H_0 принимается, если $|\hat{l}| \leq t_\alpha$, и отвергается, если $|\hat{l}| > t_\alpha$. Значение t_α определяется из равенства $P(|\hat{l}| > t_\alpha) = \alpha$. В качестве $(1 - \alpha)$ -доверительного интервала для τ берется интервал $(\hat{\tau} - \gamma s t_\alpha, \hat{\tau} + \gamma s t_\alpha)$.

Перейдем к случаю, когда проверяется гипотеза $H_0: \tau = T\theta = \tau_0$, где τ_0 — заданный q -мерный вектор и матрица T имеет ранг q . Тогда для проверки гипотезы H_0 используется статистика

$$\hat{L} = q^{-1} (\hat{\tau} - T\theta)^T [T(F^T F)^{-1} T^T]^{-1} (\hat{\tau} - T\theta) / (R_0^2 (n - r)^{-1}),$$

имеющая распределение Фишера $\mathcal{F}(q, n - r)$. Для уровня значимости α гипотеза H_0 принимается, если $\hat{L} < t_\alpha$, $P(\hat{L} > t_\alpha) = \alpha$. В качестве $(1 - \alpha)$ -доверительного эллипсоида берется эллипсоид, задаваемый неравенством

$$q^{-1} s^{-2} (\hat{\tau} - \tau_0)^T [T(F^T F)^{-1} T^T]^{-1} (\hat{\tau} - \tau_0) < t_\alpha.$$

С подобными задачами проверки гипотез наиболее часто приходится иметь дело при выборе одной из двух конкурирующих

моделей:

$$\eta_1(x, \theta) = \theta_1 f_1(x) + \dots + \theta_{m_1} f_{m_1}(x),$$

$$\eta_2(x, \theta) = \theta_1 f_1(x) + \dots + \theta_{m_1} f_{m_1}(x) + \theta_{m_1+1} f_{m_1+1}(x) + \dots + \theta_{m_2} f_{m_2}(x),$$

когда требуется проверить, насколько существен эффект от введения в модель факторов с номерами $m_1 + 1, \dots, m_2$.

5. Линейные ограничения на параметры. Пусть в рамках схемы $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 I_n)$ имеются ограничения типа равенств на параметры: $H\theta = 0$, где H — матрица размера $q \times m$ ($0 < q < m$), $\text{rg } H = q$, и пусть общее решение системы уравнений $H\theta = 0$ есть $\theta = Q\theta_{m-q}$, где Q — матрица размера $(m - q) \times m$, $\text{rg } Q = m - q$, $HQ = 0$, θ_{m-q} — вектор из $m - q$ элементов, которые принимаются за новые параметры. Заменив вектор θ из m параметров на вектор θ_{m-q} из $m - q$ параметров, получим новую схему (редуцированную модель) $\mathcal{R}(FQ\theta_{m-q}, \sigma^2 I_n)$. Несмещенная оценка $\hat{\theta}_{m-q}$ вектора параметров θ_{m-q} может быть найдена в редуцированной модели по методу наименьших квадратов в случае, если FQ — матрица полного ранга. Но

$$\text{rg}(FQ) = \text{rg} \begin{bmatrix} F \\ H \end{bmatrix} - \text{rg } H,$$

поэтому FQ есть матрица полного ранга тогда и только тогда, когда $\begin{bmatrix} F \\ H \end{bmatrix}$ есть матрица полного ранга. Оценкой вектора θ является $\hat{\theta} = Q\hat{\theta}_{m-q}$.

Аналогично пп. 2—4 (с заменой m на $m - q$) можно находить МНК-оценки параметрических функций, строить ковариационную матрицу вектора МНК-оценок или оценок параметрических функций, проводить проверки различных гипотез и строить доверительный эллипсоид.

6. Учет коррелированности и неравноточности наблюдений. Пусть $D(Y) = \sigma^2 G$, $G > 0$. Преобразованием $Z = G^{-1/2}Y$ этот случай легко сводится к основной схеме:

$$E(Z) = G^{-1/2}F\theta = U\theta, \quad D(Z) = \sigma^2 I_n.$$

Для перенесения результатов, справедливых для основной схемы из п. 2, на этот случай нужно в соотношениях п. 2 заменить Y и F на $G^{-1/2}Y$ и $G^{-1/2}F$. Так, система нормальных уравнений записывается следующим образом:

$$F^T G^{-1} F \theta = F^T G^{-1} Y,$$

а ее решение для моделей полного ранга

$$\hat{\theta} = (F^T G^{-1} F)^{-1} F^T G^{-1} Y$$

носит название *оценки (обобщенного) МНК*.

Если и только если $\mathcal{L}(GF) \subset \mathcal{L}(F)$, то оценки (обобщенного) МНК совпадают с оценками МНК.

Для моделей неполного ранга, если $\tau = T\theta$ допускает оценку, НЛН-оценка для τ находится по формуле

$$\hat{\tau} = T(F^T G^{-1} F)^{-1} F^T G^{-1} Y,$$

Изменяются и другие выражения, содержащие Y и F . Очевидно, при указанных преобразованиях модели сохраняются все оптимальные свойства НЛН-оценок, указанные для случая некоррелированных и равнооточных наблюдений.

Схема $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 G)$ сводится таким простым способом к схеме Гаусса — Маркова $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 I_n)$ только в том случае, когда матрица G имеет полный ранг. Для случая вырожденной ковариационной матрицы G приведенные выше рассуждения неприменимы. Если в указанной схеме $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 G)$ векторная параметрическая функция $\tau = T\theta$ допускает оценку, то единственная НЛН-оценка для τ вычисляется по формуле

$$\hat{\tau} = TF^+ [I_n - ((\bar{G}^{-1/2})^+ G^{1/2})^T] Y,$$

где $\bar{G}^{1/2} = G^{1/2} (I_n - FF^+)$.

7. Учет неадекватности принятой модели и истинной зависимости. Одним из методов учета неадекватности модели при линейном оценивании является следующий. Пусть принятая модель и истинная функция регрессии представимы соответственно в виде

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{m_1}(x) &= (f^{(1)}(x))^T \hat{\theta}^{(1)}, \\ \eta_{m_2}(x) &= (f^{(1)}(x))^T \theta^{(1)} + (f^{(2)}(x))^T \theta^{(2)} = f^T(x) \theta, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} f^T(x) &= ((f^{(1)}(x))^T ; (f^{(2)}(x))^T) = \\ &= (f_1(x), \dots, f_{m_1}(x) ; f_{m_1+1}(x), \dots, f_{m_2}(x)), \\ \theta^T &= ((\theta^{(1)})^T ; (\theta^{(2)})^T) = (\theta_1, \dots, \theta_{m_1} ; \theta_{m_1+1}, \dots, \theta_{m_2}), \\ (\hat{\theta}^{(1)})^T &= (\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_{m_1}), \quad m_1 < m_2. \end{aligned}$$

В случае некоррелированных и равнооточных наблюдений приходим к схеме $\mathcal{R}(F_1 \theta^{(1)} + F_2 \theta^{(2)}, \sigma^2 I_n)$, где $F_1 = (f_1(x_j), \dots, f_{m_1}(x_j))_{j=1}^n$, $F_2 = (f_{m_1+1}(x_j), \dots, f_{m_2}(x_j))_{j=1}^n$, которая обобщает основную схему Гаусса — Маркова на случай присутствия смещения $(f^{(2)}(x))^T \theta^{(2)}$. При ее исследовании будем предполагать, что $\text{rg}(F_1) = m_1$ и оценка $\hat{\theta}^{(1)}$ линейна относительно результатов наблюдений $\hat{\theta}^{(1)} = AY$.

Очевидно, что полностью устранить смещение, т. е. для всех $x \in X$ добиться того, чтобы $E(\hat{\eta}_{m_1}(x)) = \eta_{m_2}(x)$, в рассматриваемой схеме нельзя, а можно лишь ставить задачу о минимизации уклонения $E\hat{\eta}_{m_1}(x)$ от $\eta_{m_2}(x)$ в смысле выбранной метрики. Да-

лее в качестве меры близости $E\hat{\eta}_{m_1}(x)$ и $\eta_{m_2}(x)$ используется метрика пространства $L_2(\mu)$, т. е. требуется минимизировать среднеквадратичную систематическую ошибку

$$B = \int_X [\eta_{m_2}(x) - E\hat{\eta}_{m_1}(x)]^2 \mu(dx).$$

Имеет место следующее утверждение.

В схеме $\mathcal{R}(F, \theta^{(1)} + F_2 \theta^{(2)}, \sigma^2 I_n)$:

1) необходимым и достаточным условием несмещенности оценок $\hat{\theta}^{(1)} = AY$ по отношению к произвольной векторной параметрической функции $T\theta$ (условием допустимости оценивания $T\theta$) служит выполнение матричного равенства $AF = T$. При этом единственная НЛН-оценка $T\theta$ находится по формуле

$$\hat{\theta}^{(1)} = T(F^T F)^{-1} F^T Y,$$

а ее ковариационная матрица равна

$$D(\hat{\theta}^{(1)}) = \sigma^2 T(F^T F)^{-1} T^T.$$

2) К задаче несмещенного оценивания $\theta^{(1)}$ приходим, полагая $T = (I_{m_1} : 0)$, а к задаче оценивания с минимальным среднеквадратичным смещением B при $(I_{m_1} : W_{11}^{-1} W_{12})$, где

$$W_{11} = \int_X f^{(1)}(x) (f^{(1)}(x))^T \mu(dx), \quad W_{12} = \int_X f^{(1)}(x) (f^{(2)}(x))^T \mu(dx).$$

Заметим, что если функции $f_1(x), \dots, f_{m_2}(x)$ ортонормированы в X , то удастся одновременно удовлетворить обоим требованиям, предъявленным в этом пункте к оценкам $\hat{\theta}^{(1)}$.

8. Многомерная (многооткликковая) ситуация. Пусть при каждом значении независимой переменной $x \in X$ получается вектор $y^T(x) = (y^1(x), \dots, y^q(x))$, т. е. функция регрессии $\eta(x, \theta)$ принимает векторные значения, которые в одном эксперименте часто естественно считать коррелированными:

$$\eta(x, \theta) = (\eta^1(x, \theta), \dots, \eta^q(x, \theta))^T, \quad \eta^i(x, \theta) = \theta^T f^i(x).$$

Положим $\Phi(x) = \|f^1(x), \dots, f^q(x)\|^T$ — семейство $q \times m$ -матриц. Линейная регрессионная q -мерная модель записывается в виде

$$y_i = \eta(x_i; \theta) + \varepsilon_i, \quad E\varepsilon_i = 0, \quad \text{cov}(\varepsilon_i) = \sum(x_i).$$

Для семейства $p \times q$ -матриц $w(x_i)$ ($i = 1, \dots, N$) $pN \times q$ -матрица $\text{Vec } w(x[1:N])$ определяется так:

$$\text{Vec } w(x[1:N]) = (w^T(x_1); \dots, w^T(x_N))^T.$$

Тогда многомерная модель эквивалентна одномерной $\mathcal{R}(\text{Vec } \Phi(x[1:N])\theta, G)$ для измерений $\text{Vec } y(x[1:N])$, где $G = \text{diag}(\sum(x[1:N]))$ — матрица с квадратными блоками $\sum(x_1), \dots, \sum(x_N)$ на диагонали.

9. Некоторые формулы матричного анализа. При построении оценок параметров регрессионных моделей, функций $\psi(x, \xi)$, $\psi(\mu, M)$, $q(M)$ из гл. 2 и во многих других случаях полезны приведенные ниже формулы матричного анализа. В настоящем пункте приняты следующие обозначения: $\mathcal{M}_{n_1 \times n_2}$ — множество вещественных матриц порядка $n_1 \times n_2$;

$$\mathcal{M}_n = \mathcal{M}_{n \times n}; \quad \mathcal{M}_{n_1 \times n_2}^{(m)} = \{A \in \mathcal{M}_{n_1 \times n_2} \mid \text{rg } A = m\},$$

$$\mathcal{M}_n^{\geq} = \{A \in \mathcal{M}_n \mid A = A^T, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n: x^T A x \geq 0\} -$$

множество неотрицательно определенных матриц;

$$\mathcal{M}_n^> = \{A \in \mathcal{M}_n \mid A = A^T, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n: x^T A x > 0\} -$$

множество положительно определенных матриц; матрица $A \in \mathcal{M}_{n_1 \times n_2}$ состоит из элементов a_{ij} ($i = 1, \dots, n_1, j = 1, \dots, n_2$); $\lambda_1(A), \dots, \lambda_n(A)$ — собственные числа матрицы $A \in \mathcal{M}_n$, $\lambda_i = \lambda_i(A)$ ($i = 1, \dots, n$); $I_n \in \mathcal{M}_n$ — единичная матрица. Вместо слов «для любых» пишется символ « \forall », вместо «существует» — символ « \exists », вместо «следует» — символ « \Rightarrow », вместо «имеет место» — символ «:»;

$$\forall A \in \mathcal{M}_n: \text{tr } A = \sum_{i=1}^n a_{ii} = \sum_{i=1}^n \lambda_i,$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n: \text{tr}(A + B) = \text{tr } A + \text{tr } B, \quad \text{tr}(AB) = \text{tr}(BA);$$

$$\forall a, b \in \mathbb{R}^n: \text{tr}(ba^T) = a^T b,$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n \quad \forall b \in \mathbb{R}^n: \text{tr}(Abb^T) = b^T A b = \text{tr}(bb^T A),$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n: \det A = \prod_{i=1}^n \lambda_i.$$

Если A — невырожденная матрица, то A^{-1} обозначает обратную к ней, если $A = [a_{ij}]_n$, то $A^{-1} = [a^{ij}]_n$;

$$\forall A \in \mathcal{M}_{n \times m} \quad \forall B \in \mathcal{M}_{m \times n}: (I_n + AB)^{-1} = I_n - A(I_m + B^T A)^{-1} B,$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^{(n)} = \mathcal{M}_{n \times n}^{(n)}: (A + B)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}(A^{-1} + B^{-1})^{-1} A^{-1},$$

$$\begin{aligned} \forall A \in \mathcal{M}_n^{(n)} \quad \forall a, b \in \mathbb{R}^n: (A + ab^T)^{-1} = \\ = A^{-1} - (1 + b^T A^{-1} a)^{-1} A^{-1} a b^T A^{-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \forall A \in \mathcal{M}_n^{(n)} \quad \forall b \in \mathbb{R}^n \quad \forall \alpha \in [0, 1]: ((1 - \alpha) A + \alpha b b^T)^{-1} = \\ = (1 - \alpha)^{-1} (A^{-1} - \alpha A^{-1} b b^T A^{-1} / (1 - \alpha + \alpha b^T A^{-1} b)), \end{aligned}$$

$$\det((1 - \alpha) A + \alpha b b^T) = (1 - \alpha)^n \det A (1 + \alpha b^T A^{-1} b / (1 - \alpha)),$$

$$\begin{aligned} \forall A \in \mathcal{M}_n^{(n)} \quad \forall B \in \mathcal{M}_{n \times m}: \det(A + B B^T) = \\ = \det A \det(I_m + B^T A^{-1} B), \end{aligned}$$

Если все элементы a_{ij} матрицы $A \in \mathcal{M}_{n_1 \times n_2}$ — дифференцируемые по некоторому параметру t функции, то $\frac{d}{dt} A$ обозначает матрицу $\| da_{ij}/dt \|_{n_1 \times n_2} \in \mathcal{M}_{n_1 \times n_2}$;

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^{(n)}: \frac{dA^{-1}}{dt} = -A^{-1} \frac{dA}{dt} A^{-1}, \quad \frac{d}{dt} \ln \det A = \operatorname{tr} \left(A^{-1} \frac{dA}{dt} \right),$$

$$\frac{dA^k}{da_{ji}} = \sum_{l=0}^{k-1} A^l E_{ji} A^{k-l-1}, \quad \frac{dA^{-k}}{da_{ij}} = - \sum_{l=0}^{k-1} A^{-l-1} E_{ij} A^{-k+l},$$

где $k = 1, 2, \dots$, матрица $E_{ij} \in \mathcal{M}_n$ имеет все элементы, равные нулю, за исключением элемента с индексами (i, j) , который равен 1. При взятии производных по элементам матрицы все ее элементы считаются независимыми (т. е. производные берутся в множестве \mathcal{M}_n).

Пусть Ψ — гладкая функция, заданная на $\mathcal{M}_n^{(n)}$; тогда

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^{(n)}: \frac{\partial \Psi [A]}{\partial A} = \left[\frac{\partial \Psi [A]}{\partial a_{ij}} \right]_n = -A^{-1} \frac{\partial \Psi [A]}{\partial A^{-1}} A^{-1}.$$

В частности, $\frac{\partial \ln \det A}{\partial A} = A^{-1}$, $\frac{\partial \operatorname{tr} BA}{\partial A} = B^T$ ($B \in \mathcal{M}_n$).

Если $A = \begin{bmatrix} B & C \\ D & E \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_n^{(n)}$, где $B \in \mathcal{M}_{n_1}^{(n_1)}$, $C \in \mathcal{M}_{n_1 \times (n-n_1)}$, $D \in \mathcal{M}_{(n-n_1) \times n_1}$, $E \in \mathcal{M}_{n-n_1}^{(n-n_1)}$, $n_1 \in \{1, \dots, n-1\}$, то

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} (B - CE^{-1}D)^{-1} & -B^{-1}C(E - DB^{-1}C)^{-1} \\ -(E - DB^{-1}C)^{-1}DB^{-1} & (E - DB^{-1}C)^{-1} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} (B - CE^{-1}D)^{-1} & -(B - CE^{-1}D)^{-1}CE^{-1} \\ -E^{-1}D(B - CE^{-1}D)^{-1} & (E - DB^{-1}C)^{-1} \end{bmatrix}.$$

Если $A \in \mathcal{M}_n: A = A^T$, то матрица A называется *симметричной*. Для $a = (a^{(1)}, \dots, a^{(n)})^T \in \mathbb{R}^n$ символ $\operatorname{diag}(a)$ обозначает матрицу $[\delta_{ij}a^{(i)}]_n$, где δ_{ij} — символ Кронекера;

$$\forall A \in \mathcal{M}_n: A = A^T \Rightarrow [(\forall i \in \{1, \dots, n\}: \lambda_i \in \mathbb{R}^1),$$

$$(\exists C \in \mathcal{M}_n^{(n)}: C^T C = I_n, \quad A = C \operatorname{diag}((\lambda_1, \dots, \lambda_n)^T) C^T),$$

$$\min_{1 \leq i \leq n} \lambda_i \leq \min_{1 \leq i \leq n} a_{ii}, \quad \max_{1 \leq i \leq n} a_{ii} \leq \max_{1 \leq i \leq n} \lambda_i],$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> \quad \forall p \in \mathbb{R}^1: \min_{1 \leq i \leq n} \lambda_i \leq \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_i^p \right)^{1/p} \leq \max_{1 \leq i \leq n} \lambda_i.$$

Если квадратная матрица A представима в виде $A = B^T B$, то по определению $B = A^{1/2}$;

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> \quad \exists B \in \mathcal{M}_n: B = A^{1/2},$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^{\geq} \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} : \lambda_i \geq 0,$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} : \lambda_i > 0,$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> : \left(\frac{1}{n} \operatorname{tr} A\right)^n \geq \det A = \prod_{i=1}^n \lambda_i, \quad \det A \leq \prod_{i=1}^n a_{ii},$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> : \det A = \prod_{i=1}^n a_{ii} \Leftrightarrow A = \operatorname{diag}((a_{11}, \dots, a_{nn})^T),$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\} : |a_{ij}| \leq \sqrt{a_{ii}a_{jj}} \leq \frac{1}{2}(a_{ii} + a_{jj}),$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : \max_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(A+B) \leq \max_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(A) + \max_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(B),$$

$$\min_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(A+B) \geq \min_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(A) + \min_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(B),$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> \quad \forall \alpha \in (0, 1) : \det(\alpha A + (1-\alpha)B) \geq (\det A)^\alpha (\det B)^{1-\alpha},$$

причем равенство достигается только при $A = B$,

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : (\det(A+B))^{1/n} \geq (\det A)^{1/n} + (\det B)^{1/n},$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> : A^{-1} \in \mathcal{M}_n^>,$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} : a^{ii} \geq 1/a_{ii},$$

где $A = \{a_{ij}\}$, $A^{-1} = \{a^{ij}\}$,

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> : \max_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(A^{-1}) = (\min_{1 \leq i \leq n} \lambda_i(A))^{-1},$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : ABA \in \mathcal{M}_n^>,$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n : A = A^T \Rightarrow \max_{1 \geq i \geq n} \lambda_i = \sup_{a \in \mathbb{R}^n} \frac{a^T A a}{a^T a}, \quad \min_{1 \leq i \leq n} \lambda_i = \inf_{a \in \mathbb{R}^n} \frac{a^T A a}{a^T a},$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> \quad \forall a, b \in \mathbb{R}^n : (a^T A^{-1} a)(b^T A b) \geq (a^T b)^2.$$

Для $A, B \in \mathcal{M}_n^>$ соотношения $A \geq B$ и $A > B$ означают соответственно, что $A - B \in \mathcal{M}_n^{\geq}$ и $A - B \in \mathcal{M}_n^>$.

Множества \mathcal{M}_n^{\geq} и $\mathcal{M}_n^>$ с бинарным отношением \geq являются частично упорядоченными, а бинарное отношение $>$ на этих множествах транзитивно и антисимметрично;

$$\forall A, B, C \in \mathcal{M}_n^> : A C A > B C B \Rightarrow A > B,$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : A^2 > B^2 \Rightarrow A > B,$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : (A > B, AB = BA) \Rightarrow (\forall m \in \{1, 2, \dots\} : A^m > B^m),$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : A > B \Rightarrow \det A > \det B,$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : A > B \Leftrightarrow A^{-1} < B^{-1},$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> : A \geq B \Leftrightarrow A^{-1} \leq B^{-1},$$

$$\forall A \in \mathcal{M}_n^> : A + A^{-1} \geq 2I_n,$$

$$\forall A, B \in \mathcal{M}_n^> \quad \forall \alpha \in (0, 1) : \alpha A^{-1} + (1 - \alpha)B^{-1} \geq (\alpha A + (1 - \alpha)B)^{-1},$$

причем равенство достигается только при $A = B$.

Литература к § 2: [2, 19, 81, 84, 85, 92*, 93, 114*, 183].

§ 3. Линейный регрессионный анализ при наличии априорной информации о параметрах

В настоящем параграфе приведены оптимальные линейные оценки параметров стандартной линейной регрессионной модели $\mathcal{R}(F\theta, \sigma^2 I_n)$ при наличии различных видов априорных сведений относительно $\theta \in \mathbb{R}^m$.

1. Основные виды априорной информации о параметрах. Пусть качество линейной оценки $\hat{\theta} = AY + t$ параметра θ характеризуется величиной

$$J(\theta) = \Phi\{E[(\theta - AY - t)(\theta - AY - t)^T | \theta]\},$$

где Φ — такая выпуклая функция матричного аргумента, что $\Phi(M_1) \geq \Phi(M_2)$, если $M_1 - M_2 \geq 0$. Величина $J(\theta)$ определяет суммарную (случайную и систематическую) ошибку предсказания θ с помощью $\hat{\theta}$ с точностью до вторых моментов. Частным случаем $J(\theta)$ являются обобщенные квадратичные потери:

$$\begin{aligned} E[(\theta - AY - t)^T G (\theta - AY - t) | \theta] = \\ = \text{tr } GE[(\theta - AY - t)(\theta - AY - t)^T], \end{aligned}$$

где $G \geq 0$ — некоторая матрица.

Байесовской оценкой называется

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \int_{\mathbb{R}^m} J(\theta) P(d\theta),$$

где $P(d\theta)$ — заданное априорное распределение на пространстве параметров. При минимаксном подходе предполагается априори известным, что $\theta \in \Omega \subset \mathbb{R}^m$, где Ω — заданное множество. В качестве критерия оптимальности оценки естественно выбрать величину $\sup_{\theta \in \Omega} J(\theta)$. Оценки, минимизирующие эту величину, называются *минимаксными*.

2. Байесовские оценки. Обозначим

$$B = \int [\theta - \int \theta P(d\theta)] [\theta - \int \theta P(d\theta)]^T P(d\theta),$$

где P — заданная вероятностная мера, для которой существуют первый и второй моменты. Справедливо утверждение:

Если A невырождена, то

$$\int E[(\theta - AY - t)(\theta - AY - t)^T | \theta] P(d\theta) \geq B [F^T F B + \sigma^2 I]^{-1},$$

причем при $t^* = \int A^* P(d\theta)$, $A^* = B(F^T F B + \sigma^2 I)^{-1} F^T$ имеет место знак равенства и байесовская линейная оценка имеет вид $\hat{\theta} = A^* Y + t^*$.

Указанная оценка является допустимой в смысле критерия

$$\int E(\hat{\theta} - \theta)(\hat{\theta} - \theta)^T P(d\theta)$$

в классе всех (не только линейных) оценок в предположении, что вектор Y нормально распределен.

3. Минимаксные оценки. Качество линейной оценки $\hat{\theta} = AY + t$ при минимаксном подходе характеризуется величиной

$$q(A, t) = \sup_{\theta \in \Omega} \Phi\{E[(\theta - AY - t)(\theta - AY - t)^T | \theta]\}.$$

Минимаксными линейными оценками называются оценки вида $\hat{\theta} = A^* Y + t^*$, где

$$(A^*, t^*) = \arg \inf_{A, t} q(A, t),$$

причем нижняя грань берется по всем матрицам A размера $m \times N$ и всем векторам $t \in \mathbb{R}^m$.

Наиболее общий результат, характеризующий минимаксные оценки, состоит в следующем:

1) Для произвольного множества $\Omega \subset \mathbb{R}^m$

$$\inf_{A, t} q(A, t) = \sup_{\mu \in H} \Phi\{\sigma^2 B_{\mu} (F^T F B_{\mu} + \sigma^2 I)^{-1}\},$$

где $B_{\mu} = \sum_{i=1}^s \theta_i \theta_i^T \lambda_i - \left(\sum_{i=1}^s \theta_i \lambda_i \right) \left(\sum_{i=1}^s \theta_i \lambda_i \right)^T$, $\mu = \{\theta_1, \dots, \theta_s; \lambda_1, \dots, \lambda_s\}$ — дискретная мера, приписывающая веса λ_i точкам $\theta_i \in \Omega$ $\left(\sum_{i=1}^s \lambda_i = 1, \lambda_i > 0 \right)$, H — множество всех таких мер при $s \leq m(m+1)/2 + 1$.

2) Если Ω — ограниченное замкнутое множество, то верхняя грань в правой части указанного равенства достигается для некоторой меры $\mu^* = \{\theta_1^*, \dots, \theta_s^*; \lambda_1^*, \dots, \lambda_s^*\} \in H$, а нижняя грань в левой части достигается при $A^* = A_{B_{\mu^*}} = B_{\mu^*} (F^T F B_{\mu^*} + \sigma^2 I)^{-1} F^T$,

$$t^* = \sum_{i=1}^s \theta_i^* \lambda_i^*.$$

Приведенный результат позволяет свести исходную минимаксную задачу к задаче поиска максимума, для решения которой с очевидными видоизменениями могут быть использованы алгоритмы из § 4.1.

Пусть $\Phi(M) = p^T M p$, где p — фиксированный вектор из \mathbf{R}^m . Тогда

$$q(A, t) = \sup_{\theta \in \Omega} E\{[p^T(\theta - AY - t)]^2 | \theta\},$$

т. е. в качестве критерия выступает среднеквадратическая ошибка оценки параметрической функции $p^T \theta$.

Пусть $\mathcal{M}(\Omega)$ — выпуклая оболочка множества $\Omega \cup (-\Omega)$. Предположим, что $\mathcal{M}(\Omega)$ — телесно в \mathbf{R}^m . Тогда

$$\inf_{A, t} q(A, t) = \inf \sigma^2 p^T (F^T F + \sigma^2 A)^{-1} p,$$

причем нижняя грань в правой части берется по всем матрицам A , соответствующим эллипсоидам, описанным вокруг множества Ω . Нижняя грань в правой части достигается для некоторой матрицы A^* , соответствующей эллипсоиду с центром в t^* . Нижняя грань в левой части достигается при

$$t = (F^T F + \sigma^2 A^*)^{-1} A^* t^*.$$

Если $\mathcal{M}(\Omega)$ не телесно, то некоторые линейные комбинации параметров известны точно. В самом деле, пусть $\mathcal{L}(\Omega)$ — линейная оболочка Ω . $\mathcal{L}(\Omega)$ есть конечномерное евклидово пространство, скажем \mathbf{R}^r ($r \leq m$), причем если $\mathcal{M}(\Omega)$ не телесно, то $r < m$.

Рассмотрим такое ортогональное преобразование координат $\tilde{\theta} = U\theta$, что $\mathcal{L}(\Omega)$ натянуто на $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_r$. Пусть

$$C = U \times \begin{bmatrix} I_r \\ 0 \end{bmatrix},$$

где 0 — нулевая $(m-r) \times r$ -матрица. Любой элемент $\theta \in \mathcal{M}(\Omega)$ можно представить в виде $\theta = C\theta'$, где $\theta' \in \tilde{\Omega}$, $\tilde{\Omega} \subset \mathbf{R}^r$ и телесно в \mathbf{R}^r . Здесь $\tilde{\Omega}$ есть множество $\mathcal{M}(\Omega)$, записанное в координатах $\tilde{\theta}_1, \dots, \tilde{\theta}_r$. Задача сводится теперь к оценке параметров регрессии $E\{Y|\theta'\} = FC\theta'$, $D\{Y|\theta'\} = \sigma^2 I_r$, где $\theta' \in \tilde{\Omega}$, и применимо указанное выше утверждение.

В частном случае, когда Ω — эллипсоид: $\Omega = \{\theta \in \mathbf{R}^m; (\theta - \theta_0)^T D (\theta - \theta_0) \leq 1\}$, приведенное выше утверждение дает

$$\inf_{A, t} q(A, t) = \sigma^2 p^T (F^T F + \sigma^2 D)^{-1} p,$$

причем нижняя грань в левой части достигается при

$$t = (F^T F + \sigma^2 D)^{-1} F^T F \theta_0, \quad A = (F^T F + \sigma^2 D)^{-1} F^T.$$

Оптимальная оценка в этом случае не зависит от p . Эту оценку часто называют оценкой Кукса — Ольмана.

4. Нечеткая априорная информация. Нечеткое множество задается функцией принадлежности $g(\theta)$: $0 \leq g(\theta) \leq 1$. С формальной точки зрения функция $g(\theta)$ отличается от плотности априор-

ного распределения отсутствием нормировки вида $\int g(\theta) d\theta = 1$. Более того, соответствующий интеграл может не существовать. Указанное обстоятельство способствует более адекватному представлению априорных сведений с помощью нечетких множеств по сравнению с байесовским или минимаксным подходом, так как требует только «локальных» сведений о степени важности того или иного конкретного значения вектора параметров θ . Вместе с тем технически перенос соответствующих результатов предыдущего пункта не представляет труда.

Рассмотрим следующий критерий оптимальности оценки $\hat{\theta} = AY + t$:

$$q_1(A, t) = \sup_{\theta} \Phi\{g(\theta)E[(\theta - AY - t)(\theta - AY - t)^T | \theta]\}.$$

Оценки, минимизирующие $q_1(A, t)$, назовем *нечеткими минимаксными* оценками. Справедлив следующий результат.

Пусть $\Omega = \{\theta \in \mathbb{R}^n; g(\theta) \neq 0\}$. Тогда:

1) для произвольного множества $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ имеет место соотношение

$$\inf_{A, t} q_1(A, t) = \sup_{\mu \in H_1} \Phi\{\sigma^2 B_{\mu} (F^T F B_{\mu} + \sigma^2 I)^{-1}\},$$

где B_{μ} такое же, как в п. 3, $\mu = \{\theta_1, \dots, \theta_s; \lambda_1, \dots, \lambda_s\}$ — дискретная мера, приписывающая веса λ_i элементам $\theta_i \in \Omega$, причем $\sum \lambda_i g(\theta_i) = 1$, $\lambda_i > 0$, $s \leq m(m+1)/2 + 1$; H_1 — множество всех таких мер;

2) если Ω — ограниченное замкнутое множество, то верхняя грань в правой части указанного равенства достигается для некоторой меры $\mu^* = \{\theta_1^*, \dots, \theta_s^*; \lambda_1^*, \dots, \lambda_s^*\} \in H_1$, а нижняя грань в левой части достигается при

$$A^* = A_{B_{\mu^*}} = (F^T F B_{\mu^*} + \sigma^2 I)^{-1} F^T, \quad t^* = \sum \theta_i^* \lambda_i^*.$$

Вместо нечетких минимаксных оценок можно находить нечеткие псевдобайесовские оценки при условии, что существуют интегралы $\int g(\theta) d\theta$, $\int \theta g(\theta) d\theta$, $\int \theta \theta^T g(\theta) d\theta$.

Нечеткими псевдобайесовскими оценками называют оценки, минимизирующие величину

$$\int \Phi\{E[(\theta - AY - t)(\theta - AY - t)^T | \theta]\} g(\theta) d\theta.$$

Справедливо утверждение:

Для любой выпуклой функции Φ такой, что $\Phi(M_1) \geq \Phi(M_2)$ как только $M_1 \geq M_2$, нечеткая псевдобайесовская линейная оценка задается формулой

$$\hat{\theta} = A^* Y + t^*,$$

где ..

$$t^* = \int \theta g(\theta) d\theta \left(\int g(\theta) d\theta \right)^{-1}, \quad A^* = B(F^T F B + \sigma^2 I)^{-1} F^T,$$

$$B = \int (\theta - \int \theta g(\theta) d\theta) (\theta - \int \theta g(\theta) d\theta)^T g(\theta) d\theta / b,$$

$$b = \left(\int \theta g(\theta) d\theta \right)^2.$$

5. Методы регуляризации в линейном регрессионном анализе.

Если $F^T F$ — плохо обусловленная матрица, то величина $V(\hat{\theta}) = E(\hat{\theta} - \theta)^T (\hat{\theta} - \theta)$ может быть очень велика, т. е. МНК-оценка $\hat{\theta}$, несмотря на все ее оптимальные свойства, плохо оценивает вектор θ .

В этом случае часто используются смещенные оценки, являющиеся линейными преобразованиями МНК-оценок. Было выделено два однопараметрических подкласса: *гребневые оценки*

$$\hat{\theta}_{(k)}^r = (F^T F + kI)^{-1} F^T Y, \quad k > 0,$$

и *сжимающие оценки*

$$\hat{\theta}_{(k)}^c = k\hat{\theta}, \quad 0 < k < 1,$$

для которых существуют $k^* > 0$ и $0 < k^{**} < 1$ такие, что $V(\hat{\theta}_{(k^*)}^r) < V(\hat{\theta})$ и $V(\hat{\theta}_{(k^{**})}^c) < V(\hat{\theta})$.

Для гребневых оценок не найден строго обоснованный метод определения k^* . Существует эвристический способ, заключающийся в нахождении такого \hat{k} , что $\hat{\theta}_{(\hat{k})}^r$ мало меняется в окрестности \hat{k} ; численные эксперименты показывают, что, как правило, $V(\hat{\theta}_{(\hat{k})}^r) < V(\hat{\theta})$.

Для сжимающих оценок имеем неравенство

$$\frac{\hat{\theta}^T \hat{\theta} - V(\hat{\theta})}{\hat{\theta}^T \hat{\theta} + V(\hat{\theta})} < k^{**} < 1,$$

где $V(\hat{\theta}) = E(\hat{\theta} - \theta)^T (\hat{\theta} - \theta)$. Более того, справедливо утверждение: при $m \geq 3$, $0 < \gamma < 2(m-2)/(N-m+2)$ и $k = k(\gamma) = [1 + \gamma\sigma^2/s^2]^{-1}$, где $s^2 = Y^T Y - \hat{\theta}^T F^T F \hat{\theta}$, имеем

$$E[(\hat{\theta}_{(k)}^c - \theta)^T F^T F (\hat{\theta}_{(k)}^c - \theta)] < E(\hat{\theta} - \theta)^T F^T F (\hat{\theta} - \theta),$$

причем минимум левой части по γ достигается при

$$\gamma = \gamma^* = (m-2)/(N-m+2).$$

Таким образом, для сжимающих оценок оптимальное k может быть указано в явном виде. Сжимающие оценки при $k = k(\gamma^*)$ есть *оценки Джеймса — Стейна*.

Другой способ определения k для сжимающих оценок основан на фиксировании смещения. Справедливо утверждение:

В классе оценок вида $\tilde{\theta} = A\hat{\theta}$, для которых

$$\hat{\theta}^T (A - I) F^T F (A - I) \hat{\theta} = \tau,$$

минимум $E(\tilde{\theta} - \theta)^T (\tilde{\theta} - \theta)$ достигается для сжимающей оценки

вида

$$\tilde{\theta} = \delta[\hat{\theta}^T \hat{\theta} + (1 + \delta \hat{\theta}^T \hat{\theta})^{-1} \delta(\hat{\theta}^T \hat{\theta})^2] \hat{\theta},$$

где $\delta \in \mathbf{R}^1$ однозначно определяется по τ .

При этом способе остается все же неопределенность в выборе τ . Указанные методы выбора k делают оценку нелинейной, так как в них k зависит от $\hat{\theta}$ (или, что то же самое, от Y).

Заметим, что как гребневые, так и сжимающие оценки лучше МНК-оценки в смысле критерия $E(\tilde{\theta} - \theta)^T(\tilde{\theta} - \theta)$, а их модификации — в смысле критерия $E(\tilde{\theta} - \theta)^T G(\tilde{\theta} - \theta)$, где G — заданная неотрицательно определенная матрица, но не в смысле матричного критерия $E(\tilde{\theta} - \theta)(\tilde{\theta} - \theta)^T$, т. е. одновременно для всех матриц G . Если вектор Y нормально распределен, то такое улучшение невозможно в принципе, так как МНК-оценка при этом является минимаксной.

Заметим также, что выбор k независимо от Y , улучшающий МНК-оценку, не может быть осуществлен даже для критерия вида $E(\tilde{\theta} - \theta)^T G(\tilde{\theta} - \theta)$ при фиксированном G и без предположения нормальности Y (так как МНК-оценки минимаксны в классе всех линейных оценок).

Выбор k независимо от Y , улучшающий МНК-оценку в смысле указанных критериев, может быть осуществлен при наличии априорной информации относительно θ . В частности, гребневые оценки являются допустимыми (в обычном смысле) для критерия $E(\tilde{\theta} - \theta)(\tilde{\theta} - \theta)^T$ при $\theta \in \Omega_1 = \{\theta; \theta^T \theta \leq k/\sigma^2\}$, сжимающие — при $\theta \in \Omega_2 = \{\theta; \theta^T F^T F \theta \leq k/\sigma^2\}$; для всех таких $\theta \in \Omega_1, \Omega_2$ эти оценки лучше МНК-оценок.

Полезно отметить, что рассмотренные выше смещенные оценки, а также некоторые другие могут быть получены в соответствии со схемой регуляризации решения некоторых некорректных задач. Подробно о таких задачах сказано в гл. 9. Описанная там схема регуляризации по Тихонову, будучи формально отнесена к конечномерным пространствам, выглядит следующим образом.

Будем рассматривать умножение на θ в формуле $F\theta$ как оператор, линейный по θ и действующий из пространства $N \times m$ -матриц в пространство \mathbf{R}^N , а вектор Y будем считать образом матрицы F , заданным с ошибкой.

Регуляризованным решением задачи определения параметров θ по образу Y некоторого X будем считать вектор $\theta_{(k)}$, минимизирующий функционал

$$\Phi_k(\theta) = \|F\theta - Y\|_{\mathbf{R}^N}^2 + k\|\theta - \theta^*\|_{\mathbf{R}^m}^2,$$

где θ^* — произвольный «центрирующий» вектор, учитывающий априорную информацию о θ ; k — параметр, значение которого выбирается в зависимости от ε так, чтобы выполнялись условия определения регуляризованного решения.

Используя стандартные нормы пространств \mathbf{R}^N и \mathbf{R}^m , получаем решение

$$\theta_{(k)}^I = (F^T F + kI)^{-1} (F^T Y + k\theta^*).$$

При $\theta^* = 0$ получаем гребневую оценку.

Зададим норму в \mathbf{R}^m следующим образом:

$$\|\theta\|_{\mathbf{R}^m} = \theta^T F^T F \theta.$$

Тогда регуляризованное решение имеет вид

$$\theta_{(k)}^{II} = \frac{1}{1+k} (F^T F)^{-1} F^T Y + \frac{k}{1+k} \theta^*,$$

которое при $\theta^* = 0$ совпадает со сжимающей оценкой.

Как известно, в случае плохо обусловленной матрицы $F^T F$ МНК-оценка $\hat{\theta}$ является неустойчивым решением системы нормальных уравнений $F^T F \theta = F^T Y$. Применяя результаты, касающиеся отыскания устойчивого решения операторного уравнения (см. гл. 9), получаем следующее регуляризованное решение:

$$\theta_{(k)}^{III} = (F^T F + k(F^T F)^{-1})^{-1} F^T Y.$$

При этом вектор $\theta_{(k)}^{III}$ минимизирует функционал

$$\Phi_k(\theta) = (F^T F \theta - F^T Y)^T (F^T F \theta - F^T Y) + k \theta^T \theta.$$

Отметим, что существует такое $k \in (0, \infty)$, что $V(\theta_{(k)}^{III}) \leq V(\hat{\theta})$, т. е. оценка $\hat{\theta}_{(k)}^{III}$ является допустимой.

Правила выбора k , удовлетворяющие условиям определения регуляризованного решения, указаны в ряде работ. Например, правило невязки подробно рассмотрено в [90]. Практический выбор k по этому правилу осуществляется из условия минимума по k величины $|\|F\theta_{(k)} - Y\| - \varepsilon|$, где ε может быть взято равным σ^2 .

Трудности возникают, если указанные оценки рассматривать с точки зрения критерия $E(\tilde{\theta} - \theta)^T (\tilde{\theta} - \theta)$. Строго обоснованный подход с этой точки зрения к выбору k указан выше.

Литература к § 3: [11*, с. 46–58, 28, 51, 62*, 115, 123, 146, 162, 183, 191].

§ 4. Нелинейная регрессионная модель

1. Классическая нелинейная регрессионная модель. Число параметров, подлежащих оцениванию в регрессионном анализе, может быть резко сокращено, если дополнительная информация об истинном характере зависимости позволяет выбрать удачную модель (малая систематическая ошибка) с нелинейным вхождением параметров. Такие модели широко распространены в практике экспериментальных исследований (в частности, в физике, химии, биологии). Широко используется модель $\eta(x, \theta) =$

$$= \sum_{i=1}^m \theta_i \exp\{-\theta_{i+m} x\}$$
, возникающая в результате решения систем линейных дифференциальных уравнений. В задачах слежения за движущимися объектами часто используется модель $\eta(x, \theta) = \operatorname{arctg}[(x_1 - \theta_1)/(x_2 - \theta_2)]$ ($x = (x_1, x_2)^T$). Другой пример представляют модели вида

$$\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^m \theta_i / [(x - \theta_{i+m})^2 + \theta_{i+2m}],$$

описывающие резонансные явления и используемые при обработке результатов спектрального анализа. Там же используются модели $\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^m \theta_i \exp\{-\theta_{i+m}(x - \theta_{i+2m})^2\}$.

Пусть $E(y_j | x_j) = \eta(x_j, \theta)$ ($x_j \in X \subset \mathbb{R}^k$, $k \geq 1$), где η — функция, заданная на $X \times \Theta$ ($\Theta \subset \mathbb{R}^m$) и нелинейно зависящая хотя бы от одного параметра из набора $\{\theta_i\}_{i=1}^m$, $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)^T$ — вектор неизвестных и подлежащих оценке параметров.

Предположим, что в точках x_1, \dots, x_n наблюдаются значения случайных величин $y(x_i) = \eta(x_i, \theta) + \varepsilon_i$ ($i = 1, \dots, n$), где $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ — взаимно независимые случайные величины, имеющие распределения с нулевым средним и дисперсиями $\sigma_i^2 = \sigma^2(x_i)$. Указанная модель обозначается $\mathcal{R}(\eta(x[1:n]), \theta, \operatorname{diag} \sigma^2(x[1:n]))$. Точная формулировка предположений, при которых имеет место корректность определения оценок МНК, их состоятельность и асимптотическая нормальность, будут сформулированы в п. 4 при анализе более общей F -модели $\mathcal{R}(\eta(x[1:n]), \theta, \sigma^2(x[1:n]), \theta)$.

2. Асимптотические разложения. Рассмотрим нелинейную регрессионную модель $\mathcal{R}(\eta(x[1:n]), \theta, \sigma^2 I_n)$:

$$y_i = \eta_i(\theta) + \varepsilon_i, \quad E[\varepsilon_i] = 0, \quad E[\varepsilon_i^2] = \sigma^2 > 0. \quad (6)$$

Предположим, что истинное значение неизвестного параметра есть $\theta_0 \in \Theta$, где Θ — открытое выпуклое множество в \mathbb{R}^m , $\bar{\Theta}$ — замыкание Θ . Положим $f_i(\theta) = (y_i - \eta_i(\theta))^2$, $Q(\theta) = \sum_{i=1}^n f_i(\theta)$.

Оценка МНК определяется так (см. (4)): $\hat{\theta}_n = \arg \min_{\theta \in \bar{\Theta}} Q(\theta)$.

В данном пункте излагаются результаты об асимптотических разложениях по n распределения нормированного отклонения $\hat{\theta}_n - \theta_0$ при $n \rightarrow \infty$, разложение самой оценки (стохастическое разложение) и ее моментов. Математическим аппаратом служат асимптотические разложения в многомерной центральной предельной теореме. Введем необходимые обозначения: $I_n(\theta)$ — матрица с элементами

$$I_n^{il}(\theta) = n^{-1} \sum_{j=1}^n \frac{\partial \eta_j(\theta)}{\partial \theta_i} \frac{\partial \eta_j(\theta)}{\partial \theta_l};$$

матрица $\Lambda_n(\theta)$ равна $\Gamma_n^{-1}(\theta)$. Элементы матрицы $\Lambda_n(\theta)$ обозначим через Λ_n^{il} ($i, l = 1, \dots, m$). Положим, что $\varphi(x)$ — плотность гауссовского вектора с нулевым средним и корреляционной матрицей $\sigma^2 \Lambda_n(\theta_0)$. В асимптотических разложениях участвуют производные от функции отклика более высоких степеней, для которых удобно ввести следующее обозначение: $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ — вектор с целыми неотрицательными координатами; $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_m$; $\eta^{(\alpha)}(\theta) = \partial^{|\alpha|} \eta(\theta) / \partial \theta_1^{\alpha_1} \dots \partial \theta_m^{\alpha_m}$.

Предположим, что случайные величины ε_i в модели (6) одинаково распределены и имеют конечный абсолютный момент m -го порядка: $E|\varepsilon_i|^m < +\infty$, $m > 2$. Тогда при выполнении описанных ниже условий имеет место следующее обобщение свойства асимптотической нормальности оценки МНК: при $n \rightarrow \infty$ справедливо равенство

$$\left| P_{\theta_0} \{ \sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta_0) \in C \} - \int_C \varphi(y) \left(1 + \sum_{v=1}^{m-2} T_{vn}(y, \theta_0) n^{-v/2} \right) dy \right| = o(n^{-(m-2)/2}) \quad (7)$$

равномерно по всем выпуклым борелевским множествам C ; T_{vn} — многочлены степени $3v$, коэффициенты которых зависят от производных функций $\eta_i(\theta)$ и моментов случайных величин ε_i . Если условия, при которых справедливо (7), выполнены равномерно по θ_0 из некоторого компактного множества $K \subset \Theta$, то равенство (7) справедливо равномерно по $\theta_0 \in K$, а коэффициенты многочленов T_{vn} равномерно ограничены по $\theta_0 \in K$. Алгоритм вычисления коэффициентов многочленов T_{vn} является очень трудоемким. Многочлены T_{vn} можно выписать в явном виде:

$$\begin{aligned} T_{1n}(y, \theta) = & \\ = n^{-1} \sum_{i=1}^n \sum_{i,l,q=1}^p & \left[\frac{\partial \eta_j}{\partial \theta_i} \frac{\partial \eta_j}{\partial \theta_l} \frac{\partial \eta_j}{\partial \theta_q} \frac{E\varepsilon_1^3}{2\sigma^2} \left(\frac{1}{3} y_i y_l y_q - \frac{1}{\sigma^2} \Lambda_n^{lq}(\theta) y_i \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\partial^2 \eta_j}{\partial \theta_i \partial \theta_l} \frac{\partial \eta_j}{\partial \theta_q} \left(\Lambda_n^{lq}(\theta) y_i - \frac{1}{2\sigma^2} y_i y_l y_q \right) \right]. \end{aligned}$$

З а м е ч а н и е. Разложение (7) имеет смысл и для оценок в линейной регрессии. При распределениях случайных величин ε_i , отличных от гауссовских, приведенное разложение тесно связано с разложением Эджворта — Крамера в центральной предельной теореме.

Основные условия, при которых справедливо равенство (7), можно описать так:

1) отделимость от нуля величины $n^{-1} \sum_{j=1}^n (\eta_j(\theta) - \eta_j(\theta_0))^2$ при $\theta \neq \theta_0$, необходимая для состоятельности оценки $\hat{\theta}_n$.

2) Для некоторого $k \geq 3$ функции $\eta_j(\theta)$ принадлежит $C^k(\Theta)$ ($j = 1, 2, \dots$); для $|\alpha| = k$ выполнено неравенство

$$n^{-1} \sum_{j=1}^n (\eta_j^{(\alpha)}(\theta) - \eta_j^{(\alpha)}(\theta_0))^2 \leq d(\alpha, \theta_0) \|\theta - \theta_0\|^2,$$

где $d(\alpha, \theta_0) < +\infty$ — постоянная, не зависящая от n . Кроме того, при $|\alpha| \leq k$

$$n^{-1} \sum_{j=1}^n |\eta_j^{(\alpha)}(\theta_0)|^k < +\infty.$$

3) $\forall \alpha: |\alpha| \leq k$ в случае, если производные $\eta_j^{(\alpha)}(\theta)$ не равны тождественно нулю в области Θ , то для любой компактной подобласти $K \subset \Theta$ выполнено неравенство

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \inf_{\theta \in K} n^{-1} \sum_{j=1}^n (\eta_j^{(\alpha)}(\theta))^2 > 0.$$

Кроме перечисленных, для справедливости (7) требуется выполнение некоторых технических условий на функции $\eta_j(\theta)$ и распределение ε_i , необходимых для получения асимптотических разложений в центральной предельной теореме.

Следующий результат описывает асимптотическое разложение нормированной оценки $\sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta_0)$. Обозначим

$$b_n^{(\alpha)}(\theta) = n^{-1/2} \sum_{j=1}^n \eta_j^{(\alpha)}(\theta) \varepsilon_j.$$

При выполнении условий 1)–3) и ряда технических требований справедливо соотношение

$$P_{\theta_0} \left\{ \left\| \sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta_0) - \sum_{v=0}^{k-2} h_{vn}(\theta_0) n^{-v/2} \right\| > \kappa n^{-(k-1)/2} \lg^{k/2} n \right\} = o(n^{-(m-2)/2}). \quad (8)$$

с некоторой постоянной $\kappa = \kappa(\theta_0)$. В соотношении (8) k характеризует степень гладкости функций $\eta_j(\theta)$, m — число конечных моментов случайных величин ε_i , а $h_{vn}(\theta)$ — векторы, координаты которых являются однородными членами степени $v+1$ относительно $b_n^{(\alpha)}(\theta)$ ($|\alpha| = 1, \dots, v+1$).

Для любого компактного подмножества $K \subset \Theta$ соотношение (8) выполнено равномерно по $\theta_0 \in K$, если условия, при которых (8) справедливо, также выполнены равномерно по K .

Приведем в явном виде выражения для координат первых двух векторов h_{vn} . Координаты вектора h_{0n} определяются выражением

$$\sum_{i=1}^m \Lambda_n^{i i_1} b_n^{i_1}, \quad i = 1, \dots, p, \quad \text{где } b_n^i = b_n^i(\theta) = n^{-i/2} \sum_{j=1}^n \frac{\partial \eta_j(\theta)}{\partial \theta_i} \varepsilon_j.$$

Для вектора h_{1n} соответствующее выражение более сложнѳ:

$$\sum_{i_1, i_2, i_3=1}^m \Lambda_n^{i_1 i_1} \Lambda_n^{i_2 i_3} \left(b_n^{i_1 i_2} b_n^{i_3} - \frac{1}{4} \sum_{i_4, i_5=1}^m \Lambda_n^{i_4 i_5} a_{i_1 i_2 i_4} b_n^{i_4} b_n^{i_5} \right),$$

$$i = 1, \dots, m,$$

где

$$b_n^{i_1 i_2} = n^{-1/2} \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 \eta_j}{\partial \theta_{i_1} \partial \theta_{i_2}} \varepsilon_j, \quad a_{ikl} = n^{-1} \sum_{j=1}^n E_{\theta} \frac{\partial^3 (y_j - \eta_j(\theta))^2}{\partial \theta_i \partial \theta_k \partial \theta_l}.$$

Разложение (8) стохастическое; случайный вектор $\sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta_0)$ приближается комбинациями случайных величин $b_n^{(\alpha)}$. Оно позволяет получать асимптотические разложения для смешанных моментов координат вектора $\sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta_0)$. Для приложений особенно интересны случаи моментов первого и второго порядков. Введем линейную форму $(\lambda, \hat{\Delta}\theta_n) = \sqrt{n}(\lambda, E_{\theta_0}(\hat{\theta}_n - \theta_0))$ и квадратичную форму $Q_n = nE_{\theta_0}[(\hat{\theta}_n - \theta_0)(\hat{\theta}_n - \theta_0)^T]$. Тогда

$$(\lambda, \Delta\theta_n) = -\frac{\sigma^2}{2} \sum_{i_1, i_2, i_3=1}^m \Lambda_n^{i_1 i_2} \Lambda_n^{i_3 i_4} \Pi_n^{(i_2)(i_3 i_4)} \lambda_{i_1} + l_n(\lambda),$$

где $\Pi_n^{(i)(kl)} = n^{-1} \sum_{j=1}^n \frac{\partial \eta_j}{\partial \theta_i} \frac{\partial^2 \eta_j}{\partial \theta_k \partial \theta_l}$, $l_n(\lambda)$ — линейная форма, коэффициенты которой являются величинами $o(n^{-1/2})$ при $n \rightarrow \infty$. Аналогично,

$$\lambda^T Q_n \lambda = \sigma^2 \lambda^T \Lambda_n^{(2)}(\theta_0) \lambda + n^{-1} \lambda^T \Lambda_n^{(1)}(\theta_0) \lambda + \lambda^T \Lambda_n^{(2)}(\theta_0) \lambda,$$

где элементы матрицы $\Lambda_n^{(2)}(\theta_0)$ есть величины $o(n^{-1})$ при $n \rightarrow \infty$. Выражение для элементов матрицы $\Lambda_n^{(1)}(\theta)$ выписывается в явном виде через $\Pi_n^{(i)(kl)}$, однако оно достаточно громоздко (содержит 16 слагаемых). Приведенные результаты позволяют, в принципе, получать асимптотические разложения для ковариационной матрицы нормированной оценки.

3. Численные методы поиска оценок МНК. Трудности в линейном случае возникают, когда матрица системы нормальных уравнений плохо обусловлена или вырождена. Для нахождения оценок МНК в этом случае приходится привлекать методы регуляризации, основанные на учете априорной информации.

Если функция регрессии нелинейна по параметрам, то система нормальных уравнений также нелинейна. Для ее решения могут быть использованы стандартные численные процедуры. Все же обычно сводить задачу поиска оценки МНК $\hat{\theta} = \arg \inf_{\theta \in \Theta} Q(\theta)$

к задаче решения системы нормальных уравнений невыгодно по следующим причинам: если $\Theta \neq \mathbb{R}^m$, то в точке минимума $Q(\theta)$ условие $\nabla Q(\theta) = 0$ может не выполняться; множество решений системы нормальных уравнений может быть более широким, чем множество точек локальных минимумов функции Q .

Для поиска минимума функции $Q(\theta)$ могут быть использованы методы поиска глобального экстремума (если нет уверенности в том, что локальный минимум у функции Q один) и стандартные методы поиска локального экстремума (см. гл. 4). Разработаны также специальные методы локальной минимизации, учитывающие специфику функции $Q(\theta)$. Ниже эти методы кратко рассмотрены.

Сначала рассмотрим методы, в которых используются производные $\partial \eta(x, \theta) / \partial \theta_i$ ($i = 1, \dots, m$). Принцип построения этих методов тот же, что и общих методов локальной оптимизации (см. § 4.3). Большая их часть записывается в виде

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} - \gamma_t [F^T(\theta^{(t)})F(\theta^{(t)}) + \alpha_t A]^{-1} F^T(\theta^{(t)}) Y(\theta^{(t)}), \quad (9)$$

где $\gamma_t > 0$, $\alpha_t \geq 0$, $\theta^{(t)} \in \Theta$ ($t = 0, 1, \dots$), A — неотрицательно определенная матрица, $\theta^{(0)} \in \Theta$ — начальное приближение,

$$Y(\theta) = (y_1 - \eta(x_1, \theta), \dots, y_n - \eta(x_n, \theta))^T, \\ F(\theta^{(t)}) = \left(\left. \frac{\partial \eta(x_j, \theta)}{\partial \theta_1} \right|_{\theta=\theta^{(t)}}, \dots, \left. \frac{\partial \eta(x_j, \theta)}{\partial \theta_m} \right|_{\theta=\theta^{(t)}} \right).$$

Если $\alpha_t > 0$ ($t = 0, 1, \dots$), то (9) называется *методом Марквардта*, если $\alpha_t = 0$, $\gamma_t = \arg \min_{\gamma} Q(\theta^{(t+\gamma)})$ — *методом Хартли*, а если $\alpha_t = 0$, $\gamma_t = 1$ — *методом Гаусса — Ньютона* (иногда методом Гаусса — Ньютона называют метод (9) с $\alpha_t = 0$ и с другими способами выбора γ_t , см. § 4.3).

Суть метода Гаусса — Ньютона состоит в том, что функция $\eta(x, \theta)$ аппроксимируется функцией, линейной по параметрам в окрестности точки $\theta_{\text{нст}}$:

$$\eta(x, \theta) \simeq \eta(x, \theta_{\text{нст}}) + (\theta - \theta_{\text{нст}})^T \nabla \eta(x, \theta_{\text{нст}}),$$

оценки МНК для линеаризованной модели вычисляются по формуле (см. § 1.2)

$$\hat{\theta} - \theta_{\text{нст}} = (F^T(\theta_{\text{нст}})F(\theta_{\text{нст}}))^{-1} F^T(\theta_{\text{нст}}) Y(\theta_{\text{нст}}).$$

Поскольку $\theta_{\text{нст}}$ неизвестно, то на t -м шаге в приведенной формуле $\theta_{\text{нст}}$ заменяется на $\theta^{(t)}$. Если матрицы $F^T(\theta^{(t)})F(\theta^{(t)})$ плохо обусловлены, то метод Гаусса — Ньютона может сходиться очень медленно или даже расходиться, сходимость метода Хартли может быть также весьма медленной. В указанной ситуации лучше работает метод Марквардта, но теоретически его скорость сходимости ниже (убывает при возрастании α_t), чем у метода Гаусса — Ньютона (скорость сходимости этого метода близка к квадратичной).

Если вычисление (или оценивание с помощью конечных разностей) производных функции $\eta(x, \theta)$ трудоемко, то более экономичными окажутся, по-видимому, методы, не требующие вычисления производных. Аналог метода Гаусса — Ньютона (*DUD-метод*), имеет вид

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} + \gamma_t(\theta^* - \theta^{(t)}),$$

где

$$\begin{aligned} \theta^* &= m_t \left[\sum_{i=1}^n x_{ti} x_{ti}^T \right]^{-1} \sum_{i=1}^n x_{ti} [y_i - \eta(x_i, \theta^{(t)})], \\ m_t &= \sum_{j=0}^{t-1} \omega_{jt} (\theta^{(j)} - \theta^{(t)}) (\theta^{(j)} - \theta^{(t)})^T, \\ x_{ti} &= \sum_{j=1}^{t-1} \omega_{jt} (\theta^{(j)} - \theta^{(t)}) [\eta(x_i, \theta^{(j)}) - \eta(x_i, \theta^{(t)})]. \end{aligned}$$

На практике весовые множители ω_{jt} ($t=0, 1, \dots, j=0, \dots, \dots, t$), определяющие способ учета информации, получаемой в ходе поиска, обычно выбираются одним из следующих способов:

$\omega_{jt} = \{[\theta^{(j)} - \theta^{(t)}]^T A [\theta^{(j)} - \theta^{(t)}]\}^{-1}$, A — положительно определенная матрица;

$$\omega_{jt} = \omega_{j(t-1)}(1 - m^{-1}), \quad \omega_{(t-1)t} = m^{-1}, \quad \omega_{jm} = m^{-1}, \quad j = 1, \dots, m,$$

$$\omega_{jt}^{-1} \sim \sum_{i=1}^N [y_i - \eta(x_i, \theta^{(j)})]^2,$$

$$\omega_{jt} = m^{-1}, \quad j \geq t - m - 1, \quad \omega_{jt} = 0, \quad j < t - m - 1.$$

Суть *DUD*-метода состоит в том, что в окрестности точки $\theta^{(t)}$ функция $\eta(x, \theta)$ аппроксимируется линейной по параметрам:

$$\eta(x, \theta) \simeq \eta(x, \theta^{(t)}) + (\theta - \theta^{(t)})^T \gamma_t(x),$$

где

$$\gamma_t(x) = \arg \min_{\gamma} \sum_{j=0}^{t-1} \omega_{jt} [\eta(x, \theta^{(j)}) - \eta(x, \theta^{(t)}) - \gamma(\theta^{(j)} - \theta^{(t)})]^2.$$

Напомним, что в методе Гаусса — Ньютона $\gamma_t(x) = \partial \eta(x, \theta) / \partial \theta|_{\theta=\theta^{(t)}}$.

Все рассмотренные методы имеют тот недостаток, что для их сходимости требуется хорошее начальное приближение $\theta^{(0)}$. Если такого приближения нет, то его можно получить с помощью градиентного метода (см. § 4.3), а если функция $Q(\theta)$ многоэкстремальна, то с помощью одного из методов глобального поиска (см. § 4.4).

Точные результаты о сходимости метода Гаусса — Ньютона получаются как следствие приведенных в п. 4 результатов о сходимости более общего алгоритма. Результаты о сходимости других методов аналогичны.

4. F-модель. Большую, чем нелинейная регрессионная модель $\mathcal{R}(\eta(x[1:n], \theta), \text{diag } \sigma^2(x[1:n]))$, гибкость в приложениях имеет ее обобщение $\mathcal{R}(\eta(x[1:n], \theta), \text{diag } \sigma^2(x[1:n], \theta))$, допускающее за-

зависимость дисперсий измерений от неизвестных параметров θ . Это обобщение называют *F-моделью*, если параметр θ однозначно определяется через набор $\eta(x[1:n], \theta) = \{\eta(x_i, \theta)\}_{i=1}^n$. Хотя оценка МНК

$$\tilde{\theta} = \arg \min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n (y_i - \eta(x_i, \theta))^2 \sigma^{-2}(x_i, \theta)$$

не является для *F-модели* состоятельной, так как она сходится к

$$\arg \min_{\theta \in \Theta} \left\{ \sum_{i=1}^n [\sigma^2(x_i, \theta^*) \sigma^{-2}(x_i, \theta) + (\eta(x_i, \theta) - \eta(x_i, \theta^*))^2 \sigma^{-2}(x_i, \theta)] \right\}$$

(где θ^* — истинное значение параметров), тем не менее состоятельная оценка для θ^* находится с помощью следующего непосредственного обобщения итерационного алгоритма Гаусса — Ньютона. Поправка $\theta^{(t+1)} - \theta^{(t)}$ ($t = 1, 2, \dots$) есть оценка МНК линеаризованной в точке $\theta^{(t)}$ модели

$$\mathcal{J}(\partial \eta(x[1:n], \theta) / \partial \theta |_{\theta = \theta^{(t)}} \cdot \text{diag } \sigma^2(x[1:n], \theta^{(t)}),$$

в которой вектором «наблюдений» является $Y(\theta^{(t)})$, т. е.

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} + [F^T(\theta^{(t)})G^{-1}(\theta^{(t)})F(\theta^{(t)})]^{-1} F^T(\theta^{(t)})G^{-1}(\theta^{(t)})Y(\theta^{(t)}), \quad (10)$$

где $G(\theta) = \text{diag } \sigma^2(x[1:n], \theta)$.

В соответствии с общепринятым термином «Iterated Reweighted Gauss — Newton Algorithm», алгоритм (10) называется *ИРДЖИНА*. ИРДЖИНА-оценка для *F-модели* и оценки МНК для классической регрессионной модели обладают одинаковыми свойствами асимптотической оптимальности.

Преимуществом *F-модели* перед классической регрессионной моделью является то, что к ней сводится оценивание в регрессионных моделях с малыми случайными ошибками в предикторных переменных, полиномиальное оценивание в регрессионных моделях, вычисление оценок максимального правдоподобия для экспоненциальных семейств распределений алгоритмом ИРДЖИНА и др. Ниже приведены некоторые точные формулировки.

Пусть в некотором полном сепарабельном метрическом пространстве X для $n = 1, 2, \dots$ задана серия планов $\xi_n = \{x_1, \dots, x_n\}$ и семейство распределений $P_{x, \theta}$ на борелевских подмножествах \mathbb{R}^1 , зависящих от $x \in X$ и θ из компакта $\Theta \subset \mathbb{R}^m$ ($m \geq 1$). Изменяются серии независимых случайных величин

$$y^{(n)} = \{y[1:n]\} = (y_1, \dots, y_n)^T, \quad y_i \in \mathbb{R}^1,$$

причем для некоторого неизвестного $\theta^* \in \text{Int } \Theta$

$$P(y_i \in B) = P_{x_i, \theta^*}(B)$$

для всех борелевских $B \subset \mathbb{R}^1$.

Далее используются следующие предположения:

1а) $E_0 y_i = \eta_i(\theta) = \eta(x_i, \theta)$, где η — такая известная ограниченная функция на $X \times \Theta$, что:

1б) $f(x, \theta) = \partial \eta(x, \theta) / \partial \theta$ — непрерывное ограниченное отображение из $X \times \Theta$ в \mathbb{R}^m ;

1в) $\partial f(x, \theta) / \partial \theta_i$ ($i = 1, \dots, m$) — непрерывные ограниченные отображения из $X \times \Theta$ в \mathbb{R}^m .

2а) Существуют дисперсии $D_0 y_i = \sigma^2(x_i, \theta)$, где $\sigma \in C(X \times \Theta)$, причем:

2б) $\partial \sigma^2(x, \theta) / \partial \theta$ — непрерывное ограниченное отображение из $X \times \Theta$ в \mathbb{R}^m .

3а) Распределения ξ_n , заданные на борелевских подмножествах A пространства X по формуле $\xi_n(A) = n^{-1} \sum_{i=1}^n 1_A(x_i)$ (1_A — индикатор множества A), слабо сходятся при $n \rightarrow \infty$ к вероятностной мере ξ , причем:

3б) матрица $\int_X f(x, \theta) \sigma^{-2}(x, \theta) f^T(x, \theta) \xi(dx) = M(\theta)$ удовлетворяет условию $\inf_{\theta \in \Theta} M(\theta) > 0$;

3в) из равенства $\sum_{i=1}^n [\eta(x_i, \theta) - \eta(x_i, \tilde{\theta})]^2 = 0$ для $\theta, \tilde{\theta}$ из Θ следует, что $\theta = \tilde{\theta}$.

4) Абсолютные моменты порядка r распределений $P_{x, \theta}$ равномерно ограничены.

Для заданной непрерывной весовой функции $v(x) > 0$ на X

$$\theta_n^v = \arg \min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n (y_i - \eta(x_i, \theta))^2 v(x_i)$$

обозначает оценку МНК для θ^* в модели $\mathcal{H}(\eta(x[1:n], \theta), \text{diag}(\sigma^2(x[1:n])))$.

При выполнении условий 1а), 2а), 3а)—3в) θ_n^v состоятельно оценивает θ^* , при выполнении условий 1а)—1в), 2а), 2б), 3а)—3в) и условия 4) с $r = m + \varepsilon$ при некотором $\varepsilon > 0$ оценка θ_n^v при $n \rightarrow \infty$ асимптотически нормальна:

$$\sqrt{n}(\theta_n^v - \theta^*) \Rightarrow \mathcal{N}(0, A^{-1}BA^{-1}),$$

где

$$A = \int_X f(x, \theta^*) f^T(x, \theta^*) v(x) \xi(dx),$$

$$B = \int_X f(x, \theta^*) v(x) \sigma^2(x) v(x) f^T(x, \theta^*) \xi(dx),$$

причем абсолютные моменты $E[\sqrt{n}|\theta_n^v - \theta^*|^u]$ равномерно ограничены при $u \leq m - 2$ и сходятся при $n \rightarrow \infty$ к моментам предельного распределения.

Методы поиска θ_n^v описаны в п. 3, θ_n^v можно использовать как начальное приближение в ИРДЖИНА.

Говорят, что последовательность событий Ω_n справедлива по вероятности (ПВ), если $P(\Omega_n) \rightarrow 1$ при $n \rightarrow \infty$, где $P(\Omega)$ — внутренняя мера события Ω .

Теорема 4. Пусть выполнены условия 1а)–1в), 2а), 2б), 3а), 3б). Положим $B(r) = \{\theta \mid \|\theta - \theta^*\| < r\}$. Тогда

1) Определен такой случайный вектор $\hat{\theta}(y^{(n)})$ (ПВ), что при $r_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) последовательность событий

$$\Gamma_{r_n}^n = \left\{ y^{(n)} \mid \sup_{\theta^{(0)} \in B(r_n)} \|\theta^{(t)} - \hat{\theta}(y^{(n)})\| \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} 0 \right\}$$

справедлива по вероятности.

2) $\sqrt{n}(\hat{\theta}(y^{(n)}) - \theta^*)$ ограничено ПВ.

3) $\hat{\theta}(y^{(n)})$ удовлетворяет уравнению, получающемуся из (10) заменой $\theta^{(t)}$ и $\theta^{(t+1)}$ на $\hat{\theta}(y^{(n)})$.

4) Если $\theta^{(0)}$ — состоятельная оценка θ^* , то

$$\sqrt{n}(\hat{\theta}(y^{(n)}) - \theta^*) \Rightarrow \mathcal{N}(0, M^{-1}(\theta^*)).$$

5) Если $\sqrt{n}\|\theta^{(0)} - \theta^*\|$ ограничена ПВ, то для всех $t \geq 1$

$$\sqrt{n}(\theta^{(t)} - \theta^*) \Rightarrow \mathcal{N}(0, M^{-1}(\theta^*)).$$

6) Если, кроме перечисленных условий, выполнены 3в) и 4) при $r > 5$ и $\theta^{(0)} = \theta^*$ для некоторой функции $v(x) > 0$, то два первых момента $\sqrt{n}(\theta^{(t)} - \theta^*)$ при всех $t \geq 1$ ограничены и сходятся к соответствующим моментам предельного распределения.

Условия, при которых ИРДЖИНА-оценки для F -модели (и, следовательно, оценки МНК для классической регрессионной модели) оптимальны (точнее, локально асимптотически минимаксны) приведены в § 5.3.

Литература к § 4: [4, 38, 39, 53, 92*, 147].

ГЛАВА 2

ТЕОРИЯ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ И ДВОЙСТВЕННОСТИ В ЗАДАЧАХ ПЛАНИРОВАНИЯ РЕГРЕССИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В настоящей главе формулируется задача оптимального планирования регрессионных экспериментов и ряд необходимых и достаточных условий оптимальности, соответствующих различным статистическим критериям. Эти условия, с одной стороны, приводят к конструктивным аналитическим и численным методам получения оптимальных планов и, с другой стороны, в ряде случаев помогают устанавливать эквивалентность различных критериев оптимальности. В связи с последним обстоятельством соответствующие теоремы традиционно называются *теоремами эквивалентности* (даже в тех случаях, когда эквивалентная задача не имеет прозрачного статистического смысла). Большинство таких теорем (см. §§ 3—6) получены на основе анализа выражения вариационной производной критерия по плану. Вместе с тем, более полные результаты (особенно в случае наличия мешающих параметров) следуют из теории двойственности (§§ 7—9).

§ 1. Основные понятия

1. Исходная статистическая задача. В данной главе будет рассматриваться задача планирования экспериментов, описываемых моделью

$$y_{ij} = \theta^T f(x_i) + \varepsilon_{ij}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, r_i, \quad \sum_{i=1}^n r_i = N, \quad (1)$$

где $x_i \in X$ — контролируемые переменные, $\theta \in \Omega$ — неизвестные параметры, $y_{ij} \in Y$ — наблюдения, ε_{ij} — погрешности этих наблюдений. Вид множеств X , Ω , Y , функции $\theta^T f(x)$, а также характер погрешностей ε_{ij} определяются конкретной экспериментальной ситуацией. Уравнение (1) обычно называется *уравнением регрессии*, а функция $\theta^T f(x)$ — функцией регрессии. Здесь и далее $f(x)$ — вектор-функция или матричная функция, в последнем

случае y_i и $\theta^T f(x)$ представляют собой векторы (при фиксированном x).

Перечислим наиболее характерные особенности задачи (1), которые существенны в данной главе:

- 1) Функции $f(x)$ известны.
- 2) Необходимо оценить параметры θ или некоторые линейные функции от них. Ниже будет предполагаться, что $\theta \in \Omega \subset \mathbb{R}^m$.
- 3) Погрешности аддитивны, имеют нулевые средние, существуют их вторые моменты и они некоррелированы: $E(\epsilon_{ij}\epsilon_{i'j'}) = 0$ при $i \neq i', j \neq j'$.
- 4) Имеется возможность контролировать x , т. е. выбрать его из множества X по усмотрению экспериментатора. Множество X часто называют *областью действия*, а переменные x — *контролируемыми переменными*.

2. Понятие оптимального плана. Из предыдущей главы следует, что в качестве оценок параметров можно использовать НЛН-оценки. Совокупность величин $\xi_N = \{x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n\}$, где $p_i = r_i/N$ называется *планом эксперимента*. Точки x_i называются *опорными точками* плана, а величины p_i — *мерами* этих точек (их также называют *весами*). В рамках сделанных выше предположений дисперсионная матрица НЛН-оценок полностью определяется планом эксперимента:

$$D[\hat{\theta}_N] = N^{-1}M^{-1}(\xi_N) = N^{-1}D(\xi_N),$$

где $M(\xi_N)$ — (нормированная) информационная матрица, $D(\xi_N) = M^{-1}(\xi_N)$. В силу предположения о некоррелированности погрешностей ϵ_{ij}

$$M(\xi_N) = \sum_{i=1}^n p_i \mu(x_i), \quad (2)$$

где $\mu(x_i)$ — прирост информационной матрицы, обусловленный поведением одного наблюдения в точке x_i . В случае скалярного отклика, когда $f(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$, матрица $\mu(x)$ имеет не более чем единичный ранг и равна $\sigma^{-2}(x)f(x)f^T(x)$. В общем случае она может иметь более сложную структуру. Так, уже при отклике размерности l верно $\mu(x) = f^T(x)d^{-1}(x)f(x)$, где $d(x) = E[\epsilon\epsilon^T]$ — матрица размерности $l \times l$. В дальнейшем будем предполагать, что способ подсчета матрицы $\mu(x)$ задан.

Так как матрица $M(\xi_N)$, а стало быть, и матрица $D(\xi_N)$ не зависят от оцениваемых параметров, то имеет смысл говорить об априорном поиске планов, минимизирующих некоторую заданную функцию Φ от матрицы $NM(\xi_N)$:

$$\xi_N^* = \text{Arg inf}_{\xi_N} \Phi [NM(\xi_N)]. \quad (3)$$

Данная экстремальная задача будет называться *задачей оптимального планирования эксперимента*. Решения этой задачи называются *оптимальными планами*, а функция Φ — *критерием*

оптимальности. Рассмотрение функций от матрицы $NM(\xi_N)$, а не от матрицы $D(\xi_N)$ удобнее, так как позволяет охватить случаи, когда $\text{rg } M(\xi_N) < m$, но $\Phi[NM(\xi_N)] > 0$ (так случается, например, при оценивании линейных комбинаций параметров θ).

Планы, при которых $\text{rg } M(\xi_N) < m$, называются *сингулярными*, а планы, для которых $\text{rg } M(\xi_N) = m$, называются *регулярными*.

Заметим, что, в отличие от задачи оценивания, когда удается отыскать правило оценивания, наилучшее в смысле упорядоченности положительно определенных матриц, вообще говоря, не существует плана ξ_N^* , удовлетворяющего неравенству

$$M(\xi_N^*) \geq M(\xi_N),$$

где ξ_N — любой другой план. Исключением являются некоторые простейшие регрессионные задачи.

3. О критериях оптимальности плана эксперимента. Перечислим ряд наиболее употребительных критериев оптимальности и укажем их математико-статистическую интерпретацию.

D-оптимальность: $\xi^* = \text{Arg sup det } M(\xi)$ ($\text{Arg inf det } M^{-1}(\xi)$). Минимизируется объем эллипсоида рассеяния НЛН-оценок параметров (в случае нормального распределения ошибок эксперимента), т. е. объем множества

$$\{\theta \mid E[(\theta - \hat{\theta})^T D[\hat{\theta}_N](\theta - \hat{\theta})] = \text{const}\}.$$

E-оптимальность: $\xi = \text{Arg sup } \lambda_{\min}(M(\xi))$ ($\text{Arg inf } \lambda_{\max}(M^{-1}(\xi))$), где λ_{\min} (λ_{\max}) — наименьшее (наибольшее) собственное число соответствующей матрицы. Критерий *E-оптимальности* оптимизирует оценку статистически наименее точно оцениваемой линейной комбинации параметров.

G-оптимальность: $\xi^* = \text{Arg inf sup}_{\xi \in X} f^T(x) M^{-1}(\xi) f(x)$. Минимизируется максимальное значение дисперсии оценки функции регрессии.

L-оптимальность: $\xi^* = \text{Arg inf tr } AM^{-1}(\xi)$. Минимизируется величина риска при обобщенных квадратичных потерях:

$$E[(\theta - \hat{\theta})^T A(\theta - \hat{\theta})],$$

где A — некоторая заданная матрица.

Q-оптимальность: $\int_X f^T(x) M^{-1}(\xi) f(x) dx$. Минимизируется среднее по области действия значение дисперсии оценки функции регрессии.

Относительно аналогов указанных критериев для случая оценки части параметров (или нескольких линейных комбинаций параметров) см. § 7.

При наличии априорных сведений о параметрах в перечисленных критериях нужно заменить $M(\xi)$ на $M(\xi) + B$, где B — некоторая матрица, вид и интерпретация которой даны в § 4.3.

Все перечисленные критерии являются выпуклыми ($\det M(\xi)$ нужно заменить на $\ln \det M(\xi)$) и к ним может быть применена общая теория, развиваемая в следующих параграфах.

4. **Непрерывные планы.** Решение экстремальной задачи (3) на множестве планов ξ_N , учитывающих дискретную природу мер p_i ($i = 1, \dots, n$) оказывается весьма трудным как в вычислительном, так и в аналитическом плане. Существенного упрощения удается достичь при замене экстремальной задачи (3) на несколько другую:

$$\xi^* = \text{Arg inf}_{\xi \in \Xi} \Phi [NM(\xi)], \quad (4)$$

где $\xi = \xi(dx)$ представляет собой некоторую вероятностную меру, определенную на X , Ξ — множество всех таких мер, а

$$M(\xi) = \int_X \mu(x) \xi(dx), \quad \mu(x) = \{\mu_{\alpha\beta}(x)\}_1^m, \quad (5)$$

где функции $\mu_{\alpha\beta}(x)$ — измеримые, ограниченные функции. Вероятностную меру ξ называют *непрерывным планом*. Своим происхождением этот термин обязан тому факту, что при сосредоточении меры ξ в конечном числе точек x_1, \dots, x_n она описывается величинами p_1, \dots, p_n , которые можно истолковать точно так же, как и веса, введенные в предыдущем разделе, если забыть о дискретности последних. При достаточной больших N решение ξ^* может рассматриваться как приближенное решение исходной экстремальной задачи (3). Если имеется два плана ξ_1 и ξ_2 , определяемые мерами $\xi_1(dx)$ и $\xi_2(dx)$, то мера $\xi(dx) = (1 - \alpha)\xi_1(dx) + \alpha\xi_2(dx)$, где $0 \leq \alpha \leq 1$, определяет план ξ . Другими словами, множество непрерывных планов выпукло.

§ 2. Свойства информационной матрицы

Непосредственно из определения матрицы $\mu(x)$ и (5) следует, что любая матрица $M(\xi)$ — симметричная положительно определенная. Каждой матрице можно сопоставить вектор в евклидовом пространстве \mathbf{R}^{n_0} , где $n_0 = m(m+1)/2$. Множество $M(\Xi) = \{M(\xi) \mid \xi \in \Xi\}$ выпукло, так как является выпуклой оболочкой множества $\mu(X) = \{\mu(x) \mid x \in X\}$. В силу теоремы Каратеодори любая матрица $M \in M(\Xi)$ может быть представлена в виде $\sum_{i=1}^n p_i \mu_i(x_i)$, где $n \leq n_0 + 1$, $\sum_{i=1}^n p_i = 1$, $p_i > 0$ ($i = 1, \dots, n$), $x_i \in X$. Иными словами, всегда найдется план, содержащий не более $n_0 + 1$ точек с информационной матрицей, совпадающей с любой матрицей, принадлежащей $M(\Xi)$. Полезно иметь в виду, что компактность множества $\mu(X)$ влечет за собой компактность множества $M(\Xi)$. Если M^* — граничная точка этого множества, то она может быть представлена линейной комбинацией, содержащей на одно слагаемое меньше, чем в общем случае.

Наряду с (4) удобно рассматривать и экстремальную задачу

$$M^* = \text{Arg} \inf_{M \in M(\Xi)} \Phi [NM]. \quad (6)$$

Если $\mu(X)$ — компактное множество, то $M^* = M(\xi^*)$ и, зная ξ^* , можно построить M^* в соответствии с (5). Обратная процедура, т. е. отыскание ξ^* по M^* , обычно оказывается много сложнее и заключается в решении интегрального уравнения

$$\int_X \mu(x) \xi(dx) = M^*,$$

которое можно заменить на систему нелинейных уравнений

$$\sum_{i=1}^{n_0} p_i \mu(x_i) = M^*,$$

$$\sum_{i=1}^{n_0} p_i = 1, \quad p_i \geq 0.$$

§ 3. Необходимые и достаточные условия оптимальности для выпуклых критериев оптимальности

1. Основная экстремальная задача. Ограничимся рассмотрением критериев оптимальности, представимых в виде:

$$a) \quad \Phi[NM] = \gamma(N)\Psi[M],$$

где $\gamma(N)$ — монотонно убывающая функция, а функция Ψ — выпуклая;

$$b) \quad \Psi[(1-\alpha)M_1 + \alpha M_2] \leq (1-\alpha)\Psi[M_1] + \alpha\Psi[M_2].$$

При этом вместо (4) и (6) можно рассматривать соответственно экстремальные задачи

$$\xi^* = \text{Arg} \inf_{\xi} \Psi[M(\xi)], \quad (7)$$

$$M^* = \text{Arg} \inf_M \Psi[M]. \quad (8)$$

Здесь и далее пояснения о принадлежности ξ к Ξ и M к $M(\Xi)$ опускаются.

В (7) и (8) решения не зависят от возможного числа наблюдений N . Этот факт полезен в приложениях. Почти для всех встречающихся на практике критериев оптимальности условие б) выполняется. Условие же а), как правило, не выполняется лишь при наличии априорной информации об оцениваемых параметрах. Действительно, если D_0 — дисперсионная матрица априорного распределения параметров θ , то $D(\hat{\theta}) = [D_0^{-1} + NM(\xi_N)]^{-1}$ и приходится говорить о минимизации функций вида $\Psi[N^{-1}D_0^{-1} + M(\xi)]$, для которых оптимальный план может зависеть от N .

С близкой ситуацией приходится сталкиваться при построении композиционных планов. Если N_0 — число наблюдений, от-

веденное на фиксированную заранее часть плана, то приходится говорить о минимизации функций вида

$$\Psi \left[\frac{N_0}{N+N_0} M(\xi_0) + \frac{N}{N+N_0} M(\xi) \right].$$

Экстремальные задачи (7) и (8) очень близки друг к другу. Вторая из них привлекательнее в теоретическом плане, так как является конечномерной экстремальной задачей. Первая — бесконечномерная (ищется мера), но учет ограничений в ней обычно оказывается много проще, чем в (8). Поэтому в дальнейшем часть теоретических результатов будет излагаться для задачи (8), по большинство следствий из них будет формулироваться в пространстве планов, что придает им более конструктивный характер.

2. Необходимые и достаточные условия. Пусть в дополнение к б) имеет место условие

в) $\mu(X)$ — компактно.

Тогда существует по крайней мере одно решение экстремальной задачи (8), причем множество решений выпукло. Если $\Psi[M]$ — строго выпуклая функция, то существует единственное решение M^* .

Аналогичное утверждение имеет место в пространстве планов (т. е. существует по крайней мере один оптимальный план и множество планов выпукло). Но строгая выпуклость уже не влечет единственности и известны примеры, когда множество оптимальных планов бесконечно.

Если условие в) не выполняется, то можно гарантировать лишь существование таких минимизирующих последовательностей $\{M_i^*\}$ и $\{\xi_i^*\}$, что

$$\begin{aligned} \lim_{i \rightarrow \infty} \Psi[M_i^*] &= \inf_M \Psi[M], \\ \lim_{i \rightarrow \infty} \Psi[M(\xi_i^*)] &= \inf_{\xi} \Psi[M(\xi)]. \end{aligned}$$

Обозначим через $\Delta(M_1, M_2)$ производную по направлению $M_2 - M_1$ в точке M_1 функции $\Psi[M]$:

$$\Delta(M_1, M_2) = \lim_{\alpha \rightarrow 0+} \frac{\Psi[(1-\alpha)M_1 + \alpha M_2] - \Psi[M_1]}{\alpha}.$$

Как известно, для выпуклой функции такая производная всегда существует.

При выполнении условий б) и в) необходимым и достаточным условием оптимальности матрицы M^* является выполнение неравенства

$$\inf_M \Delta(M^*, M) \geq 0. \quad (9)$$

Данное утверждение является одним из наиболее общих вариантов известной теоремы Кифера — Вольфовица, сформулированной

ими впервые для $\Psi[M] = -\ln |M|$. Как обычно, общая формулировка проста, но не конструктивна. Более полезные для приложений результаты удается получить при предъявлении дополнительных требований к функции $\Psi[M]$ и множеству $\mu(X)$. Пусть выполнено условие

г) функция $\Psi[M]$ дифференцируема в окрестности точки M^* (по поводу недифференцируемых Ψ см. § 7).

Тогда

$$\begin{aligned} \Delta(M^*, M) &= \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M^*} (M - M^*), \\ \inf_M \Delta(M^*, M) &= \inf_{\xi} \int_X \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M^*} \mu(x) \xi(dx) - \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} M \Big|_{M=M^*} = \\ &= \inf_x \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M^*} \mu(x) - \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} M \Big|_{M=M^*} = \\ &= \inf_{\mu \in \mu(X)} \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M^*} \mu - \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} M \Big|_{M=M^*}. \end{aligned}$$

Обозначим

$$q(M) = \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} M, \quad \psi(x, \xi) = \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} \mu(x), \quad \psi(\mu, M) = \operatorname{tr} \frac{\partial \Psi}{\partial M} \mu.$$

Теорема 1 (теорема эквивалентности). *Если выполняются одновременно условия б), в) и г), то необходимым и достаточным условием оптимальности M^* является выполнение неравенства*

$$\psi(\mu, M^*) \geq q(M^*) \quad \forall \mu \in \mu(X). \quad (10)$$

Аналогично, необходимым и достаточным условием оптимальности ξ^ является выполнение неравенства*

$$\psi(x, \xi^*) \geq q(M^*) \quad \forall x \in X. \quad (11)$$

При выполнении условий б), в) и г) в опорных точках x^* оптимального плана имеет место равенство

$$\psi(x^*, \xi^*) = \psi(\mu^*, M^*) = q(M^*),$$

где $\mu^* = \mu(x^*)$.

Дополнительно к б) и в) потребуем выполнения условия в') $\Psi(M)$ дифференцируема на любом множестве

$$M(C) = \{M \mid \Psi(M) \leq C, M \in M(\Xi)\}.$$

Тогда для любого плана с информационной матрицей $M(\xi) \in M(C)$ имеет место неравенство

$$q(M(\xi)) - \inf_x \psi(x, \xi) \geq \Psi[M(\xi)] - \Psi[M(\xi^*)].$$

3. Критерии, опирающиеся на дисперсионную матрицу. В приложениях часто имеют дело с критериями оптимальности $Q[D]$, зависящими непосредственно от матрицы $D(\xi) = M^{-1}(\xi)$

(предполагается, что оптимальные планы регулярны, т. е. $|M(\xi^*)| \neq 0$). Результаты из предыдущего пункта могут быть легко перефразированы в терминах элементов матрицы $D(\xi)$, если воспользоваться тем, что

$$\frac{\partial \Psi}{\partial M} = -M^{-1} \frac{\partial \Psi}{\partial D} M^{-1}.$$

Выпишем для примера аналог неравенства (10):

$$\varphi(x, \xi^*) \leq r(D^*) \quad \forall x \in X.$$

Здесь $\varphi(x, \xi) = \text{tr } \mu(x) D \frac{\partial Q}{\partial D} D \Big|_{D=D(\xi)}$, $r(D) = \text{tr } D \frac{\partial Q}{\partial D}$, $D^* = D(\xi^*)$.

4. Расположение опорных точек. Результаты, изложенные в предыдущих пунктах, позволяют сделать некоторые заключения о структуре оптимальных планов. Так как функция $\psi(\mu, M)$ линейна по μ , то для критериев оптимальности, удовлетворяющих условиям б), в) и г), все опорные точки должны лежать на границе области $\mu(X)$. При выполнении условия а) матрица $M^* = M(\xi^*)$ является граничной точкой множества $M(\Xi)$, а потому (см. § 2) всегда найдется оптимальный план ξ^* , содержащий не более чем $n_0 = m(m+1)/2$ опорных точек.

§ 4. Критерий D -оптимальности и теорема Кифера — Вольфовица

1. D -критерий. В тех случаях, когда экспериментатора интересуют все m неизвестных параметров, разумно минимизировать объем эллипсоида рассеяния, квадрат которого пропорционален определителю дисперсионной матрицы $|N^{-1}D(\xi_N)|$. Часто этот определитель называют *обобщенной дисперсией*. Его минимизация эквивалентна также максимизации локальной мощности F — критерия проверки гипотезы $\theta = \theta_0$ при нормально распределенных погрешностях ε_{ij} в классической регрессионной задаче (см. §§ 1, 2). В том же предположении нормальности определитель $|N^{-1}D(\xi_N)|$ определяет прирост шенноновской информации за N наблюдений. Очевидно, что функция $\ln|D(\xi)| = -\ln|M(\xi)|$ удовлетворяет условиям б)–г) из § 3.

Так как $g(M) = -m$, $-\psi(\mu, M) = \text{tr } M^{-1}\mu$, $-\psi(x, \xi) = \text{tr } M^{-1}(\xi)\mu(x)$, то необходимым и достаточным условием D -оптимальности плана ξ^* является выполнение неравенства

$$\text{tr } M^{*-1}\mu \leq m \quad \forall \mu \in \mu(X)$$

или

$$\text{tr } M^{-1}(\xi^*) \leq \mu(x) \quad \forall x \in X,$$

причем информационные матрицы всех D -оптимальных планов для данной регрессионной задачи совпадают между собой.

В дальнейшем, когда связь между какими-либо утверждениями в пространстве матриц $\mu(X)$ и пространстве X прослеживается

ся очевидным образом, соответствующие утверждения будут формулироваться без дополнительных оговорок лишь в пространстве X .

Основную часть приведенного выше утверждения можно сформулировать несколько иначе. Экстремальные задачи:

- 1) $\xi^* = \text{Arg sup}_{\xi} |M(\xi)|$,
- 2) $\xi^* = \text{Arg inf}_{\xi} \sup_x \text{tr } M^{-1}(\xi) \mu(x)$,
- 3) $\sup_x \text{tr } M^{-1}(\xi^*) \mu(x) = m$

эквивалентны между собой.

Наконец, полезно иметь в виду, что для любого невырожденного плана $\xi \in \Xi$ выполняется неравенство

$$\text{tr } M^{-1}(\xi) \mu(x) - m \geq \ln |M(\xi^*)| / |M(\xi)|.$$

2. Теорема эквивалентности Кифера — Вольфовица. Для одномерной по y классической регрессионной задачи имеем $\mu(x) = \lambda(x) f(x) f^T(x)$, где $\lambda^{-1}(x)$ — дисперсия наблюдения, проведенного при условиях x . Поэтому

$$\text{tr } M^{-1}(\xi) \mu(x) = \lambda(x) f^T(x) M^{-1}(\xi) f(x) = \lambda(x) d(x, \xi).$$

Функция $N^{-1}d(x, \xi)$ определяет дисперсии оценки отклика в точке x .

Если $\lambda(x) = \text{const}$, то эквивалентными являются следующие задачи:

- 1) $\xi^* = \text{Arg sup}_{\xi} |M(\xi)|$,
- 2) $\xi^* = \text{Arg inf}_{\xi} \sup_x d(x, \xi)$,
- 3) $\sup_x d(x, \xi) = m$.

Данное утверждение представляет собой известную теорему эквивалентности Кифера — Вольфовица, которая не только проясняет структуру D -оптимальных планов, но и указывает на связь двух разных критериев $\Psi_1 = |M(\xi)|$ и $\Psi_2 = \sup_x d(x, \xi)$.

Критерий Ψ_2 называется G -критерием. Подчеркнем, что эквивалентность D и G -критериев имеет место при равноточных наблюдениях и при максимизации функции $d(x, \xi)$ по всей области действия X .

Как только $\lambda(x) \neq \text{const}$ при $x \in X$ или $\Psi_2 = \sup_{x \in Z} d(x, \xi)$ ($Z \neq X$) G -оптимальные планы не совпадают с D -оптимальными. Задача отыскания G -оптимального плана в общем случае относится к задачам минимаксного типа, которые рассматриваются в § 6.

3. Обобщенный D -критерий. В тех случаях, когда экспериментатора интересует лишь s параметров или s линейных комбинаций из m исходных параметров, естественно обратиться к критерию

$$\Psi[M] = |A^T M^{-1}(\xi) A|,$$

где A — матрица полного ранга размера $s \times m$. Данный критерий называют иногда D_s -критерием.

Если оптимальный план ξ^* невырожден, то

$$-\psi(x, \xi) = \varphi(x, \xi) = \text{tr } M^{-1}(\xi) A [A^T M^{-1}(\xi) A]^{-1} A^T M^{-1}(\xi) \mu(x)$$

и задачи:

$$1) \xi^* = \text{Arg inf}_{\xi} |A^T M^{-1}(\xi) A|,$$

$$2) \xi^* = \text{Arg inf}_{\xi} \sup_x \varphi(x, \xi),$$

$$3) \sup_x \varphi(x, \xi^*) = s$$

оказываются эквивалентными.

Подсчитывая число линейных комбинаций элементов матрицы $M(\xi)$, определяющих $|A^T M^{-1}(\xi) A|$, можно найти верхнюю границу для минимального количества опорных точек D_s -оптимального плана. Она оказывается равной $s(2m - s + 1)/2$.

§ 5. Линейные критерии оптимальности

1. Перечень основных задач, приводящих к линейным критериям. Критерии вида $\text{tr } AM^{-1}(\xi)$, где A — матрица $s \times m$ ($s \leq m$), называются *линейными критериями*. Перечислим некоторые из задач, в которых появляются подобные критерии. Простоты ради будем иметь дело лишь с классической регрессией с одномерным откликом.

а) Предположим, что качество оценок, полученных в результате различных экспериментов, сравнивается по среднему значению функции $Q(\hat{\theta} - \theta)$, которая дважды дифференцируема. При достаточно большом числе наблюдений

$$E[Q(\hat{\theta} - \theta)] \simeq Q(0) + N^{-1} \text{tr } AM^{-1}(\xi_N),$$

где

$$A = \left. \frac{\partial^2 Q(U)}{\partial U \partial U^T} \right|_{U=0}.$$

Поэтому минимизация $E[Q(\hat{\theta} - \theta)]$ сводится к минимизации функции $\Psi[M(\xi)] = \text{tr } AM^{-1}(\xi)$. В общем случае следовало бы говорить о минимизации $\text{tr } AM^{-1}(\xi)$, где индекс « \rightarrow » означает операцию псевдообращения. В этом параграфе всюду предполагается, что оптимальные планы ξ^* регулярные и существует некоторая окрестность любой матрицы $M(\xi^*)$, содержащая лишь невырожденные матрицы $M(\xi)$ и принадлежащая множеству $M(\Xi)$. Для существования такой окрестности достаточно потребовать непрерывность функции $\mu(x)$ в окрестности опорных точек оптимального плана.

б) При экстраполяции (интерполяции) в заданную точку x_0 можно минимизировать дисперсию оценки отклика в этой точке:

$$N^{-1} f^T(x_0) M^{-1}(\xi) f(x_0) = N^{-1} d(x_0, \xi).$$

Положив $A = f(x_0) f^T(x_0)$, приходим к критерию вида $\text{tr } AM^{-1}(\xi)$.

в) В тех случаях, когда интересно поведение отклика в некоторой области Z , в качестве критерия оптимальности выбирают интегральную дисперсию $N^{-1} \int_Z d(x, \xi) dx$, что опять приводит к критерию $\text{tr} AM^{-1}(\xi)$ с матрицей $A = \int_Z f(x) f^T(x) dx$. Иногда оказывается полезным введение весовой функции $\omega(x)$, учитывающей важность тех или иных точек x . При этом $A = \int_Z \omega(x) f(x) f^T(x) dx$.

г) В простейшем случае при $A = I_m$ речь идет о минимизации средней дисперсии оценок всех параметров: $\text{tr} M^{-1}(\xi) = \sum_{\alpha=1}^m D_{\alpha\alpha}(\xi)$.

2. Свойства линейно-оптимальных планов. Результаты § 3 применительно к линейным критериям можно сформулировать следующим образом:

а) Всегда найдется по крайней мере один линейно-оптимальный план, содержащий не более чем $s(2m - s + 1)/2$ опорных точек, $s = \text{rg} A$.

б) Задачи:

$$1) \xi^* = \text{Arg inf}_{\xi} \text{tr} AM^{-1}(\xi),$$

$$2) \xi^* = \text{Arg inf}_{\xi} \varphi(x, \xi),$$

$$3) \sup_x \varphi(x, \xi^*) = \text{tr} AM^{-1}(\xi^*)$$

эквивалентны между собой. Здесь $\varphi(x, \xi) = \text{tr} M^{-1}(\xi) AM^{-1}(\xi) \mu(x)$.

в) Множество линейно-оптимальных планов выпукло и в их опорных точках имеет место равенство $\text{tr} M^{-1}(\xi^*) AM^{-1}(\xi^*) \mu(x^*) = \text{tr} AM^{-1}(\xi^*)$.

г) Для любого регулярного плана $\xi \in \Xi$ имеет место неравенство

$$\sup_x \varphi(x, \xi) - \text{tr} AM^{-1}(\xi) \geq \text{tr} AM^{-1}(\xi) - \text{tr} AM^{-1}(\xi^*).$$

д) Если $\text{rg} A = m$, то информационные матрицы оптимальных планов совпадают между собой.

3. Частные случаи. Для одномерной по y классической регрессионной задачи имеем $\mu(x) = \lambda(x) f(x) f^T(x)$ и функция $\varphi(x, \xi)$ для конкретных критериев оптимальности принимает весьма простой вид. Например, при экстраполяции в точку $\varphi(x, \xi) = \lambda(x) [f^T(x_0) M^{-1}(\xi) f(x)]^2$. Функция $N^{-1} f^T(x_0) M^{-1} f(x)$ — это ковариация оценок отклика в точках x_0 и x ; поэтому наблюдения следует размещать в точках, где оценка наиболее коррелирована с оценкой отклика в точке x_0 (функция $\lambda(x)$ позволяет учитывать точность наблюдений).

Если система базисных функций ортонормирована в области X с весовой функцией $\lambda(x)$, то $A = I_m$ и, стало быть, эквивалент-

выми оказываются задачи отыскания плана, минимизирующего среднюю дисперсию оценок параметров $\sum_{\alpha=1}^m D_{\alpha\alpha}$ и интегральную дисперсию $\int_X d(x, \xi) dx$.

4. Сингулярные линейно-оптимальные планы. В данном разделе рассматриваются линейные критерии вида $\Psi[M] = \text{tr } L^T M^{-1} L$, где $\text{rg } L = s < m$, L — матрица размера $m \times s$. Предположим, что множество планов, для которых $M(\xi)M^{-1}(\xi)L = L$, не пусто, т. е. существуют планы, позволяющие оценить линейную комбинацию $L^T \theta$. Известно, что

$$L^T M^{-1} L = \sup_H [2L^T H - H^T M H], \quad H \in \mathbb{R}^{m \times s}.$$

Можно показать, что при $M_1 M_1^{-1} = L$ имеет место формула $\frac{\partial}{\partial \alpha} L^T [(1 - \alpha) M_1 + \alpha M_2]^{-1} L = - \inf_B C^T(M_1, B)(M_2 - M_1)C(M_1, B)$,

где $C(M_1, B) = (I - M_1^{-1} M_1)B + M_1^{-1} L$.

Объединение этой формулы с (9) позволяет утверждать, что необходимым и достаточным условием линейной оптимальности плана является выполнение неравенства

$$\inf_{\xi} \sup_x \int \text{tr } C^T(M(\xi), B) \mu(x) C(M(\xi), B) \xi(dB) \leq \text{tr } L^T M^{-1}(\xi) L.$$

Для приложений более полезным оказывается следующий результат. Пусть

$$\xi_{\gamma} = \text{Arg } \inf_{\xi} \text{tr } L^T [(1 - \gamma)M(\xi) + \gamma M(\xi_p)]^{-1} L,$$

где ξ_p — некоторый регулярный план; $|M(\xi_p)| \neq 0$. План ξ_{γ} называется γ -оптимальным. Оказывается, что

$$\text{tr } L^T M^{-1}(\xi_{\gamma}) L - \text{tr } L^T M^{-1}(\xi) L \leq \gamma [\text{tr } L M^{-1}(\xi_p) L - L^T M^{-1}(\xi) L].$$

Необходимым и достаточным условием γ -оптимальности плана является выполнение неравенства

$$\varphi(x, \xi_{\gamma}, \xi_p) \leq r(\xi_{\gamma}, \xi_p),$$

где

$$\begin{aligned} r(\xi_{\gamma}, \xi_p) &= \text{tr } L^T M^{-1}(\bar{\xi}) M(\xi_{\gamma}) M^{-1}(\bar{\xi}) L, \\ \varphi(x, \xi_{\gamma}, \xi_p) &= \text{tr } M^{-1}(\bar{\xi}) L L^T M^{-1}(\bar{\xi}) \mu(x), \\ \bar{\xi} &= (1 - \gamma)\xi_{\gamma} + \gamma\xi_p. \end{aligned}$$

§ 6. Критерии минимаксного типа

1. Основные свойства минимаксных планов. Пусть

$$\Psi^*[M] = \sup_u \Psi[M, u], \quad u \in U,$$

где множество U — компакт, функция $\Psi[M, u]$ непрерывна по u

на этом множестве и при каждом $u \in U$ функция $\Psi[M, u]$ удовлетворяет условиям (b), (c) и (d) из § 3. Планы $\xi^* = \underset{\xi}{\text{Arg inf}} \sup_u \Psi[M, u]$ называются *минимаксными*.

Необходимым и достаточным условием минимаксности плана ξ^* является выполнение неравенства

$$\sup_{\xi} \inf_x \int_{U(\xi^*)} \text{tr} [\mu(x) - M(\xi)] \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M(\xi)} \xi(du) \geq 0, \quad (12)$$

где $U(\xi)$ — множество всех решений экстремальной задачи $\sup_u \Psi[M(\xi), u]$. В основе (12) лежит (9) и известная формула

$$\Delta(M^*, M) = \sup_{u \in U(\xi^*)} \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi[(1 - \alpha)M^* + \alpha M, u].$$

Неравенство (12) эквивалентно неравенству

$$\inf_{\xi} \sup_{u \in U(\xi)} \text{tr} [M(\xi) - M(\xi^*)] \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M(\xi^*)} \geq 0. \quad (13)$$

Если ξ^* доставляет максимум левой части (12), то (см. § 3)

$$\begin{aligned} \psi(x, \xi^*, \zeta^*) &\geq \text{tr} \mu(x) \int \frac{\partial \Psi}{\partial M} \zeta^*(du), \\ q(M^*, \zeta^*) &= \text{tr} M \int \frac{\partial \Psi}{\partial M} \zeta^*(du). \end{aligned}$$

Необходимые и достаточные условия минимаксности плана можно сформулировать в форме, несколько более удобной для приложений, чем (12). А именно, необходимым и достаточным условием минимаксности плана ξ^* является существование такой меры ζ^* , что

$$\psi(x, \xi^*, \zeta^*) \geq q(M^*, \zeta^*). \quad (14)$$

2. G-критерий. Пусть $\mu(x) = \lambda(x)f(x)f^T(x)$, $\Psi[M] = \sup_{u \in U} f^T(u) \times M^{-1}f(u)$, где $f^T(u)M^{-1}f(u)$ — дисперсия оценки отклика в точке u . Здесь и в дальнейшем указание на то, что матрица $\mu(x)$ имеет вид $\lambda(x)f(x)f^T(x)$, говорит также о том, что речь идет о классической одномерной по y регрессионной задаче. Так как

$$\frac{\partial \Psi}{\partial M} = -M^{-1}f(u)f^T(u)M^{-1},$$

то для G -оптимальности плана ξ^* необходимо и достаточно выполнение неравенства

$$\inf_{\xi} \sup_x \lambda(x) \int_{U(\xi)} d^2(x, u, \xi) \xi(du) \leq d(\xi^*), \quad (15)$$

где $d(x, u, \xi) = f^T(x)M^{-1}(\xi)f(u)$, $d(u, \xi) = f^T(u)M^{-1}(\xi)f(u)$, $U(\xi)$ —

множество решений экстремальной задачи

$$u^* = \text{Arg sup}_{u \in Z} d(u, \xi), \quad d(\xi) = d(u^*, \xi) = \Psi[M(\xi)].$$

План ξ^* , удовлетворяющий (15), как уже упоминалось ранее, будет совпадать с D -оптимальным лишь при $Z = X$ и $\lambda(x) \equiv \text{const}$.

§ 7. Теория двойственности

Результаты §§ 3—6 основаны на изучении величины

$$\lim_{\alpha \rightarrow +0} \frac{\Psi[(1-\alpha)M(\xi_1) + \alpha M(\xi_2)] - \Psi[M(\xi_1)]}{\alpha}.$$

Другой подход заключается в исследовании экстремальной задачи, двойственной к задаче нахождения оптимального плана. Уже в случае D -критерия и оценки всех параметров соображения двойственности позволяют получить дополнительные результаты (см. § 9). Особенно же полезным анализ двойственности задачи оказывается в случае оценки параметрической функции $L^T\theta$ (сингулярные планы эксперимента), где L — матрица размера $m \times s$ ($s < m$).

1. Вспомогательные понятия. Следующие понятия и обозначения необходимы в дальнейшем. Через \mathcal{P}_m ($\overline{\mathcal{P}}_m$) обозначим множество всех симметричных положительно (неотрицательно) определенных $m \times m$ -матриц. Пусть L — фиксированная $m \times s$ -матрица ранга s ($s \leq m$). Через $U(L)$ обозначим множество всех матриц $A \in \overline{\mathcal{P}}_m$, порождающих подпространство, содержащее подпространство, порожденное матрицей L . Параметрическая функция $L^T\theta$ оцениваема тогда и только тогда, когда существует план ξ такой, что $M(\xi) \in U(L)$. Через J обозначим функцию из $\overline{\mathcal{P}}_m$ в $\overline{\mathcal{P}}_s$, отображающую A в $(L^T A - L)^{-1}$, если $A \in U(L)$, и в нуль — в противном случае.

Справедливы следующие утверждения:

- 1) Функция J определена однозначно.
- 2) Функция J является выпуклой и изотонной (последнее означает, что $J(A) > J(B)$, если $A \geq B$ и $L^T A L \neq L^T B L$).
- 3) Матрица информации при оценивании параметрической функции $L^T\theta$ есть $J(M(\xi))/\sigma^2$.

Вещественную функцию j , заданную на $\overline{\mathcal{P}}_s$, назовем функцией информации, если:

- а) она неотрицательна на $\overline{\mathcal{P}}_s$ и положительна на \mathcal{P}_s ;
- б) она положительно однородна (т. е. $j(\alpha A) = \alpha j(A)$ при $\alpha > 0$);
- в) она супераддитивна (т. е. $j(A + B) \geq j(A) + j(B)$).

Функционал информации является вогнутым и изотонным и удовлетворяет соотношению $j(0) = 0$. Условия на j являются несколько более строгими, чем условия на Ψ из § 3. Вместе с тем в теории двойственности не налагается требования дифференцируемости. Практически все критерии оптимальности, используе-

мые в планировании эксперимента, могут быть представлены как информационные функционалы.

Введем обозначения:

$$j_{\mathcal{L}}(A) = \text{tr } A\mathcal{L}, \quad \mathcal{L} \in \overline{\mathcal{P}}_m, \quad \mathcal{L} \neq 0,$$

$$j_p(A) = (\text{tr } A^p/s)^{1/p}, \quad p \neq 0, \quad -\infty < p \leq 1,$$

(соответствует Φ_p -оптимальности по Киферу), $j_0(A) = (\det A)^{1/s}$ (соответствует D -оптимальности), $j_{-\infty}(A) = \lambda_{\min}(A)$ (E -оптимальность).

Пусть \mathfrak{M} — компактное выпуклое подмножество $\overline{\mathcal{P}}_m$, имеющее непустое пересечение с $U(L)$. Любой элемент \mathfrak{M} будем называть *матрицей информации*. (При этом мы отвлекаемся от конкретной структуры \mathfrak{M} . В частности, можно положить $\mathfrak{M} = M(\Xi)$, где $M(\Xi)$ определено в § 2.)

Задача оптимального планирования принимает вид: найти

$$M^* = \arg \sup_{M \in \mathfrak{M}} j \circ J(M). \quad (16)$$

При $L = I$ имеем $J(M) \equiv M$, и задача (16) сводится к задаче поиска Ψ -оптимального плана, сформулированной в § 3 (соотношение (8)).

Задача (16) есть задача оптимального планирования в смысле критерия j (в частности, $j_{\mathcal{L}}, j_p, j_0, j_{-\infty}$) при оценивании параметрической функции $L^T\theta$. Заметим, что здесь речь идет только о нахождении информационной матрицы плана (свойства самих планов изучаются в следующем параграфе).

2. Теорема двойственности. Задаче оптимального планирования (16) можно сопоставить двойственную задачу. Введем двойственную функцию j^0 равенством

$$j^0(A) = \inf \{ \text{tr } AC / j(C) \mid C \in \mathcal{P}_s \}.$$

Если $A > 0$, то $j^0(A) > 0$. Пусть \mathfrak{M}^0 — полярна множества \mathfrak{M} (т. е. множество $m \times m$ -матриц B таких, что $\text{tr } MB \leq 1 \quad \forall M \in \mathfrak{M}$). Ввиду монотонности j^0 достаточно изучить множество

$$\mathfrak{N} = \mathfrak{M}^0 \cap \overline{\mathcal{P}}_s.$$

Считая $1/0 = +\infty$, определим двойственную задачу для задачи (16):

$$N^* = \arg \inf_{N \in \mathfrak{N}} \frac{1}{j^0(L^T N L)}. \quad (17)$$

Задачи (16) и (17) являются двойственными в обычном смысле, т. е. ограничивают друг друга и имеют общее экстремальное значение. Точнее, имеют место следующие теоремы.

Теорема 2 (теорема о взаимной ограниченности). *Для любой информационной матрицы $M \in \mathfrak{M}$ и любой матрицы $N \in \mathfrak{N}$ имеет место неравенство $j \circ J(M) \leq 1/j^0(L^T N L)$; причем равенство выполняется тогда и только тогда, когда*

$M \in U(L)$, и при $C = J(M)$, $D = L^T N L$ имеем $\text{tr } MN = 1$, $MN = LCL^T N$, $j^0(C)j^0(D) = \text{tr } CD$.

Теорема 3 (теорема двойственности). Для того чтобы матрица $M \in \mathfrak{M}$ была решением задачи (16), необходимо и достаточно существования такой матрицы $N \in \mathfrak{N}$, что $j \circ J(M) = 1/j^0(L^T N L)$. Более того, имеет место равенство

$$\sup_{M \in \mathfrak{M}} j \circ J(M) = \min_{N \in \mathfrak{N}} \frac{1}{j^0(L^T N L)}.$$

Сформулированная теорема является следствием для задачи (16) известной в выпуклом анализе теоремы двойственности Фейхеля. Полезность приведенных теорем определяется тем, что в ряде случаев исследование двойственной задачи оказывается проще. Кроме того, получаем верхнюю границу для значения критерия.

Выражения для $(j_p)^0$ и $(j_{\mathcal{L}})^0$ определяются следующими результатами.

1) При $p \in [-\infty, 1]$ имеем $(j_p)^0 = sj_q$, где $q = 1/(1 - 1/p)$. Если матрица $C \in \mathcal{P}_s$, то матрица $D \in \overline{\mathcal{P}_s}$ является решением уравнения $j_p(C)(j_p)^0(D) = \text{tr } CD = 1$ тогда и только тогда, когда $D = C^{p-1}/\text{tr } C^p$ в случае $p > -\infty$ и $\lambda_{\min}(C)D \in \text{con } C$ в случае $p = -\infty$. Здесь $\text{con } C$ обозначает выпуклую оболочку всех $s \times s$ -матриц вида zz^T таких, что z есть собственный вектор C , соответствующий $\lambda_{\min}(C)$ с евклидовой нормой, равной 1.

2) $(j_{\mathcal{L}})^0(D) = 1/\lambda_{\max}(D - \mathcal{L})$, если $D \in U(L)$, и $(j_{\mathcal{L}})^0(D) = 0$ в противном случае. Для заданной матрицы $C \in \mathcal{P}_m$ матрица $D \in \overline{\mathcal{P}_m}$ есть решение уравнения $j_{\mathcal{L}}(C)(j_{\mathcal{L}})^0(D) = \text{tr } CD = 1$ тогда и только тогда, когда $D = \mathcal{L}/\text{tr } C\mathcal{L}$.

§ 8. Общая теорема эквивалентности

1. Теорема эквивалентности для информационных матриц. Теорема двойственности из предыдущего параграфа позволяет получить общую теорему эквивалентности, не использующую предположений о дифференцируемости критерия.

Отметим, что решение задачи (16) всегда находится в $U(L) \cap \mathfrak{M}$.

Теорема 4. Пусть $M \in \mathfrak{M} \cap U(L)$ и $C = J(M) = (L^T M - L)^{-1}$. Тогда M является решением задачи (16) в том и только в том случае, когда существует псевдообратная матрица G для M и матрица $D \in \overline{\mathcal{P}_s}$ со свойствами

$$\begin{aligned} j(C)j^0(D) &= \text{tr } CD = 1, \\ \text{tr } \overline{A}G^T L C D C^T L^T G &\leq 1 \quad \forall A \in \mathfrak{M}. \end{aligned}$$

Теорема 4 разбивает характеризацию решения задачи (16) на две части, соответствующие функциям j и J . Первая часть состоит в нахождении $s \times s$ -матриц C и D ; во многих случаях ре-

шение уравнения $j(C)j^0(D) = \text{tr} CD = 1$ может быть явно найдено. Вторая часть относится к матрицам G и A .

В случае $s = 1$ вместо $L^T\theta$ будем писать $c^T\theta$, где c — фиксированный вектор из \mathbf{R}^m , а вместо $U(L)$ — множество $U(c)$. Таким образом, $U(c)$ — множество матриц единичного ранга, порождающее подпространство единичной размерности, натянутое на вектор c . В этом случае все функционалы информации приводят к одной и той же задаче (16), а теорема 4 принимает следующий вид.

Матрица $M \in \mathfrak{M} \cap U(c)$ есть решение задачи (16) в том и только в том случае, когда существует такая матрица G , псевдообратная для M , что

$$c^T G A G^T c \leq c^T M^{-} c \quad \forall A \in \mathfrak{M}.$$

Для j_p -критерия при $p \in [1, \infty)$ теорема 4 принимает другой вид.

Пусть $M \in \mathfrak{M} \cap U(L)$. Тогда M есть решение задачи (16) в том и только в том случае, когда существует такая матрица G , псевдообратная для M , что

$$\text{tr} L^T G A G^T (L^T M^{-} L)^{-p-1} \leq \text{tr} (L^T M^{-} L)^p \quad \forall A \in \mathfrak{M}.$$

При $p = -\infty$ матрица $M \in \mathfrak{M}$ есть решение задачи (16) тогда и только тогда, когда существуют такие матрица G , псевдообратная к M , и матрица $E \in \text{con}v M$ ($\text{con}v M$ определено в конце § 7), что

$$\text{tr} L^T G A G^T A E \leq \lambda_{\max}(L^T M^{-} L) \quad \forall A \in \mathfrak{M}.$$

2. Теорема эквивалентности для планов эксперимента. Пусть теперь $\mathfrak{M} = M(\mathfrak{E}) = \left\{ \int f(x) f^T(x) \xi(dx), \xi \in \mathfrak{E} \right\}$, где \mathfrak{E} — множество всех вероятностных мер, заданных на X . Для любой матрицы $A \in M(\mathfrak{E})$, принадлежащей $U(L)$, существует такой непрерывный план $\xi \in \mathfrak{E}$, сосредоточенный не более чем в $s(s+1)/2 + s(\text{rang} A - s)$ точках, что $\alpha J(A) = J(M(\xi))$ при некотором вещественном $\alpha \geq 1$. Множество $M(\mathfrak{E})^0$ допускает следующую интерпретацию:

$$N \in M(\mathfrak{E})^0 \leftrightarrow f^T(x) N f(x) \leq 1 \quad \forall x \in X.$$

Теорема 4 для случая $\mathfrak{M} = M(\mathfrak{E})$ принимает следующий вид.

Пусть $\xi \in \mathfrak{E}$ таково, что $M(\xi) \in U(L)$, и пусть $C = (L^T M^{-}(\xi) L)^{-1}$. Тогда $M(\xi)$ является решением задачи (16) в том и только в том случае, когда существуют такие матрицы $G = M^{-}$ и $D \in \mathcal{P}$, что

$$j(C)j^0(D) = \text{tr} CD = 1,$$

$$f^T(x) G^T L C D C L^T G f(x) \leq 1 \quad \forall x \in X.$$

Если ξ — оптимальный план, то $f^T(x) G^T L C D C L^T G f(x) = 1$ для всех точек спектра любого оптимального плана. Веса точек плана характеризует следующий результат.

Пусть $M(\xi)$ — решение задачи (16) при $\mathfrak{M} = M(\Xi)$, матрицы C, D, G такие, как в теореме эквивалентности (п. 1) и $\xi = \{x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n\}$. Тогда вектор $p = (p_1, \dots, p_n)^T$ есть решение уравнения $A_p = e$ ($e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^1$), причем $A \in \overline{\mathcal{P}}_n$ и элементы A определяются выражением

$$a_{hi} = \{g^T(x_h)(E^T D E)^{1/2} g(x_i)\}^2,$$

где $g(x) = E^T L^T G f(x)$, E таково, что $EE^T = C$.

Кроме того, $p_i \leq 1/a_{ii}$ и $\max p_i \leq \lambda_{\max}(CD)$.

§ 9. Теория двойственности для D - и E -критериев

1. D -критерий. Теорема двойственности для D -критерия может быть сформулирована следующим образом.

Задача нахождения D -оптимального плана и задача поиска

$$N^* = \arg \min_N \ln \det N^{-1}$$

при условии

$$N \in \{A \in \mathcal{P}_m; f^T(x) A f(x) \leq t \quad \forall x \in X\}$$

связаны соотношением двойственности, причем

$$N^* = M^{-1}(\xi^*),$$

где ξ^ — любой D -оптимальный план.*

Из этого результата вытекает теорема эквивалентности Кифера — Вольфовица (см. § 4), а также следующая геометрическая интерпретация: среди матриц всех эллипсоидов с центром в начале, описанных вокруг множества $f(X) \subset \mathbb{R}^m$, матрица с наименьшим определителем является обратной к матрице D -оптимального плана; такая матрица определена единственным образом ($f(X) = \{f(x); x \in X\}$).

2. E -критерий. *Задача нахождения E -оптимального плана и задача поиска*

$$N^* = \arg \min_N \frac{1}{\text{tr } N}$$

при условии

$$N \in \{A \in \overline{\mathcal{P}}_m; \sup_{x \in X} f^T(x) A f(x) = 1\}$$

связаны соотношением двойственности и

$$1/\text{tr } N^* = \sup_{\xi} \lambda_{\min}(M(\xi)).$$

Решение двойственной задачи, очевидно, существует, но в общем случае не единственно.

Указанная теорема имеет изящную геометрическую интерпретацию, аналогичную интерпретации D -критерия. Среди матриц всех эллипсоидов (включая вырожденные) с центром в начале, описанных вокруг множества $f(X) \subset \mathbb{R}^m$, матрица с максимальной

ным следом является решением двойственной задачи, и ее след равен $\inf \lambda_{\max}(M^{-1}(\xi))$.

Из этой теоремы вытекает ряд характеристик E -оптимальных планов. Необходимым условием принадлежности точки x^* спектру какого-либо E -оптимального плана является равенство

$$f^T(x^*)N^*f(x^*) = 1/\lambda_{\min},$$

где $\lambda_{\min} = \sup_{\xi} \lambda_{\min}(M(\xi))$.

План ξ^* является E -оптимальным тогда и только тогда, когда существует матрица A такая, что

$$\sup_{x \in X} f^T(x) A f(x) = 1/\lambda_{\min}(M(\xi^*)),$$

$$\text{tr } A = 1.$$

Пусть $\{\xi_\alpha\}$ — множество всех E -оптимальных планов, P_α — подпространство, соответствующее $\lambda_{\min}(M(\xi_\alpha))$. Тогда подпространство $P = \bigcap P_\alpha$ не пусто и любое решение двойственной задачи порождает некоторое P_α .

Отметим, что подход §§ 3—6 приводит к более слабым результатам.

Литература к гл. 2; к §§ 1—6: [15, 20, 30, 44, 67, 92—94, 106—112, 121, 122, 127, 132, 135—137, 140, 142, 149—151, 155, 165, 173, 187, 193—196]; к §§ 7—9: [63, 176, 186].

ГЛАВА 3

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ НЕПРЕРЫВНЫХ ПЛАНОВ

В настоящей главе на базе результатов гл. 2 указаны некоторые приемы явного решения задачи оптимального непрерывного планирования регрессионных экспериментов.

Наиболее законченные и элегантные результаты получены в одномерном случае, где прослеживается связь между точками некоторых оптимальных планов и корнями классических ортогональных многочленов. В многомерном случае некоторые частные задачи решены для трех наиболее важных для практики случаев: гиперкуба, гипершара и симплекса.

Как и ранее, предполагается:

а) функция регрессии $\eta(x, \theta)$ известна с точностью до конечного числа линейно входящих параметров;

б) относительно параметров не делается априори иных предположений, кроме $\theta \in \mathbb{R}^m$;

в) результаты наблюдений описываются схемой Гаусса — Маркова, но не предполагается равнозначности;

г) множество планирования X компактно в \mathbb{R}^k .

В качестве критериев оптимальности планирования выступают D -критерий и линейные критерии.

§ 1. D - и G -оптимальные планы в одномерном случае

Будем рассматривать D -оптимальное непрерывное планирование, имея в виду связь между D - и G -критериями, устанавливаемую теоремой эквивалентности Кифера — Вольфовитца (см. гл. 2).

1. Одномерная полиномиальная регрессия. Пусть $f_i(x) = x^{i-1}$ ($i = 1, \dots, m$).

Теорема 1. D -оптимальный план для случая полиномиальной регрессии на отрезке $[a, b]$ сосредоточен в m точках, если выполняется одно из следующих условий:

1) система функций $\{1, \lambda(x), \lambda(x)x, \dots, \lambda(x)x^{2(m-1)}\}$ является чебышевской на $[a, b]$;

2) $\lambda(x) = P^{-1}(x)$, где $P(x)$ — многочлен, положительный на $[a, b]$, причем его $(2m-1)$ -я производная $P^{(2m-1)}(x)$ не обращается в нуль на открытом интервале (a, b) ;

3) $\lambda(x)$ можно равномерно аппроксимировать функциями из 2);

4) $\lambda(x) = P^{-1}(x)$, где $P(x)$ — многочлен степени не выше $2(m-1)$, положительный на $[a, b]$.

Задача D -оптимального планирования для полиномиальной регрессии может рассматриваться при $\lambda(x) \equiv 1$, но с соответствующим преобразованием базисных функций.

Для того чтобы найти D -оптимальный план в пространстве непрерывных планов, надо решить задачу максимизации на множестве точек $x_j \in [a, b]$ и весов p_j ($j = 1, \dots, n$; $p_j > 0$, $\sum_{j=1}^n p_j = 1$) определителя

$$|M(\xi)| = \det \left\| \sum_{j=1}^n p_j \lambda(x_j) f(x_j) f^T(x_j) \right\|,$$

где $n \leq m(m+1)/2$. Если $n = m$, то

$$|M(\xi)| = \prod_{j=1}^m p_j \prod_{s=1}^m \lambda(x_s) \prod_{1 \leq i < l \leq m} (x_i - x_l)^2,$$

если спектр D -оптимального плана ξ^* содержит m точек, то соответствующие им веса оказываются равными $p_j^* = m^{-1}$ ($j = 1, \dots, m$), а точки спектра служат решением следующей экстремальной задачи:

$$\{x_j^*\}_{j=1}^m = \text{Arg} \min_{x_j, j=1, \dots, m} \prod_{s=1}^m \lambda(x_s) \prod_{1 \leq i < l \leq m} (x_i - x_l)^2.$$

В некоторых случаях можно явно указать и спектр D -оптимального плана.

Теорема 2. Пусть в случае полиномиальной регрессии весовая функция совпадает с одной из следующих:

- 1) $\lambda(x) \equiv 1$, $X = [-1, 1]$;
- 2) $\lambda(x) = (1-x)^{\alpha+1}(1+x)^{\beta+1}$, $X = [-1, 1]$, $\alpha > -1$, $\beta > -1$;
- 3) $\lambda(x) = e^{-x}$, $X = [0, \infty)$;
- 4) $\lambda(x) = x^{\alpha+1}e^{-x}$, $X = [0, \infty)$, $\alpha > -1$;
- 5) $\lambda(x) = e^{-x^2}$, $X = (-\infty, \infty)$.

Тогда D -оптимальный план единствен и сосредоточен с равными весами $p_j = m^{-1}$ в m точек, являющихся соответственно корнями многочленов:

1) $(1-x^2)P'_{m-1}(x)$, где $P'_{m-1}(x)$ — первая производная многочлена Лежандра $(m-1)$ -й степени;

2) $P_m^{(\alpha, \beta)}(x)$ — многочлен Якоби m -й степени с параметрами α, β ;

3) $xL_{m-1}^{(1)}(x)$, где $L_{m-1}^{(1)}(x)$ — многочлен Лагерра $(m-1)$ -й степени с параметром 1;

4) $L_m^{(\alpha)}(x)$ — многочлен Лагерра m -й степени с параметром α ;

5) $H_m(x)$ — многочлен Эрмита m -й степени.

2. **Одномерная тригонометрическая регрессия.** Пусть $\eta(x, \theta)$ — тригонометрический многочлен степени $m-1$ по системе косинусов на отрезке $X = [0, \pi]$, т. е.

$$f_i(x) = \cos(i-1)x, \quad i = 1, \dots, m; \quad \lambda(x) \equiv 1.$$

Этот случай легко сводится к случаю полиномиальной регрессии на отрезке $[-1, 1]$ с $\lambda(x) \equiv 1$. D -оптимальная мера ξ^* сосредоточена с равными весами $p_j^* = m^{-1}$ в m точках $x_j^* = \arccos z_j$ ($j = 1, \dots, m$), где z_1, \dots, z_m — нули многочлена $(1-z^2)P'_{m-1}(z)$, где $P_{m-1}(z)$ — многочлен Лежандра $(m-1)$ -й степени.

Рассмотрим тригонометрическую регрессию d -го порядка по системе косинусов и синусов в интервале $X = [0, 2\pi]$, когда

$$\{f_i(x)\}_{i=0}^{2d} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = 0, \\ \sin 0,5(i+1)x, & \text{если } i \text{ — нечетное,} \\ \cos 0,5ix, & \text{если } i \text{ — четное.} \end{cases}$$

Любой непрерывный план ξ^* , сосредоточенный с равными весами $p_j^* = n^{-1}$ ($j = 1, \dots, n$) в любом числе $n \geq 2d+1$ равноотстоящих на $[0, 2\pi]$ точек

$$x_j^* = \frac{j-1}{n} 2\pi + \gamma \pmod{2\pi}, \quad j = 1, \dots, n,$$

где $\gamma \in [0, 2\pi]$ — произвольное, является D -оптимальным планом для тригонометрической регрессии d -го порядка по синусам и косинусам.

В качестве меры ξ^* можно выбрать и непрерывную равномерную меру на $[0, 2\pi]$, т. е. $\xi^*(dx) = \frac{1}{2\pi} dx$, которой соответствует диагональная информационная матрица с элементами $m_{00}(\xi^*) = 1$, $m_{ii}(\xi^*) = 1/2$ ($i = 1, \dots, 2d$).

Легко убедиться, что план, D -оптимальный для тригонометрической регрессии d -го порядка, является D -оптимальным и для тригонометрической регрессии порядка не более d .

Литература к § 1: [21, 41, 71*, 93, 141, 144, 155].

§ 2. D - и G -оптимальные планы в многомерном случае

1. **Линейная регрессия на k -мерном кубе.** Критериями оптимальности планов экспериментов на протяжении этого параграфа будут критерий D -оптимальности и эквивалентный ему при $\lambda(x) \equiv 1$ и $X = Z$ критерий G -оптимальности. Часто бывает желательно, чтобы план эксперимента имел, кроме того, и другие хорошие свойства, которые связаны, например, с соображениями удобства использования.

В некоторых алгоритмах экспериментального поиска экстремума как промежуточный этап встает задача локальной линейной аппроксимации исследуемой зависимости на каждом шаге продвижения к экстремуму. В связи с этим здесь неоднократно встречается задача планирования регрессионных экспериментов для линейной регрессии (полиномиальной первого порядка) на k -мерном кубе. Специфика задачи предъявляет особые требования к плану эксперимента, наиболее важными из которых являются ортогональность, ротатабельность и насыщенность.

План ξ называется *ортогональным*, если ему соответствует диагональная информационная матрица $M(\xi)$. Ортогональность плана облегчает вычисление оценок коэффициентов регрессии и обеспечивает их некоррелированность, что позволяет исключать из регрессионного выражения те члены, коэффициенты при которых оказались статистически незначимыми, без пересчета остальных.

План ξ называется *ротатабельным*, если $d(x, \xi)$ зависит только от расстояния точки $x \in X$ до некоторой фиксированной точки c , называемой *центром эксперимента*. Ротатабельный план делает равноправными все направления, в которых может происходить дальнейшее экспериментирование.

План ξ называется *насыщенным*, если он содержит минимально возможное число точек наблюдений.

Пусть

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \sum_{i=1}^k \theta_i x^{(i)},$$

т. е. $m = k + 1$, $f_0(x) \equiv 1$, $f_i(x) = x^{(i)}$ ($i = 1, \dots, k$).

Будем предполагать на протяжении этого параграфа, что $\lambda(x) \equiv 1$. Тогда:

1. Если X — замкнутая область k -мерного евклидова пространства, то все точки D -оптимального плана ξ^* лежат на границе X .

2. Если X — k -мерный куб, то спектр D -оптимального плана для линейной регрессии сосредоточен в вершинах этого куба (не обязательно во всех).

План $\bar{\xi}$, сосредоточенный во всех 2^k вершинах $\{\bar{x}_j\}_{j=1}^{2^k}$ k -мерного куба X : $-1 \leq x^{(i)} \leq 1$ ($i = 1, \dots, k$) и приписывающий этим вершинам равную меру $\bar{p}_j = 1/2^k$ ($j = 1, \dots, 2^k$), носит специальное название — *полный факторный эксперимент* для k факторов, меняющихся на двух уровнях (-1 и $+1$ в кодовых переменных). Непосредственные расчеты показывают, что $M(\bar{\xi}) = I_{k+1}$, т. е. $\bar{\xi}$ — ортогональный план. Далее:

$$d(x, \bar{\xi}) = 1 + \sum_{i=1}^k (x^{(i)})^2, \quad \max_x d(x, \bar{\xi}) = k + 1.$$

Следовательно, $\bar{\xi}$ — ротатабельный и D -оптимальный план. Поскольку информационные матрицы всех D -оптимальных планов

совпадают, любой D -оптимальный план для линейной регрессии на k -мерном кубе также является ортогональным и ротатабельным.

Несмотря на отмеченные преимущества полного факторного эксперимента, он не всегда удобен для практического использования, так как при больших k содержит значительное число точек в спектре -2^k . Поэтому представляет интерес задача построения D -оптимального плана с наименьшим числом точек. В данном случае минимально возможное число точек любого плана для оценки всех параметров равно $k+1$.

Геометрическая структура D -оптимальных насыщенных планов первого порядка связана с симплекс-планами, т. е. планами, сосредоточенными в вершинах правильного симплекса k -мерного пространства с центром в начале координат. Нетрудно показать, что если ортогональный план для линейной регрессии сосредоточен в $k+1$ точках, то он является симплекс-планом, и обратно, всякий симплекс-план ортогонален.

Точки D -оптимального симплекс-плана для линейной регрессии на k -мерном кубе принадлежат множеству вершин этого куба. Однако не для всех размерностей k существует правильный симплекс, все вершины которого совпадают с некоторыми из вершин куба. Например, при $k=3$ этого можно достичь, а при $k=2$ нет. Указанные симплексы построены для всех таких размерностей k , что $k+1 \equiv 0 \pmod{4}$, от $k=3$ до $k=199$, за исключением $k=187$. Это связано с вопросом существования матриц Адамара.

2. Полиномиальная регрессия второго порядка на k -мерном кубе. Пусть $X = \{x = (x^{(1)}, \dots, x^{(k)})^T \mid -1 \leq x^{(i)} \leq 1, i = 1, \dots, k\}$, $f(x) = (1; (x^{(1)})^2, \dots, (x^{(k)})^2; x^{(1)}, \dots, x^{(k)}; x^{(1)}x^{(2)}, \dots, x^{(k-1)}x^{(k)})^T$ — вектор размерности $m = C_{k+2}^2 = (k+1)(k+2)/2$.

План ξ называется симметричным планом второго порядка, если для всех неотрицательных целых α_i ($i = 1, \dots, k, \sum_{i=1}^k \alpha_i \leq 4$) выполняются следующие моментные соотношения:

$$\lambda(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = \int_X (x^{(1)})^{\alpha_1} \times \dots \times (x^{(k)})^{\alpha_k} \xi(dx) = \begin{cases} 0, & \text{если хотя бы одно } \alpha_i \text{ — нечетное,} \\ \neq 0, & \text{если все } \alpha_i \text{ — четные,} \end{cases}$$

и $\lambda(\alpha_1, \dots, \alpha_k)$ — симметричная функция всех своих аргументов. Обозначим $\lambda_2 = \lambda(2, 0, \dots, 0)$, $\lambda_3 = \lambda(2, 2, 0, \dots, 0)$, $\lambda_4 = \lambda(4, 0, \dots, 0)$. Для симметричных планов второго порядка

$$M(\xi) = \begin{bmatrix} 1 & R^T & 0 & 0 \\ R & G & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_2 I_k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_3 I_{k(k-1)/2} \end{bmatrix},$$

где $R^T = (\lambda_2, \dots, \lambda_2)$ — строка размера $1 \times k$, G — матрица раз-

мера $k \times k$ с диагональными элементами λ_4 и внедиагональными λ_3 ,

$$|M(\xi)| = \lambda_2^k \lambda_3^{k(k-1)/2} (\lambda_4 - \lambda_3)^{k-1} [\lambda_4 + (k-1)\lambda_3 - k\lambda_2^2].$$

Теорема 3. 1) *D-оптимальные планы содержатся в множестве симметричных планов.*

2) *Носители D-оптимальных мер сосредоточены в точках множества $\mathcal{E} = \{x \in X \mid |x^{(i)}| = 1, 0, i = 1, \dots, k\}$.*

3) *Значения λ_2^* , λ_3^* , λ_4^* , максимизирующие $|M(\xi)|$, соответствуют D-оптимальному плану и равны*

$$\lambda_2^* = \lambda_4^* = \frac{k+3}{4(k+1)(k+2)^2} [2k^2 + 3k + 7 + (k-1)(4k^2 + 12k + 17)^{1/2}],$$

$$\lambda_3^* = \frac{k+3}{8(k+1)(k+2)^3} \times \\ \times [4k^3 + 8k^2 + 11k - 5 + (2k^2 + k + 3)(4k^2 + 12k + 17)^{1/2}].$$

Представим множество точек с целочисленными координатами в виде $\mathcal{E} = \bigcup_{r=0}^k \mathcal{E}_r$, где \mathcal{E}_r — множество точек, у которых r координат равны нулю, а $k-r$ координат равны $+1$ или -1 , т. е. \mathcal{E}_r — множество центров граней размерности r . Будем искать *D-оптимальные планы* в классе планов Ξ_0 на \mathcal{E} , который определяется тем, что мера $\xi(\mathcal{E}_r) \equiv p_r$ распределена равномерно между всеми $C_k^r \cdot 2^{k-r}$ точками \mathcal{E}_r .

Теорема 4. *План ξ является D-оптимальным для квадратичной регрессии на k -мерном кубе тогда и только тогда, когда:*

1) ξ — симметричный план второго порядка, определенный на множестве $\mathcal{A} \subset \mathcal{E}$;

2) величины $p_r = \xi(\mathcal{A} \cap \mathcal{E}_r)$ являются решениями следующей системы:

$$\sum_{r=0}^k p_r = 1, \quad p_r > 0, \\ \sum_{r=0}^k \frac{k-r}{k} p_r = \lambda_2^*, \\ \sum_{r=0}^k \frac{(k-r)(k-r-1)}{k(k-1)} p_r = \lambda_3^*.$$

D-оптимальные планы, определенные на множествах \mathcal{E}_0 , \mathcal{E}_1 , \mathcal{E}_2 , называются планами Кифера, а на множествах \mathcal{E}_0 , \mathcal{E}_1 , \mathcal{E}_k — планами Коно (табл. 1).

Планы Кифера существуют только при $k \leq 5$. Планы Коно построены для размерностей $1 \leq k \leq 9$, причем для $k \leq 5$ исполь-

зуются множества $\mathcal{E}_k, \mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1$; для $6 \leq k \leq 9$ — множества $\mathcal{E}_k, \mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1$ либо \mathcal{E}_2 . Для размерностей $k = 1, 2$ планы Кифера и Коно совпадают. Заметим также, что если $k \geq 2$, то меньше чем тремя множествами \mathcal{E}_r при построении D -оптимального плана из класса \mathcal{E}_0 обойтись нельзя.

Т а б л и ц а 1

k	Планы Кифера			Планы Коно		
	p_0	p_1	p_2	p_0	p_1	p_k
1	0,666(6)	0,333(3)	0	0,666(6)	—	0,333(3)
2	0,5832	0,3206	0,0962	0,5832	0,3206	0,0962
3	0,5758	0,2274	0,1968	0,5103	0,4242	0,0655
4	0,5928	0,1228	0,2844	0,4506	0,5021	0,0473
5	0,6170	0,0250	0,3580	0,4020	0,5620	0,0360
6	—	—	—	0,3623	0,6097	0,0280
7	—	—	—	0,3297	0,6487	0,0216

Имеет место следующий результат общего характера.

Теорема 5. Если D -оптимальный план сосредоточен в точках трех множеств $\mathcal{E}_{r_1}, \mathcal{E}_{r_2}, \mathcal{E}_{r_3}$, то $r_1 = 0, r_2 = 1, 2 \leq r_3 \leq k$, когда $2 \leq k \leq 5$; $r_1 = 0, r_2 = 1, 2, 3 \leq r_3 \leq k$, когда $k \geq 6$.

Если обозначить решение приведенной выше системы для индексов $0, 1, r$ ($r \leq 3$ при $k \geq 6$) через

$$P^{(1)}(r) = (p_0^{(1)}(r), p_1^{(1)}(r), \dots, p_r^{(1)}(r), \dots),$$

а решение этой же системы для индексов $0, 2, r$ (при $k \geq 6$) через

$$P^{(2)}(r) = (p_0^{(2)}(r), 0, p_2^{(2)}(r), \dots, p_r^{(2)}(r), \dots),$$

то можно утверждать, что вектор $P = (p_0, p_1, \dots, p_k)$ является решением задачи тогда и только тогда, когда

$$P = \sum_{r=2}^k (\alpha_r P^{(1)}(r) + \beta_r P^{(2)}(r)),$$

где $\alpha_r, \beta_r \geq 0, \sum_{r=2}^k (\alpha_r + \beta_r) = 1$.

Из табл. 2 видно, что число точек в плане Коно не больше числа точек плана Кифера. Легко видеть, что среди всех множеств вида $\mathcal{E}_0 \cup \mathcal{E}_{r_2} \cup \mathcal{E}_{r_3}$ множество $\mathcal{E}_0 \cup \mathcal{E}_1 \cup \mathcal{E}_k$ имеет наименьшее число точек $2^k + k2^{k-1} + 1$. Однако при больших k и планы Коно, которые соответствуют такому выбору, имеют слишком большое число точек, превосходящее при $k \geq 4$ известную

к настоящему времени верхнюю границу минимального числа точек спектра D -оптимального плана:

$$H = (k + 1)(k^3 + 9k^2 - 10k + 48)/24.$$

Установлено, что при $k = 1, 2$ минимальное число точек спектра имеют планы Кифера — Коно, при $k = 3$ — планы Коно. В случае $k = 4, 5, 6$ также известны D -оптимальные планы, содержащие наименьшее возможное число точек спектра, но они

Т а б л и ц а 2

k	Число параметров	Верхняя граница H	Число точек	
			план Кифера	план Коно
1	3	4	3	3
2	6	9	9	9
3	10	21	26	21
4	15	45	72	49
5	21	87	192	113
6	28	154	—	257
7	36	254	—	577

принадлежат более широкому классу, чем Ξ_0 , и строятся с использованием дробных реплик от полных факторных экспериментов.

3. Полиномиальная регрессия на k -мерном шаре. Пусть $X = \{x = (x^{(1)}, \dots, x^{(k)})^T \mid \sum_{i=1}^k [x^{(i)}]^2 \leq 1\}$, $f^T(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$ — вектор-строка, образованная заномерованными в некотором порядке всевозможными однечленами степени не выше d от $x^{(1)}, \dots, x^{(k)}$, $m = C_{k+d}^d$. Будем считать, что $\lambda(x) \equiv 1$. Укажем основные свойства D -оптимальной меры для рассматриваемой задачи.

Теорема 6. 1) В случае полиномиальной регрессии степени d на k -мерном шаре существуют величины $\lambda_1^* < \lambda_2^* < \dots < \lambda_\nu^* < \lambda_{\nu+1}^* = 1$, где ν — наибольшее целое, меньшее или равное $d/2$; $\lambda_1^* = 0$, если d — четное и $\lambda_1^* > 0$, если d — нечетное; а также такие положительные величины $\gamma_1^*, \dots, \gamma_{\nu+1}^*$ $\left(\sum_{j=1}^{\nu+1} \gamma_j^* = 1 \right)$, что план ξ^* D -оптимален в том и только в том случае, если выполняются условия:

$$a) \xi^* \left(S \sqrt{\frac{1}{\lambda_j^*}} \right) = \gamma_j^*, \quad 1 \leq j \leq \nu + 1,$$

где S_0 — k -мерная сфера радиуса ρ ;

б) ξ^* — ротатабельный план, т. е. $d(\bar{x}, \xi^*) = d(\rho^2, \xi^*)$ зависит только от $\rho^2 = \sum_{i=1}^h (x^{(i)})^2$.

2) Существуют планы, которые удовлетворяют этим условиям и сосредоточены самое большее в C_{k+2d}^h точках.

3) Величины γ_j^* и λ_j^* могут быть получены как единственное решение следующей системы уравнений:

$$d(r; \gamma, \lambda) \Big|_{r=\lambda_j} = m, \quad j = 1, \dots, v+1;$$

$$\frac{\partial}{\partial r} d(r; \gamma, \lambda) \Big|_{r=\lambda_j} = 0;$$

$j = 1, \dots, v$, если d — нечетное; $j = 2, \dots, v$, если d — четное;

$$0 \leq \lambda_j \leq 1, \quad \lambda_1 = 0, \quad \lambda_{v+1} = 1; \quad \gamma_j > 0, \quad \sum_{j=1}^{v+1} \gamma_j = 1,$$

где $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_{v+1})^T$, $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_{v+1})^T$, $d(r; \gamma, \lambda) = d(\rho^2, \xi)$, γ и λ соответствуют плану ξ .

Хотя для рассматриваемой задачи доказано существование D -оптимальных планов, сосредоточенных не более чем в C_{k+2d}^h точках, пока не предложен общий алгоритм нахождения D -оптимальных планов с конечными спектрами аналитическими методами (значения γ_j и λ_j для различных k и d можно получить численно). Интерес представляет не только аналитическое решение этой задачи, но и синтез D -оптимальных планов, сосредоточенных в наименьшем числе точек. В настоящее время подробно исследованы случаи регрессии первого и второго порядков.

Пусть $d = 1$. Как следует из теоремы 6, план ξ^* , точки которого совпадают с вершинами любого правильного вписанного в сферу S_1 многогранника, а веса одинаковы и равны n^{-1} ($n \geq k+1$ — число вершин этого многогранника), будет D -оптимальным, причем $M(\xi^*) = I_{k+1}$.

Пусть $d = 2$. Из теоремы 6 вытекает, что в данном случае D -оптимальный план приписывает меру $\xi^*(0) = 2/[(k+1)(k+2)]$ центру шара и меру $\xi^*(S_1) = 1 - \xi^*(0)$ поверхности единичной сферы.

Используя найденную D -оптимальную меру, можно построить D -оптимальный план, сосредоточенный в конечном числе точек. Например, D -оптимальным при $d = 2$ является план, определяемый следующим образом. На поверхности сферы S_1 выберем точки пересечения сферы с осями координат $(0, \dots, 0, \pm 1, 0, \dots, 0)$, приписав каждой точке этого типа вес $d = (k+3)/[(k+1)(k+2)^2]$, а также вершины вписанного гиперкуба $(\pm 1/\sqrt{k}, \dots, \pm 1/\sqrt{k})$, каждую с весом $\beta = (k+3)k^2/[2^k(k+1)(k+2)^2]$, и добавим к этим точкам центр шара с весом $2/[(k+1)(k+2)]$. Число точек построенного таким способом D -оптимального плана равно $2^k + 2k + 1$ и при $k < 10$ это меньше,

чем C_{k+4}^4 — верхняя граница для минимального числа точек спектра D -оптимального плана в рассматриваемом случае. Отсюда, конечно, не следует, что число точек не может быть уменьшено. Например, для $k=2$ существует D -оптимальный план, сосредоточенный в минимально возможном числе точек $n = C_4^2 = 6$, равном числу оцениваемых параметров. Интересен в этой связи такой результат: если для случая полиномиальной регрессии второго порядка в произвольном множестве $X \subset \mathbb{R}^k$ существует D -оптимальный план, сосредоточенный в $n = m$ точках, то все точки его спектра, за исключением, быть может, одной, лежат на границе X .

4. Полиномиальная регрессия на k -мерном симплексе. При изучении, например, свойств смеси, которые определяются только концентрациями составляющих смесь веществ, множество планирования X представляет собой правильный симплекс в k -мерном пространстве с $(k+1)$ -й вершиной:

$$\sum_{i=0}^k x^{(i)} = 1, \quad x^{(i)} \geq 0, \quad i = 0, \dots, k,$$

где $x^{(i)}$ — относительное содержание i -го компонента смеси. В химии и металлургии такие ограничения накладываются на компоненты при построении диаграмм «состав — свойство». Заметим, что $x^{(i)}$ ($i = 0, \dots, k$) можно рассматривать как барицентрические координаты точек k -мерного симплекса X относительно $k+1$ его вершин $A_0 = (1, 0, \dots, 0)$, $A_1 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, ..., $A_k = (0, 0, \dots, 1)$, т. е. их декартовы координаты в базисе векторов OA_0, OA_1, \dots, OA_k , где точка O — начало координат — не лежит в k -мерном подпространстве, содержащем X .

Поскольку переменные $x^{(i)}$ связаны соотношением $\sum_{i=0}^k x^{(i)} = 1$, то соответствующая информационная матрица вырождена, и нельзя оценить все (C_{k+d+1}^d) параметры полиномиальной модели порядка d от $k+1$ переменных. Однако, учитывая связь между переменными, мы имеем дело с многочленом степени d от k переменных, и число неизвестных коэффициентов составляет C_{k+d}^d . Если желательно иметь зависимость свойств от $k+1$ переменных, то можно перейти к так называемым *приведенным моделям Шеффе*. Приведенные полиномы Шеффе степени d от $k+1$ переменных

$$\eta(x, \theta) = \sum_{0 \leq i \leq k} \theta_i x^{(i)} + \sum_{t=2}^d \left\{ \sum_{0 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_t \leq k} \theta_{i_1 i_2 \dots i_t}^{(t)} x^{(i_1)} x^{(i_2)} \dots x^{(i_t)} (x^{(i_1)} - x^{(i_2)})^{t-2} \right\} + \sum_{t=3}^d \left\{ \sum_{0 \leq i_1 < \dots < i_t \leq k} \theta_{i_1 i_2 \dots i_t}^{v_1 \dots v_t} (x^{(i_1)})^{v_1} \times \dots \times (x^{(i_t)})^{v_t} \right\},$$

где $v_1 + \dots + v_t = d$, получаются из обычных полиномов степени d

от $k+1$ переменных с C_{k+d+1}^d коэффициентами введем соотношение $\sum_{i=0}^k x^{(i)} = 1$ и содержат C_{k+d}^d коэффициентов. Так, например, приведенные полиномиальные модели первого, второго и третьего порядков запишутся в виде

$$\begin{aligned}\eta_1(x, \theta) &= \sum_{i=0}^k \theta_i x^{(i)}, \\ \eta_2(x, \theta) &= \sum_{i=0}^k \theta_i x^{(i)} + \sum_{0 \leq i < l \leq k} \theta_{il} x^{(i)} x^{(l)}, \\ \eta_3(x, \theta) &= \sum_{i=0}^k \theta_i x^{(i)} + \sum_{0 \leq i < l \leq k} \theta_{il} x^{(i)} x^{(l)} + \\ &+ \sum_{0 \leq i < l < k} \bar{\theta}_{il} x^{(i)} x^{(l)} (x^{(i)} - x^{(l)}) + \sum_{0 \leq i < l < j \leq k} \theta_{ilj} x^{(i)} x^{(l)} x^{(j)}.\end{aligned}$$

Минимальное число точек плана для определения коэффициентов в приведенной полиномиальной модели Шеффе составляет C_{k+d}^d . Для оценки этих коэффициентов предложены различные по конструкции планы, наиболее известные из которых — симплекс-решетчатые и симплекс-центроидные.

Спектр насыщенного симплекс-решетчатого плана на k -мерном симплексе сосредоточен в узлах $\{k, d\}$ — симплексной решетки и определяется как множество точек

$$\begin{aligned}x_j &= (x_j^{(0)}, x_j^{(1)}, \dots, x_j^{(k)})^T, \quad j = 1, \dots, n, \quad n = C_{k+d}^d, \\ x_j^{(i)} &\in \{0, 1/d, 2/d, \dots, 1\}, \quad \sum_{i=0}^k x_j^{(i)} = 1, \quad j = 1, \dots, C_{k+d}^d.\end{aligned}$$

В симплекс-решетчатых планах (например, первого и второго порядков) может оказаться, что все точки располагаются на границах. При этом отсутствуют эксперименты, в которых участвуют все компоненты смеси.

Симплекс-центроидный план содержит точки $(1, 0, \dots, 0)$, $(1/2, 1/2, 0, \dots, 0)$, \dots , $(1/(k+1), 1/(k+1), \dots, 1/(k+1))$, а также все точки, которые можно получить перестановкой их координат. Следовательно, в состав симплекс-центроидного плана входят $C_{k+1}^1 = k+1$ вершин симплекса, C_{k+1}^2 середин его ребер, C_{k+1}^3 центров двумерных граней и т. д. и, наконец, $C_{k+1}^{k+1} = 1$ — центр грани размерности k — центроид симплекса. Таким образом, общее число точек симплекс-центроидного плана составляет $2^{k+1} - 1$. В отличие от симплекс-решетчатых планов, где для фиксированного k существует целое семейство $\{k, d\}$ решеток при $d = 1, 2, \dots$, спектр симплекс-центроидного плана

единствен. Для полиномиальной модели специального вида

$$\tilde{\eta}(x, \theta) = \sum_{i=0}^k \theta_i x^{(i)} + \sum_{0 \leq i < l \leq k} \theta_{il} x^{(i)} x^{(l)} + \\ + \sum_{0 \leq i < l < t \leq k} \theta_{ilt} x^{(i)} x^{(l)} x^{(t)} + \dots + \theta_{01\dots k} x^{(0)} x^{(1)} \times \dots \times x^{(k)}$$

симплекс-центроидный план является насыщенным.

Если всем точкам спектров планов присписать равные веса, то $\{k, 1\}$ — симплекс-решетчатый план — D -оптимален для приведенного полинома первого порядка; $\{k, 2\}$ — симплекс-решетчатый план — D -оптимален для приведенного полинома второго порядка, а симплекс-центроидный план D -оптимален для модели $\tilde{\eta}(x, \theta)$ при любом k .

Однако, например, если $d = 3$ и $k = 2$, то симплекс-решетчатые и симплекс-центроидные планы уже не обладают свойствами D -оптимальности. В этом случае единственный D -оптимальный план имеет другую геометрическую структуру: он присписывает меру $1/10$ каждой из трех вершин симплекса $(1, 0, 0)$; $(0, 1, 0)$ и $(0, 0, 1)$, центроиду симплекса $(1/3, 1/3, 1/3)$ и шести точкам, координаты которых образованы из перестановок трех чисел $0, (5 - \sqrt{5})/10, (5 + \sqrt{5})/10$.

Литература к § 2: [21, 33*, 71*, 74].

§ 3. Оптимальные планы для оценки одного параметра

Пусть исследователя интересует один из m параметров, скажем θ_1 , и требуется выбрать план ξ^* , которому соответствует минимум дисперсии НЛН-оценки параметра θ_1 в регрессионной зависимости:

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 f_1(x) + \sum_{i=2}^m \theta_i f_i(x).$$

В этом частном случае критерия D_* -оптимальности, которому отвечает $s = 1$, могут быть указаны более сильные результаты, чем в общем случае оценивания $s < m$ параметров (см. гл. 2).

Задача непосредственной минимизации дисперсии

$$D(\hat{\theta}_1) = N^{-1} t^T M^{-1}(\xi) t,$$

где $t^T = (1, 0, \dots, 0)$, $\lambda(x) \equiv 1$, может быть заменена эквивалентной путем перехода от исходного базиса $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$

к базису $f_1^*(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$, где $f_1^*(x) = f_1(x) - \sum_{i=2}^m h_i f_i(x)$.

Коэффициенты h_i ($i = 2, \dots, m$) определяются единственным образом из условия ортогональности относительно меры ξ функции $f_1^*(x)$ ко всем функциям $f_l(x)$ ($l = 2, \dots, m$):

$$\int_X f_1^*(x) f_l(x) \xi(dx) = 0, \quad l = 2, \dots, m.$$

При таком преобразовании

$$\theta_1 = \theta_1^*, \quad D(\hat{\theta}_1) = D(\hat{\theta}_1^*) = N^{-1} [M_{11}^*(\xi)]^{-1},$$

где $M_{11}^*(\xi) = \int_X [f_1^*(x)]^2 \xi(dx)$ — соответствующий элемент преобразованной информационной матрицы, а исходная задача сводится к задаче

$$\xi^* = \text{Arg max}_{\xi \in \Xi} \int_X \left[f_1(x) - \sum_{i=2}^m h_i f_i(x) \right]^2 \xi(dx),$$

где h_i ($i = 2, \dots, m$) определяются условиями ортогональности. Отказ от условий ортогональности приводит к эквивалентной формулировке задачи:

$$\xi^* = \text{Arg max}_{\xi \in \Xi} \cdot \min_{c_2, \dots, c_m} \int_X \left[f_1(x) - \sum_{i=2}^m C_i f_i(x) \right]^2 \xi(dx),$$

для решения которой может быть применен аппарат классической теории наилучших равномерных приближений.

Теорема 7. Пусть $C^* = (C_2^*, \dots, C_m^*)$ — чебышевский вектор элемента наилучшего приближения функции $f_1(x)$ по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=2}^m$ и

$$m(C^*) = \max_{x \in X} \left| f_1(x) - \sum_{i=2}^m C_i^* f_i(x) \right|,$$

$$B(C^*) = \left\{ x \in X \mid \left| f_1(x) - \sum_{i=2}^m C_i^* f_i(x) \right| = m(C^*) \right\}.$$

Если $\xi^*(B(C^*)) = 1$ и

$$\int_X \left[f_1(x) - \sum_{i=2}^m C_i^* f_i(x) \right] f_l(x) \xi^*(dx) = 0, \quad l = 2, \dots, m,$$

то ξ^* — оптимальный план для оценки параметра θ_1 .

Рассматриваемая задача допускает и другую трактовку — в терминах задачи нахождения оптимальной стратегии в следующей игре двух лиц с нулевой суммой. Первый игрок (статистик) выбирает точки плана в соответствии с вероятностной мерой $\xi \in \Xi$. Множество непрерывных планов Ξ есть пространство смешанных стратегий первого игрока. Второй игрок (природа) выбирает вектор коэффициентов $C = (C_2, \dots, C_m)^T$. Пространством чистых стратегий второго игрока служит \mathbb{R}^{m-1} . Роль функции выигрыша играет функция

$$K(x, C) = \left[f_1(x) - \sum_{i=2}^m C_i f_i(x) \right]^2,$$

а средний выигрыш характеризуется функцией

$$Q(\xi, C) = \int_X K(x, C) \xi(dx).$$

Задача игры состоит в поиске оптимальной стратегии как для первого игрока, который максимизирует свой выигрыш, так и для второго игрока, который минимизирует свой проигрыш.

Теорема 8. 1) Существует оптимальная стратегия (ξ^*, C^*) как для первого игрока, так и для второго, представляющая собой седловую точку: $Q(\xi, C^*) \leq Q(\xi^*, C^*) \leq Q(\xi^*, C)$, где $\xi \in \Xi$, $C \in \mathbf{R}^{m-1}$.

2) Если (ξ^*, C^*) — оптимальная стратегия в определенной выше игре, то ξ^* — оптимальный план для оценки параметра θ_1 , C^* — чебышевский вектор.

3) Если ξ^* — оптимальный план, а C^* — чебышевский вектор, то выполняются условия теоремы 7.

4) Существует оптимальный план ξ^* , сосредоточенный не более чем в $m - r$ точках, где r — размерность множества векторов C^* .

Из приведенных результатов вытекает следующая последовательность действий при поиске оптимальных планов для оценки одного параметра:

1) решаем задачу Чебышева для аппроксимации функции $f_1(x)$ обобщенным полиномом по системе $\{f_i(x)\}_{i=2}^m$ и определяем вектор C^* ;

2) находим множество $B(C^*)$, соответствующее этому решению;

3) полагаем $\xi^*(B(C^*)) = 1$;

4) находим веса наблюдений $p_j^* = \xi^*(x_j)$ в точках плана $x_j \in B(C^*)$ из условий ортогональности, указанных теоремой 7 и условия нормировки меры ξ^* , решая систему линейных алгебраических уравнений.

При некоторых дополнительных предположениях можно гарантировать единственность оптимального плана: если X — замкнутый вещественный интервал, функции $f_i(x)$ ($i = 2, \dots, m$) образуют систему Чебышева на X , и $B(C^*)$ содержит ровно m точек, то оптимальный план для оценки параметра θ_1 единствен.

В общем случае свойство единственности оптимального плана не имеет места. Действительно, если $X = [-1, 1]$, $m = 2$, $f_1(x) = 1 + \sin 10x$, $f_2(x) \equiv 1$, то любой план ξ , который приписывает меру $1/2$ каждому из множеств, где $\sin 10x = 1, -1$, удовлетворяет условиям теоремы 7 и, следовательно, является оптимальным. Для полиномиальной регрессии на отрезке имеет место следующая теорема.

Теорема 9. Оптимальный план ξ_1^* для оценивания параметра θ_1 в случае

$$\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^m \theta_i x^{i-1}$$

§ 4. Линейно оптимальные планы.

Функционал L , заданный на множестве ковариационных матриц и удовлетворяющий условиям

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

где $A, B \geq 0$, c — положительная константа, будем называть *линейным критерием оптимальности*, а соответствующие планы — *L-оптимальными*. В данном параграфе рассмотрение ограничивается случаем невырожденных *L-оптимальных планов* ($|M(\xi^*)| \neq 0$).

Линейные функционалы на множестве невырожденных информационных матриц являются выпуклыми, а если $L(A) > 0$ для всех $A > 0$, то $L[D(\xi)] = L[M^{-1}(\xi)]$ — строго выпуклый функционал. Это позволяет к линейным критериям применить общие результаты теории выпуклых критериев из гл. 2 (в частности, теоремы о необходимых и достаточных условиях оптимальности плана).

Для линейного функционала $L[D(\xi)] \geq 0$ на множестве положительно полуопределенных матриц $D(\xi)$ существует такая положительно полуопределенная матрица A , что $L[D(\xi)] = \text{tr} AD(\xi)$. Представители этого класса критериев встречались в § 5 гл. 2 и в предыдущем параграфе при минимизации дисперсии оценки заданного параметра θ_i : $ND\hat{\theta}_i = t^T D(\xi)t = \text{tr} AD(\xi)$, где $t = (0, \dots, \underbrace{0, 1, 0, \dots}_i, 0)^T$, $A = tt^T$. При некоторых дру-

гих способах задания матрицы A получаем частные случаи линейных критериев.

1. A-оптимальные планы. Случай $A = I_m$ соответствует критерию A-оптимальности, согласно которому требуется минимизировать след ковариационной матрицы $D(\xi)$ или, что эквивалентно, среднюю дисперсию оценок параметров $m^{-1} \sum_{i=1}^m D_{ii}(\xi)$. Этот критерий привлекает своей наглядностью, но с математической точки зрения он имеет существенный недостаток — отсутствие свойства инвариантности по отношению к линейным невырожденным преобразованиям системы базисных функций и зависимость от выбора масштаба.

Для аналитического построения A-оптимальных планов представляет интерес следующий простой результат.

План ξ^ является одновременно D- и A-оптимальным, если*

$$cD(\xi^*) = D^2(\xi^*),$$

где ξ^* — план, удовлетворяющий одному из критериев, c — константа. При этом $\text{tr} D(\xi^*) = ct$.

С учетом результатов, полученных для D-оптимального планирования, отсюда следует, что для линейной регрессии на k -мерном кубе и тригонометрической регрессии на интервале

$\{\alpha, \alpha + 2\pi\}$ по системе функций

$$\{f_i(x)\}_{i=0}^{2d} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = 0, \\ \sqrt{2} \sin 0,5(i+1)x, & \text{если } i \text{ — нечетное,} \\ \sqrt{2} \cos 0,5ix, & \text{если } i \text{ — четное,} \end{cases}$$

A -оптимальные планы совпадают с D -оптимальными (см. соответственно п. 2.1).

Аналитические методы построения A -оптимальных, как и других линейно оптимальных планов, менее развиты, чем D -оптимальных. Обычно здесь используется следующий прием. Из вида функции регрессии и множества планирования X в конкретной задаче, а также привлекая соображения симметрии и простоты конструкции плана, выделяется множество точек из X , которое принимается за спектр искомого оптимального плана. Сделанные предположения о структуре оптимального плана позволяют, как правило, значительно сократить число переменных в соответствующей экстремальной задаче и в некоторых случаях решить ее аналитически. Проверка полученного решения на оптимальность по отношению к исходной задаче осуществляется с помощью теоремы эквивалентности.

2. **Оптимальные планы для экстраполяции в точку.** Как отмечалось в гл. 2, план

$$\xi^* = \text{Arg inf}_{\xi \in Z} d(x_0, \xi)$$

называется *оптимальным для экстраполяции (интерполяции) в точку x_0* , где наблюдения либо нереализуемы, например, по техническим и организационным причинам, либо трудно осуществимы, например, из-за больших ошибок измерений.

Свойство инвариантности этого критерия к линейному невырожденному преобразованию функций $f_i(x)$ ($i = 1, \dots, m$) позволяет для насыщенных оптимальных планов получить явное выражение для весов наблюдений.

Теорема 10. Если оптимальный план ξ^* для экстраполяции в точку x_0 сосредоточен в $n = m$ точках $x_1^*, x_2^*, \dots, x_m^*$ из X , то

$$p_j^* = \frac{|\mathcal{L}_j(x_0)| \lambda^{-1/2}(x_j^*)}{\sum_{s=1}^m |\mathcal{L}_s(x_0)| \lambda^{-1/2}(x_s^*)}, \quad j = 1, \dots, m,$$

где $\mathcal{L}_j(x)$ — обобщенный интерполяционный полином Лагранжа по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ с узлами в точках x_1^*, \dots, x_m^* .

Наиболее законченные аналитические результаты к настоящему времени получены для случая одной переменной.

Теорема 11. Пусть система функций $\lambda^{1/2}(x)f_1(x), \dots, \lambda^{1/2}(x)f_m(x)$ — чебышевская на отрезке $[-1, 1]$. Тогда

существует такой обобщенный полином

$$u(x) = \sum_{i=1}^m a_i \lambda^{1/2}(x) f_i(x),$$

что:

1) $|u(x)| \leq 1, x \in [-1, 1];$

2) существует m точек $-1 \leq x_1^* < x_2^* < \dots < x_m^* \leq 1$, в которых

$$u(x_j^*) = (-1)^{m-j}, \quad j = 1, \dots, m.$$

Если план ξ^* сосредоточен в точках x_j^* с весами p_j^* ($j=1, \dots, m$), которые определены в теореме 10, то он минимизирует дисперсию оценки функции регрессии в заданной точке $x_0 \notin [-1, 1]$.

Отметим, что спектр оптимального плана не зависит от x_0 .

Как следствие из теоремы 11 получаем, что в случае полиномиальной регрессии на $X = [-1, 1]$ и $\lambda(x) \equiv 1$ оптимальный план для экстраполяции в точку x_0 ($|x_0| > 1$) сосредоточен в m точках Чебышева, т. е. точках максимума модуля многочлена Чебышева $T_{m-1}(x)$ первого рода:

$$x_j^* = -\cos[(j-1)\pi/(m-1)], \quad j = 1, \dots, m.$$

3. Q-оптимальные планы. План, оптимальный в смысле критерия $\int_Z w(x) d(x, \xi) dx$ (где $Z \subset \mathbf{R}^h$, вообще говоря, не совпадает с X , $w(x) \geq 0$ — весовая функция) минимизирует среднюю взвешенную дисперсию оценки функции регрессии по некоторому множеству Z и называется *Q-оптимальным*. Если функции $f_1(x), \dots, f_m(x)$ линейно независимы в Z , то *Q-критерий* строго выпуклый. Важным свойством *Q-критерия*, так же как *D-* и *G-* критериев, является инвариантность к любому линейному невырожденному преобразованию системы базисных функций.

Для аналитического построения *Q-оптимальных* планов можно воспользоваться связью этого критерия с другими критериями оптимальности.

План ξ^* является одновременно *Q-* и *A-оптимальным*, если функции $f_1(x), \dots, f_m(x)$ ортонормированы с весом $w(x)$ на Z ; *Q-* и *D-оптимальным*, если

$$D(\xi^*) \left[\int_Z w(x) f(x) f^T(x) dx \right] D(\xi^*) = cD(\xi^*),$$

где ξ^* — план, удовлетворяющий одному из критериев, c — константа (при этом $\int_Z w(x) d(x, \xi^*) dx = cm$).

Литература к § 4 [51, 93, 94, 144, 156].

§ 5. Асимптотически оптимальные планы

Для нахождения частных моделей регрессии конечной размерности можно описать асимптотическое поведение планов с увеличением размерности, а в тех случаях, когда такое поведение известно, использовать его в рамках того или иного, по существу непараметрического подхода для ослабления априорных сведений о модели регрессии. Ниже рассмотрены обе указанные возможности.

1. Одномерная полиномиальная регрессия. Пусть ξ_n^* есть D -оптимальный план для оценивания коэффициентов полинома степени n на отрезке $[-1, +1]$. Известно, что для каждой степени n этот план — единственный и планы, отвечающие разным значениям n , различны. Тем не менее с ростом n последовательность планов $\{\xi_n^*, n=1, 2, \dots\}$ слабо сходится к единственному плану ξ_0^* с плотностью $1/\pi(1-x^2)^{1/2}$. Это прямо следует из известных результатов об асимптотическом распределении нулей ортогональных полиномов. Факт указанной сходимости наводит на мысль использовать план ξ_0^* в ситуации, когда точная степень полинома неизвестна, чтобы затем путем проведения последовательных наблюдений установить точную степень полинома. В этой связи возникает вопрос, как ведут себя характеристики точности предельного плана ξ_0^* при его использовании для полинома точной степени n . Пусть $d_n(x, \xi) = f_n^T(x) M_n^{-1}(\xi) f_n(x)$ — дисперсия оценки полинома точной степени n в точке x по наблюдениям плана ξ , $f_n^T(x) = (1, x, \dots, x^n)$ — вектор базисных функций, $M_n(\xi) = \int_{-1}^{+1} f_n(x) f_n^T(x) \xi(dx)$ — информационная матрица для регрессии степени n и $d_n(\xi) = \max_{-1 < x < 1} d_n(x, \xi)$ — максимальное значение этой дисперсии на интервале наблюдения. Используя инвариантность величины $d_n(x, \xi)$ относительно выбора базиса из полиномов данной степени и перехода к ортонормированной мере ξ_0^* полиномам Чебышева I рода: $1, \sqrt{2} T_1(x), \dots, \sqrt{2} T_n(x), T_k(\cos \theta) = \cos kx$ ($k=1, \dots, n$), получим

$$d_n(x, \xi) = 1 + 2 \sum_{k=1}^n T_k^2(x) = n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} U_{2n}(x),$$

где $U_k(\cos \theta) = \sin(k+1)\theta / \sin \theta$ — полином Чебышева II рода от переменной $x = \cos \theta$. Отсюда $d_n(\xi_0^*) = 2n + 1$, что примерно вдвое больше оптимального значения $d_n(\xi_n^*) = n + 1$; при этом максимум дисперсии достигается только в концевых точках ± 1 основного интервала и длина интервалов, примыкающих к концам, на которых $d_n(x, \xi_0^*) > n + 1$, стремится к нулю с ростом n .

Определив G -эффективность плана ξ как $(n+1)/d_n(\xi)$, получаем для плана ξ_0^* величину $(n+1)/(2n+1)$ с предельным значением $1/2$. Более того, изменением меры ξ_0^* в достаточно малой окрестности конечных точек ± 1 можно добиться, чтобы для любого $\varepsilon > 0$ выполнялось условие почти G -эффективности:

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{n+1}{d_n(\xi_\varepsilon)} \geq 1 - \varepsilon.$$

Пусть теперь $D_n(\xi) = \det M_n(\xi)$; тогда

$$\frac{D_{n+1}(\xi_{n+1}^*)}{D_{n+1}(\xi_0^*)} = 2\sqrt[n]{ne^{\delta_n}},$$

где

$$\delta_n = \frac{1}{4} \left\{ \sum_{k=1}^n k^{-1} - \ln n \right\} - \sum_{k=2}^{\infty} (-1)^k \frac{\zeta_n(k)}{k(k+1)} \left(1 - \frac{1}{2^k} \right),$$

$$\zeta_n(k) = \sum_{l=1}^n l^{-k}, \quad \zeta(k) = \sum_{l=1}^{\infty} l^{-k}.$$

Так как при этом

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n = \delta = \frac{1}{2} - \frac{13}{12} \log 2 - 3\zeta'(-1) \simeq -0,00464602,$$

то практически можно считать, что отношение определителей равно величине $2\sqrt[n]{n}$.

Определив D -эффективность плана ξ_0^* величиной

$$E_n = \left(\frac{D_n(\xi_0^*)}{D_n(\xi_n^*)} \right)^{1/(n+1)},$$

получаем $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n = 1$. Вариационные аргументы показывают, что

ξ_0^* — единственная мера, абсолютно непрерывная относительно меры Лебега, с асимптотической D -эффективностью, равной 1.

2. Экстраполяция полиномов. Пусть $|x_0| > 1$ и план ξ_n минимизирует величину $d_n(x_0, \xi)$ среди всех планов, сосредоточенных на отрезке $[-1, +1]$. Тогда последовательность ξ_n при $n \rightarrow \infty$ слабо сходится к плану ξ_0 с плотностью

$$\frac{(x_0^2 - 1)^{1/2}}{\pi |x_0 - x| (1 - x^2)^{1/2}}$$

на отрезке $[-1, +1]$. Известно, что минимальная дисперсия полинома в точке экстраполяции равна

$$d_n(x_0, \xi_n) = T_n^2(x_0),$$

где $T_n(x)$ — полином Чебышева I рода. Для плана ξ_0 эта

величина есть.

$$d_n(x_0, \xi_0) = \frac{1}{(x_0^2 - 1)^{1/2}} [(x_0 + (x_0^2 - 1)^{1/2}) T_n(x_0) - T_n(x_0) T_{n-1}(x_0)].$$

Для фиксированной точки x_0 отношение $d_n(x_0, \xi_n)/d_n(x_0, \xi_0)$ при $n \rightarrow \infty$ стремится сверху к значению $1/2$.

3. Одномерная тригонометрическая регрессия и непараметрическое оценивание. Для тригонометрической регрессии на окружности (отрезке $[0, 2\pi]$), в отличие от полиномиальной регрессии на отрезке, существует универсальный план ξ_0 — равномерная мера на окружности, строго оптимальный для регрессии любого конечного порядка. Мера ξ_0 может рассматриваться как предел эквидистантных планов при сгущении точек на окружности. Пусть в каждой из $2n + 1$ равноотстоящих точек $x_{kn} = 2\pi k/(2n + 1)$ ($k = 0, 1, \dots, 2n$) производится одинаковое число r -наблюдений. Соответствующий план называется *эквидистантным* (N, n) -планом ($N = r(2n + 1)$). Эквидистантность гарантирует оптимальность (N, n) -плана для всех тригонометрических полиномов степени не выше n . Поэтому на основе таких планов с помощью тригонометрической интерполяции могут быть построены асимптотически оптимальные непараметрические оценки функции регрессии, скорость сходимости которых не улучшается по порядку величины.

Пусть \bar{Y}_{kn} — средние арифметические наблюдений в точках x_{kn} , указанных выше, и

$$D_k(t) = \frac{\sin(k + 1/2)t}{\sin t/2}$$

есть ядро Дирихле. Определим оценку функции регрессии $f(x)$ по наблюдениям в точках x_{kn} (предполагая n четным):

$$\tilde{f}_{N,n}(x) = \frac{2}{n} \sum_{m=n/2+1}^n \hat{f}_{mn}(x),$$

где

$$\hat{f}_{mn}(x) = \frac{1}{2n + 1} \sum_{k=0}^{2n} \bar{Y}_{kn} D_m(x - x_{kn}).$$

Оценка $\tilde{f}_{N,n}(x)$ оказывается смещенной, если функция регрессии $f(x)$ не является тригонометрическим полиномом степени $n/2$.

Пусть $\mathcal{E}_n(f)$ есть величина наилучшего приближения функции $f(x)$ в метрике $L_\infty(0, 2\pi)$ тригонометрическими полиномами степени n ; тогда норма смещения ограничена неравенством

$$\|E\tilde{f}_{N,n} - f\|_\infty \leq \text{const } \mathcal{E}_{n/2}(f).$$

Предположим теперь, что ошибки наблюдений в точках x_{kn} — независимые гауссовские случайные величины с одинаковой дисперсией и функция регрессии f принадлежит некоторому множеству $\Sigma \subset L_\infty(0, 2\pi)$,

Обозначим

$$\mathcal{E}_n(\Sigma) = \sup_{f \in \Sigma} \mathcal{E}_n(f)$$

и выберем число n в эквидистантном (N, n) -плане так, чтобы

$$\frac{n \ln n}{N} \asymp (\mathcal{E}_{n/2}(\Sigma))^2$$

($a(n) \asymp b(n)$) означает, что $0 < c_1 \leq a(n)/b(n) \leq c_2 < \infty$.

Тогда для любой неотрицательной функции потерь $l(x)$, $x \geq 0$, удовлетворяющей при достаточно малом $\mu > 0$ условию

$$l(x) \leq A \exp(\mu x^2),$$

справедливо соотношение

$$\sup_N \sup_{f \in \Sigma} El(\|\tilde{f}_{N,n} - f\|_\infty / \mathcal{E}_{n/2}(\Sigma)) < \infty.$$

Если $\Sigma(L, \beta)$ — множество периодических функций с непрерывными производными до порядка r , так что

$$\|f^{(r)}(x+h) - f^{(r)}(x)\|_\infty \leq L|h|^\alpha, \quad \beta = r + \alpha, \quad 0 < \alpha \leq 1,$$

то на основании известных результатов теории приближений получается

$$\mathcal{E}_n(\Sigma(L, \beta)) \asymp n^{-\beta}.$$

Отсюда число точек в эквидистантном (N, n) -плане есть $n \asymp (N/\ln N)^{1/(2\beta+1)}$ и риск ограничен сверху соотношением

$$\sup_N \sup_{f \in \Sigma(L, \beta)} El\left(\|\tilde{f}_{N,n} - f\|_\infty \left(\frac{N}{\ln N}\right)^{\beta/(2\beta+1)}\right) < \infty.$$

Более того, можно показать, что для любой оценки \hat{f}_N , построенной по N наблюдениям в интервале $(0, 2\pi)$, справедлива оценка риска снизу:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sup_{f \in \Sigma(L, \beta)} El\left(\|\hat{f}_N - f\|_\infty \left(\frac{N}{\ln N}\right)^{\beta/(2\beta+1)}\right) \geq \frac{1}{2} l(c_1),$$

где $c_1 > 0$ — некоторая константа.

Итак, при $N \rightarrow \infty$ порядок скорости сходимости в норме $\|\cdot\|_\infty$; обеспечиваемой эквидистантным (N, n) -планом с указанным выше числом узлов и оценкой $\tilde{f}_{N,n}(x)$, не может быть улучшен равномерно в классе $\Sigma(L, \beta)$ ни при каком другом плане эксперимента и любом способе оценивания, использующем N наблюдений.

З а м е ч а н и е. Рассматривая четные периодические функции $f(-x) = f(x)$ с заменой переменной $z = \cos x$, $z \in [-1, +1]$, и учитывая результаты п. 1, получаем с помощью конструкции настоящего пункта полиномиальную оценку непараметрической регрессии, асимптотически оптимальную в классе Σ . Легко видеть при этом, что эквидистантный (N, n) -план оказывается дискретной аппроксимацией предельного плана ξ_0^* с плотностью $1/\pi(1-z^2)^{1/2}$ из п. 1.

4. Непараметрическое оценивание и асимптотически оптимальное планирование эксперимента. Рассмотрим схему регрессионного эксперимента, в которой число измерений N последовательно увеличивается (или фиксировано, но достаточно велико), а функция регрессии η характеризуется заданием свойств ее гладкости. Как и ранее, $\eta(x, \hat{\theta})$ будет означать оценку для η , причем полезно полагать $\eta(x, \hat{\theta}) = \eta_N(x, \hat{\theta})$, подчеркивая зависимость оценки от числа измерений. Ограничимся случаем, когда значения $y(x_i)$, полученные в результате измерений в точках x_i плана, входят в оценку $\eta_N(x, \hat{\theta})$ линейно. Пусть $\eta_N(x, \theta) = E\eta_N(x, \hat{\theta})$. Используя разложение для $\eta(x) - \eta(x, \hat{\theta})$ (см. Введение), имеем

$$J = E \|\eta(x) - \eta(x, \hat{\theta})\|_{\mathcal{F}} \leq \|\eta(x) - \eta_N(x, \theta)\|_{\mathcal{F}} + E \|\eta_N(x, \theta) - \eta_N(x, \hat{\theta})\|_{\mathcal{F}},$$

где \mathcal{F} — бесконечномерный класс функций, которому принадлежит η . Если η — достаточно гладкая функция и ошибки измерений имеют второй момент, то легко указать такую непараметрическую оценку $\eta_N(x, \hat{\theta})$, для которой оба слагаемых в правой части указанного выше неравенства стремятся к нулю с ростом N . Наиболее естественный подход к задаче оценивания η состоит в следующем (см. Введение и п. 9.2.3): в \mathcal{F} выбирается n -мерное линейное подпространство $L_n \subset \mathcal{F}$, $\eta(x) \in \mathcal{F}$ аппроксимируется некоторым элементом $\eta(x, \theta) \in L_n$, параметры θ которого несмещенно оцениваются оценкой $\hat{\theta}$ по результатам экспериментов в точках выбранного плана.

В качестве X далее рассматривается единичный k -мерный гиперкуб $D_{(k)} = [0; 1] \times \dots \times [0; 1]$, в качестве метода оценивания — метод наименьших квадратов, а в качестве метрики на \mathcal{F} — квадратичная метрика; при этом μ_k — мера Лебега на X

$$E \int_X (\eta(x) - \eta(x, \hat{\theta}))^2 \mu_k(dx) = \int_X (\eta(x) - \eta(x, \theta))^2 \mu_k(dx) + E \int_X (\eta(x, \theta) - \eta(x, \hat{\theta}))^2 \mu_k(dx), \quad (1)$$

т. е. неравенство для J является равенством.

Рассматриваемая ниже задача состоит в таком* выборе дискретного плана $\xi_N = \{x_1, \dots, x_N\}$ и размерности $n = n(N)$ естественным образом выбираемого подпространства L_n определяемого ниже класса функций $\mathcal{F} = E_k^\alpha$, чтобы скорость убывания супремума по всем $\eta \in \mathcal{F}$ погрешности (1) была наибольшей при $N \rightarrow \infty$.

Класс функций E_k^α состоит из всех непрерывных функций $f: X = D_{(k)} \rightarrow \mathbf{R}^1$, имеющих период, равный 1, по каждой из k переменных и таких, что

$$C(f, \underline{m}) \leq K \|\underline{m}\|^{-\alpha},$$

где $\alpha > 1$, $K < \infty$ — некоторая константа, $\underline{m} = (m_1, \dots, m_k)^T$,

$C(f, m) =$

$$= \int_0^1 \int_0^1 f(x(1), \dots, x(k)) \exp \left\{ -2\pi i \sum_{j=1}^k m_j x(j) \right\} dx(1) \dots dx(k)$$

есть коэффициенты Фурье функции f .

$$\bar{m} = \begin{cases} 1, & \text{если } m = 0, \\ m, & \text{если } m \neq 0, \end{cases}$$

$$\|\underline{m}\| = \bar{m}_1 \cdot \dots \cdot \bar{m}_k.$$

В частности, при натуральных α все те функции из класса H_k^α , определяемого как множество функций, имеющих в $X = D_{(k)}$ непрерывные производные вида

$$\frac{\partial^n f}{\partial x_1^{n_1} \dots \partial x_k^{n_k}}, \quad 0 \leq n = \sum_{j=1}^k n_j \leq \alpha k, \quad 0 \leq n_j \leq \alpha,$$

принадлежат E_k^α , если эти функции заданы на \mathbf{R}^k , имеют по каждой координате период, равный единице, и указанные производные непрерывны во всем \mathbf{R}^k .

Пусть N — натуральное, $a_i = a_i(N)$ ($i = 1, \dots, k$) — натуральные взаимно простые с N числа,

$$\delta_N(m) = \begin{cases} 1, & \text{если } m \equiv 0 \pmod{N}, \\ 0, & \text{если } m \not\equiv 0 \pmod{N}. \end{cases}$$

Если существуют такие константы $\beta = \beta(k)$ и $C_0 = C_0(k)$, что для некоторой бесконечной последовательности значений N выполняется неравенство

$$\sum_{m_1, \dots, m_k = -(N-1)}^{N-1} \frac{\delta_N(a_1 m_1 + \dots + a_k m_k)}{\|\underline{m}\|} \leq \frac{C_0 \ln^\beta N}{N},$$

то числа a_1, \dots, a_k называются *оптимальными коэффициентами*, а число β — *индексом*.

Если N — простое, то существуют оптимальные коэффициенты с индексом $\beta = \beta(k) = k$.

Сетки Ξ_N , состоящие из точек

$$x_i = \left(\left\{ \frac{a_1 i}{N} \right\}, \dots, \left\{ \frac{a_k i}{N} \right\} \right), \quad i = 1, \dots, N,$$

где a_1, \dots, a_k — оптимальные коэффициенты, называются *параллелепипедными сетками* (здесь $\{a\}$ — дробная часть числа a).

Конечномерное подпространство $L_n = L(N_1) \subset E_k^\alpha$ определяется как линейная оболочка тригонометрических одночленов с

индексами $\underline{m} = (m_1, \dots, m_k)^T$: $\|\underline{m}\| \leq N_1$,

$$L_n = L(N_1) = \left[\sum_{\|\underline{m}\| \leq N_1} \theta_{\underline{m}} \exp \left\{ 2\pi i \left(\sum_{i=1}^k m_i x(i) \right) \right\} \right].$$

D -оптимальный план по оцениванию параметров многомерной тригонометрической регрессии

$$\eta(x, \theta, N_1) = \sum_{0 \leq n \leq N_1} \theta_n \exp \left\{ 2\pi i \sum_{i=1}^k n_i x(i) \right\}$$

имеет единичную нормированную информационную матрицу, второй член в правой части (1) для D -оптимального плана минимален и равен

$$\frac{n}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\|\underline{m}\| \leq N_1} 1 \underset{\sim}{\asymp} \frac{N_1 \ln^k N_1}{N}, \quad N_1 \rightarrow \infty, \quad N \rightarrow \infty.$$

При $N > 2(N_1 - 1)(a_1 + \dots + a_k)$ любой непрерывный план, сосредоточенный в точках $\Xi_N = \{x_1, \dots, x_N\}$ параллелепипедальной сетки с равными весами, является D -оптимальным для оценивания параметров регрессии $\eta(x, \theta, N_1)$.

Поскольку в качестве метода оценивания параметров θ рассматривается метод наименьших квадратов, $\eta(x, \theta)$ в правой части (1) имеет вид

$$\eta(x, \theta) = E\hat{\eta}(x, \hat{\theta}) = \mathcal{H}\eta(x) = \int_{\mathcal{X}} K(x, z) \eta(z) \nu(dz),$$

где $\nu(dz)$ — нормированный план проведения экспериментов,

$$K(x, z) = \begin{vmatrix} 0 & f_1(x) & f_n(x) \\ f_1(z) & (f_1, f_1) & (f_1, f_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ f_n(z) & (f_n, f_1) & (f_n, f_n) \end{vmatrix} / \det M,$$

f_1, \dots, f_n — базисные функции подпространства L_n ,

$$(f_i, f_j) = \int_{\mathcal{X}} f_i(x) f_j(x) \nu(dx), \quad M = \|(f_i, f_j)\|_{i,j=1}^n.$$

Оператор $\mathcal{H} = \mathcal{H}_n$ с ядром K является непрерывным ограниченным линейным оператором из $L_2(x, \nu)$ в $L_2(x, \nu)$, обладающим следующими свойствами:

$$\mathcal{H}f_i = f_i, \quad i = 1, \dots, n;$$

$$\sup_{f \in L_2(x, \nu_n)} \int_{\mathcal{X}} |\mathcal{H}nf(x) - f(x)|^2 \nu_n(dx) \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Если информационная матрица M диагональна при всех n и базисные функции ортогональны по мере μ_k (что имеет место, в частности, для многомерной тригонометрической регрессии), то, кроме того, для любой $f \in L_2(x, \mu_k)$ систематическая ошибка (т. е.

первое слагаемое в правой части (1)) монотонно не возрастает с ростом n (в рассматриваемом случае — с ростом N_1).

Таким образом, поскольку для любой $\eta \in L^2(x, \mu_k)$ как случайная погрешность (второе слагаемое в правой части (1)), так и систематическая с ростом числа точек N не возрастают, можно, не ограничивая общности считать, что число измерений равно числу точек плана.

Отметим (см. п. 3), что в одномерном случае (т. е. при $k = 1$) при $N \geq 2N_1 + 1$ систематическая и случайная погрешности остаются постоянными при возрастании N , и поэтому при $r(2N_1 + 1)$ вместо того, чтобы проводить эксперименты по одному разу в $N = r_0 \tilde{N}$ ($r_0 \leq r$) точках, можно проводить по r экспериментов в \tilde{N} точках, т. е. веса в плане выбирать равными r_0/N .

Параллелепипедальные сетки являются хорошими сетками и с точки зрения минимизации систематической ошибки в E_h^α .

Выбирая $N_1 = N^{1/(2\alpha)}$, проводя эксперименты в точках параллелепипедальной сетки Ξ_N и оценивая затем параметры многомерной тригонометрической регрессии $\eta(x, \theta, N_1)$, мы получаем способ оценивания функции регрессии $\eta \in E_h^\alpha$, при применении которого супремум по всем $\eta \in E_h^\alpha$ суммарной погрешности (1) убывает при возрастании N со скоростью порядка

$$\frac{\ln^{k-1} N}{N^{1-1/(2\alpha)}}, \quad N \rightarrow \infty,$$

и эта скорость убывания является максимальной для любого выбора $N_1 = N_1(N)$ и последовательности планов проведения N экспериментов.

Литература к § 5: [36, 48, 154],

ГЛАВА 4

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ И ПОСТРОЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ПЛАНОВ

Если задача оптимального планирования экспериментов однокритериальна, то она состоит в нахождении оптимальной вероятностной меры (плана), заданной на некоторой σ -алгебре. Аналитически оптимальные планы могут быть построены лишь в некоторых частных случаях. Обычно их строят приближенно, используя численные методы. Указанная задача оптимизации в пространстве вероятностных мер может быть сведена к задаче поиска глобального экстремума функции, заданной на подмножестве конечномерного евклидова пространства (в частности, оптимальные планы часто можно выбирать сосредоточенными на конечном множестве точек). Методы решения конечномерных задач оптимизации, встречающихся при построении оптимальных планов, рассмотрены в §§ 3, 4. Любой оптимальный план может быть построен (приближенно) с помощью одного из этих методов. Существуют и специальные методы, в которых учитывается структура задачи построения оптимальных планов регрессионных экспериментов. С помощью этих методов, описанных в §§ 1, 2, производится редукция размерности экстремальной задачи (исходная задача оптимизации сводится к последовательности задач оптимизации меньшей размерности).

§ 1. Построение непрерывных оптимальных планов

1. Особенности исходной экстремальной задачи. Экстремальные задачи (2.7) или (2.8), как ясно из п. 2.3.4, могут быть сведены к конечномерным задачам с размерностью не более чем $m(m+1)(k+1)/2$, где m — число неизвестных параметров, а k — размерность X ($X \subset \mathbb{R}^k$).

Эти задачи можно решить с помощью общих методов численного поиска экстремума (см. §§ 3, 4). При этом возможны два подхода. Один из них — поиск минимума $\Psi[M]$ в пространстве элементов информационной матрицы при ограничениях $M \in M(\mathcal{E})$, где множество $M(\mathcal{E})$ определено в § 2.2. Если $\Psi[M]$ — выпуклая функция, то минимизация $\Psi[M]$ сводится к задаче выпуклого программирования, для решения которой имеется целый арсенал

хорошо изученных численных процедур поиска оптимального решения (см. § 3). Второй подход — минимизация $\Psi[M(\xi)]$ по набору аргументов $\xi = \{x_i, p_i\}_1^n$ при ограничениях $x_i \in X, \sum_{i=1}^n p_i = 1$;

эта задача не является задачей выпуклого программирования.

В обоих случаях основной трудностью является большая размерность экстремальной задачи. К этому следует добавить трудность описания области $M(\Xi)$ и поиска плана ξ^* , соответствующего M^* (оптимальной точке из $M(\Xi)$), в первом случае и многоэкстремальность задачи — во втором.

Перечисленные трудности послужили толчком к созданию численных методов, учитывающих структуру функций $\Psi[M(\xi)]$.

2. Методы первого порядка. Наиболее простой алгоритмически и в то же время достаточно эффективный метод, сходный с градиентным (см. § 3), состоит в следующем. Пусть имеется план ξ_s . Рассмотрим план $\xi_{s+1} = (1 - \alpha)\xi_s + \alpha\xi$ ($0 \leq \alpha \leq 1$). При достаточно малых α и необходимой гладкости функции $\Psi[M]$ (см. п. 2.3.2)

$$\Psi[M(\xi_{s+1})] = \Psi[M(\xi_s)] + \alpha\Delta(M(\xi_s), M(\xi)).$$

Естественно выбрать план ξ таким, чтобы величина $\Delta(M(\xi_s), M(\xi))$ была минимальна. Одним из таких планов является план $\xi(x_s)$ с единичной мерой, приписанной точке

$$x_s = \underset{x}{\text{Arg inf}} \psi(x, \xi_s). \quad (1)$$

Приходим к следующей итерационной процедуре.

Алгоритм 1.

1) Имеется план ξ_s . Отыскивается точка (1).

2) Строится план $\xi_{s+1} = (1 - \gamma_s)\xi_s + \gamma_s\xi(x_s)$.

Скорость сходимости алгоритма 1 в значительной степени определяется последовательностью $\{\gamma_s\}$, которая может быть выбрана по одному из способов, рассмотренных ниже в п. 3.4 (при $f(\xi) = -\Psi[M(\xi)]$).

Имеет место следующее утверждение о сходимости алгоритма 1.

Пусть $\{\gamma_s\}$ определяется по одному из способов а) — д) из п. 3.4, выполняются условия б), в) из § 2.3, существуют ограниченные производные $\partial^2\Psi/\partial M_\alpha\partial M_\beta$ ($\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, \dots, m$) при любом $M \in M(C)$. Тогда алгоритм 1 сходится, причем

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \Psi[M(\xi_s)] = \inf_{\xi} \Psi[M(\xi)].$$

Если X — компакт, то из последовательности $\{\xi_s\}$ всегда можно выделить подпоследовательность, сходящуюся к одному из оптимальных планов. Если $\Psi[M]$ — строго выпуклая функция, то

$$\lim_{s \rightarrow \infty} M(\xi_s) = M(\xi^*).$$

Описанная итерационная процедура оказывается особенно удобной при малых размерностях пространства контролируемых переменных ($k < 10$). При больших размерностях (k одного по-

рядка с $m(m+1)/2$ или более) целесообразно обратиться к методам, работающим в пространстве информационных матриц.

3. Особенности итерационной процедуры. Скорость сходимости алгоритма 1 заметно увеличивается, если в качестве допустимых включить движения по направлениям, определяемым опорными точками x_i плана ξ_s с отрицательными γ_s . Итерационная процедура принимает следующий вид.

Алгоритм 2.

1) Отыскивается точка

$$x_s = \text{Arg max} \left\{ \psi(x_s^-, \xi_s) - \text{tr} M \frac{\partial \Psi}{\partial M}, \text{tr} M \frac{\partial \Psi}{\partial M} - \psi(x_s^+, \xi_s) \right\}_{M=M(\xi_s)},$$

где

$$x_s^+ = \text{Arg inf}_{x \in X} \psi(x, \xi_s), \quad x_s^- = \text{Arg sup}_{x \in X_s} \psi(x, \xi_s),$$

X_s — множество опорных точек плана ξ_s .

2) Строится план $\xi_{s+1} = (1 - \beta_s)\xi_s + \beta_s \xi(x_s)$, где $\beta_s = \gamma_s$, если $x_s = x_s^+$ и $\beta_s = -\min\{\gamma_s, p_{i_s}/(1 - p_{i_s})\}$, если $x = x_s^-$; последовательность $\{\gamma_s\}$ выбирается так же, как и в алгоритме 1.

При использовании алгоритма 2 удается избавиться от неудачно выбранных опорных точек начального плана. Алгоритм 1 обычно приводит к тому, что около опорных точек x_i образуются группы (кластеры) точек. Одним из способов их объединения является следующий. При появлении новой точки x_s , не совпадающей с прежними опорными точками, проверяется выполнение неравенства $\|\mu(x_{i_{s-1}}) - \mu(x_s)\| \leq \delta$ ($i_{s-1} = 1, \dots, n_{s-1}$), где $\|\dots\|$ означает норму в $\mathbf{R}^{m(m+1)/2}$, $\delta > 0$. При выполнении неравенства опорная точка x_i объединяется с точкой x_s и последней присваивается мера, равная $(1 - \alpha_s)p_i + \alpha_s$. Основанием для такого объединения служит предельное соотношение $\lim_{s \rightarrow \infty} \mu(x_i) = \mu(x_i^*)$, где x_i^* — одна из точек оптимального плана.

4. Частные случаи. Алгоритм 1 становится особенно простым при $\mu(x) = \lambda(x)f(x)f^T(x)$ (см. п. 2.1.1). В этом случае отпадает необходимость обращения матрицы $M(\xi_s)$ на каждом шаге, так как справедлива рекуррентная формула

$$M^{-1}(\xi_{s+1}) = (1 - \gamma_s)^{-1} \left[1 - \frac{\lambda(x_s) \gamma_s M^{-1}(\xi_s) f(x_s) f^T(x_s)}{1 - \gamma_s + \lambda(x_s) \gamma_s d(x, \xi_s)} \right] M^{-1}(\xi_s),$$

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

При построении D -оптимальных планов удобно использовать также рекуррентную формулу

$$|M(\xi_{s+1})| = (1 - \gamma_s)^m \left[1 + \frac{\lambda(x_s) \gamma_s d(x_s, \xi_s)}{1 - \gamma_s} \right] |M(\xi_s)|.$$

Если γ_s определяется способом а) из п. 3.1, то следует использовать формулу

$$\gamma_s = \frac{\lambda(x_s) d(x_s, \xi_s) - m}{[\lambda(x_s) d(x_s, \xi_s) - 1] m}.$$

При построении линейно оптимальных планов полезно иметь в виду, что

$$\text{tr} AM^{-1}(\xi_{s+1}) = (1 - \gamma_s)^{-1} \left[\text{tr} AM^{-1}(\xi_s) - \frac{\gamma_s \lambda(x_s) \varphi(x_s, \xi_s)}{1 - \gamma_s + \gamma_s \lambda(x_s) d(x_s, \xi_s)} \right],$$

где $\varphi(x, \xi) = f^T(x) M^{-1}(\xi) A M^{-1}(\xi) f(x)$. При

$$\alpha_s = \delta \frac{\lambda(x_s) \varphi(x_s, \xi_s) - \text{tr} AM^{-1}(\xi_s)}{\lambda(x_s) \varphi(x_s, \xi_s) [\lambda(x_s) d(x_s, \xi_s) - 1]}, \quad 0 \leq \delta \leq 1,$$

процедура оказывается релаксационной (см. § 3).

5. Итерационная процедура второго порядка. Итерационная процедура первого порядка, как и большинство процедур градиентного типа, медленно сходятся в окрестности оптимального плана. Поэтому в тех случаях, когда интерес представляют точные значения координат опорных точек оптимального плана (например, в задачах табулирования), приходится обращаться к методам второго порядка.

Пусть X состоит из конечного числа точек ($X = \{x_1, \dots, x_N\}$) и функция $\Psi[M]$ имеет производные до третьего порядка включительно по элементам матрицы M в любом множестве $M(C)$. Любой план можно представить в виде $\xi = \{x_1, \dots, x_N; p_1, \dots, p_N\}$ ($p_i \geq 0, \sum_{i=1}^N p_i = 1$), и поэтому вектор $p = (p_1, \dots, p_N)$ полностью определяет ξ .

Алгоритм 3.

1) Имеется вектор p_s , определяющий план ξ_s . Отыскиваем вектор

$$\pi^* = \text{Arg} \min_{\pi} (\pi^T \dot{\Psi}_s + \pi^T \ddot{\Psi}_s \pi / 2),$$

где

$$\dot{\Psi}_s = \left\{ \frac{\partial \Psi}{\partial \pi_j} \right\}, \quad \ddot{\Psi}_s = \left\{ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \pi_i \partial \pi_j} \right\}, \quad \pi^T e = 0,$$

$$e^T = (1, \dots, 1), \quad 1 \geq p_i + \pi_i \geq 0.$$

2) Строим план ξ_{s+1} по вектору $p_{s+1} = p_s + \pi_s$; выбор π_s см. ниже. Если не обращать внимание на ограничения, то

$$\pi_s^* = \ddot{\Psi}_s^{-1} (\lambda_e - \dot{\Psi}_s), \quad \lambda = e^T \ddot{\Psi}_s^{-1} \dot{\Psi}_s / e^T \ddot{\Psi}_s^{-1} e.$$

Чтобы добиться выполнения ограничений, можно выбирать поправки к весам в виде $\pi_s = \alpha_s \pi_s^*$, где α_s выбирается произвольно, по так, чтобы $1 \geq p_{is} + \pi_{is} \geq 0$.

Описанная процедура является одной из модификаций пьютоповского метода. Она обладает двумя существенными недостатками. Во-первых, оптимальный план отыскивается на области действия с конечным числом допустимых опорных точек. Для разумной аппроксимации реальных областей действия дискретным набором точек их количество должно быстро расти с размерностью пространства контролируемых переменных. Во-вторых, многократное обращение матриц Ψ_s размером $N \times N$ представляет серьезную вычислительную проблему.

При сформулированных предположениях алгоритм 3 сходится, т. е. $\lim_{s \rightarrow \infty} p_s = p^*$.

Литература к § 1: [110—112, 140, 149, 187*, 195, 196].

§ 2. Дискретные точные планы

1. Некоторые свойства оптимальных дискретных планов. Непрерывные планы с точки зрения практического эксперимента являются приближенным решением исходной задачи планирования эксперимента. Приближение тем лучше, чем больше число возможных наблюдений N (меньше сказывается дискретность мер $p_i = r_i/N$).

Пусть ξ^* — непрерывный оптимальный план, а ξ_N^* — точный оптимальный план, т. е. решение задачи (2.3). Если n — число опорных точек плана ξ^* , то

$$\Psi[M(\xi^*)] \leq \Psi[M(\xi_n^*)] \leq \frac{\gamma(N-n)}{\gamma(N)} \Psi[M(\xi^*)], \quad (2)$$

где функция $\gamma(N)$ определена в условии а) из § 2.3.

Данные неравенства дают весьма грубые границы для величины $\Psi[M(\xi_N^*)]$. Так, для D -критерия из (2) следует

$$|M(\xi^*)|/|M(\xi_N^*)| \leq [N/(N-m)]^m.$$

Более детальный анализ показывает, что

$$|M(\xi^*)|/|M(\xi_N^*)| \leq N^m / \prod_{i=1}^m (N + f - i).$$

Простейшие процедуры округления плана ξ^* состоят в следующем. За опорные точки плана ξ_N^* выбираются опорные точки x_i^* плана ξ^* ; в каждой из них располагается по $[(N-n)p_i^*]^+$ или по $[Np_i^*]$ наблюдений. Оставшиеся наблюдения располагаются произвольно. Здесь $[a]$ обозначает целую часть a , $[a]^+$ — такое ближайшее к a целое, для которого $[a]^+ \geq a$. Близость полученного первым способом плана ξ_N^* к оптимальному плану определяется неравенством

$$\Psi[M(\xi_N^*)] - \Psi[M(\xi^*)] \leq \left[\frac{\gamma(N-n)}{\gamma(N)} - 1 \right] \Psi[M(\xi^*)].$$

При округлении планов полезно иметь в виду, что для D -критерия

$$\ln |M(\xi^*)| - \ln |M(\bar{\xi}_N)| \leq \frac{m}{2} \max_i \left(\frac{p_i - p_i^*}{p_i} \right)^2,$$

а для линейных критериев (в случае регулярных линейно оптимальных планов)

$$\text{tr } AM^{-1}(\bar{\xi}_N) - \text{tr } AM^{-1}(\xi^*) \leq \frac{1}{2} \text{tr } AM^{-1}(\xi^*) \max_i \left(\frac{p_i - p_i^*}{p_i} \right)^2.$$

2. Численные методы построения. Поскольку (2.3) можно рассматривать как экстремальную задачу (оптимального выбора точек x_1, \dots, x_N) в пространстве X^N размерности $N \times k$, то ее можно решать методами, описанными в § 4. Часто для численного построения дискретных оптимальных планов используют и методы, рассмотренные ниже и аналогичные процедурам из § 1.

Для удобства изложение будет вестись для функционалов от дисперсионной матрицы вида $Q[D]$ и в предположении, что оптимальные планы ξ_N^* регулярны.

Алгоритм 4.

1) Имеется план

$$\xi_N^{(s)} = \left\{ x_1^{(s)}, \dots, x_N^{(s)}, \frac{1}{N}, \dots, \frac{1}{N} \right\}. \quad (3)$$

Отыскиваем точку $x_+^{(s)} = \text{Arg max}_{x \in X} \varphi(x, \xi_N^{(s)})$, где $\varphi(x, \xi) = \text{tr } \mu(x) D \frac{\partial Q}{\partial D} D \Big|_{D=D(\xi)}$.

2) Составляем план $\xi_{N+1}^{(s)} = \left(1 - \frac{1}{N+1} \right) \xi_N^{(s)} + \frac{1}{N+1} \xi(x_+^{(s)})$.

3) Отыскиваем

$$x_-^{(s)} = \text{Arg inf}_{x \in X_s} \varphi(x, \xi_{N+1}^{(s)}),$$

где $X_s = \{x_1^{(s)}, \dots, x_N^{(s)}, x_+^{(s)}\}$.

4) Составляем план $\xi_{N+1}^{(s+1)} = \left(1 + \frac{1}{N+1} \right) \xi_N^{(s)} - \frac{1}{N+1} \xi(x_-^{(s)})$.

Последовательность $\{Q[D(\xi_N^{(s)})]\}$ сходится, однако предел ее не обязательно совпадает с $\inf_{\xi_N} Q[D(\xi)]$. Лишь при совпадении

плана ξ_N^* с одним из непрерывных оптимальных планов ξ^* она заведомо приведет к оптимальному плану.

Возможны различные модификации алгоритма 4. Например, на каждом его шаге можно включать и выбрасывать не по одной, а по нескольким точкам.

Описываемая ниже процедура основывается на следующей простой идее. Пусть в плане ξ_N одна из опорных точек x_i заменена на точку x . Функция $Q[D]$ изменится при этом на некоторую

величину $\Delta(x_i, x) < 0$. Очевидно, что при $\Delta(x_i, x) < 0$ имеет смысл заменить в плане ξ_N точку x_i на x . Изложим конкретную реализацию этой идеи для D - и линейных критериев при $\mu(x) = \lambda(x)f(x)f'(x)$.

Алгоритм 5.

1) Имеется план $\xi_N^{(s)}$ вида (3). Отыскиваем пару

$$\left(x_i^s, x^s\right) = \text{Arg} \max_{x_i} \max_{x \in X} \Delta\left(x_i^s, x, \xi_N^s\right),$$

где

$$\begin{aligned} \Delta(x', x, \xi) &= \lambda(x)d(x, \xi) - \lambda(x')d(x', \xi) - \\ &\quad - N^{-1}\lambda(x)\lambda(x')[d(x, \xi)d(x', \xi) - d^2(x, x', \xi)], \\ d(x, x', \xi) &= d(x', x, \xi) = f'(x')D(\xi)f(x). \end{aligned}$$

2) Составляется план $\xi_N^{(s+1)}$, который отличается от $\xi_N^{(s)}$ тем, что точка x_i^s заменена на точку x^s .

Процедура порождает монотонно убывающую последовательность $\{D(\xi_N^s)\}$ и сходится по критерию, но не всегда к оптимальному плану ξ_N^* , хотя и приводит при одних и тех же начальных планах к лучшим результатам, чем алгоритм 4.

Алгоритм 4 уместно называть *процедурой нулевого порядка*, алгоритм 5 — *первого порядка*. Легко выписать процедуры более высоких порядков, в которых производится замена двух и более точек. Для этого необходимо подсчитывать величины типа $\Delta(x_{i_1}, x_{i_2}; x_1, x_2, \xi)$. Однако эти процедуры весьма громоздки и практического применения не находят.

Для линейных критериев в алгоритме 5 следует положить

$$\begin{aligned} \Delta(x', x, \xi) &= \lambda(x')[1 + N^{-1}\lambda(x)d(x, \xi)]\varphi(x', \xi) - \\ &\quad - \lambda(x)\{[1 - N^{-1}\lambda(x')d(x', \xi)]\varphi(x, \xi) + \\ &\quad + 2N^{-1}\lambda(x')d(x', x, \xi)\varphi(x', x, \xi)\}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \varphi(x', x, \xi) &= \varphi(x, x', \xi) = f'(x)D(\xi)AD(\xi)f(x'), \\ \varphi(x, \xi) &= \varphi(x, x, \xi). \end{aligned}$$

Литература к § 2: [93].

§ 3. Методы поиска локального экстремума

Сущность задачи построения оптимального плана — поиск глобального экстремума некоторой функции, однозначно связанной с выбранным критерием оптимальности, который может быть отличен от критериев, описанных в гл. 2. Если точку, в которой достигается глобальный экстремум функции, удастся отделить (т. е. найти такую ее окрестность, в которой функция одноэкстремальна), то для решения получающейся экстремальной задачи можно

применять методы поиска локального экстремума. Рассмотренные в этом параграфе методы могут быть использованы и в случае, когда исследователь интересуется локальным экстремумом функции регрессии; эксперимент достаточно дешев, а влиянием случайных ошибок измерений можно пренебречь.

1. Основные подходы к задаче поиска локального экстремума. Предположим, что $X \subset \mathbb{R}^k$ ($k \geq 1$), f — измеримая ограниченная сверху функция, заданная на X . Точка $x_* \in X$ называется *точкой локального максимума* функции f , если существует такое $\varepsilon > 0$, что $f(x') \leq f(x_*)$ при всех $x' \in \{f \in X \mid \|x - x_*\| \leq \varepsilon\}$. Если точка локального максимума у функции f единственная, то она совпадает с x^* — *точкой глобального максимума* функции f , т. е. точкой, в которой

$$f^* = f(x^*) = \max_{x \in X} f(x),$$

а функция f в этом случае называется *унимодальной*. Если $(-f)$ выпукла на X и X — выпуклое множество, то задача поиска x_* называется *задачей выпуклого программирования*.

В настоящем параграфе кратко рассмотрены методы поиска максимума унимодальной функции f (в предположении $X = \mathbb{R}^k$), которые могут быть использованы (и широко использовались) при решении экстремальных задач, возникающих при планировании и обработке результатов экспериментов. Эти задачи обычно характеризуются многомерностью ($k > 1$) и гладкостью функции f . Предполагается, что функция f или ее производные в любой точке $x \in X$ могут быть вычислены без случайной ошибки. Значительная часть алгоритмов обладает более высокой скоростью сходимости, чем максимальная скорость, достигаемая при планировании экстремальных экспериментов в случае, когда случайной ошибкой эксперимента пренебречь нельзя. Тем не менее многие результаты гл. 14 могут быть использованы и для исследования приведенных ниже алгоритмов. В гл. 14 содержится также ряд сведений об использовании для решения задач оптимизации при наличии ограничений операторов проектирования на выпуклые множества, методом штрафных функций и множителей Лагранжа.

Для оценивания x_* в методах локального поиска строится последовательность точек x_0, x_1, \dots ($x_i \in X$), при некоторых предположениях сходящаяся к x_* . Выбор способа построения этой последовательности зависит от свойств функции f , от информации, которая используется на каждой итерации и от технических средств, которыми располагает исследователь для реализации вычислительных методов. В зависимости от используемой на каждой итерации информации методы оптимизации можно разделить на три группы: поисковые методы используют только значения функции f , в методах первого порядка используются, кроме того, первые производные этой функции, а в методах второго порядка — также и вторые производные.

Все методы, рассматриваемые в данном параграфе, можно (аналогично (14.1)) представить в виде

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_n s_n, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (4)$$

где $x_0 \in X$ — начальное приближение, s_n — направление движения, $\gamma_n \geq 0$ — длина шага.

Методы оптимизации различаются, прежде всего, способом выбора направления движения s_n , который обычно таков, что получающийся метод оказывается релаксационным, т. е. выполняется неравенство $f(x_{n+1}) > f(x_n)$. Для этого необходимо, чтобы $s_n^T \nabla f(x_n) > 0$ при всех x_n ($n \geq 0$).

Число γ_n с точностью до множителя $\|s_n\|$ определяет расстояние от точки x_n до x_{n+1} . Трудоемкость вычисления величины γ_n должна быть согласована с трудоемкостью вычисления s_n .

Ниже приведены способы выбора величин γ_n .

а) $\gamma_n = \text{Arg} \max_{\gamma \geq 0} f_n(\gamma)$, где $f_n(\gamma) = f(x_n + \gamma s_n)$.

Точное вычисление одномерного максимума обычно нецелесообразно. На практике часто ограничиваются выбором γ_n из других условий.

б) $f_n^* - \delta_n \leq f_n(\gamma_n) \leq f_n^* = \max_{\gamma > 0} f_n(\gamma)$, $\delta_n \geq 0$, $\sum_{n=0}^{\infty} \delta_n < \infty$.

в) $(1 - \lambda_n) f_n(0) + \lambda_n f_n^* \leq f_n(\gamma_n)$, $0 < \lambda \leq \lambda_n \leq 1$.

Здесь λ_n и δ_n характеризуют точность вычисления одномерного максимума.

Простым в вычислительном отношении и обеспечивающим релаксационность алгоритма (4) является следующий способ.

г) Полагаем $\gamma_i > 0$, $\gamma_{n+i} = \gamma_n \gamma^i$, где $1 < \gamma < \infty$, $i = \max\{j = 1, 2, \dots \mid f(x_n + \gamma^j \gamma_n s_n) > f(x_n + \gamma^{j-1} \gamma_n s_n)\}$, если $f(x_n + \gamma_n s_n) > f(x_n)$, и

$$i = -\min\{j = 1, 2, \dots \mid f(x_n + \gamma^j \gamma_n s_n) > f(x_n)\}$$

в противном случае.

Способ г) при $\gamma = 2$ называют *способом удвоения*.

д) Априорное задание γ_n из условий

$$\gamma_n > 0, \quad n = 1, 2, \dots, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < \infty.$$

Способ д) прост при реализации, но не гарантирует релаксационность алгоритма (3), что вызывает, вообще говоря, более медленную его сходимость.

е) Если функция f непрерывно дифференцируема, $s_n^T \nabla f(x_n) \geq \theta$ ($\theta > 0$), для всех $x, x' \in X$

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(x')\| \leq L \|x - x'\|, \quad L < \infty,$$

то в качестве γ_n может быть взято любое число, удовлетворяющее условиям

$$0 < \varepsilon_1 \leq \gamma_n \leq 2/(L\theta + \varepsilon_2).$$

Здесь $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$ — параметры метода.

Ряд результатов о сходимости и скорости сходимости методов поиска экстремума с выбором γ_n по способам д) и е) приведен в гл. 14.

ж) Если известна величина f^* , то можно положить

$$\gamma_n = (f^* - f(x_n)) / (s_n^T \nabla f(x_n)).$$

Здесь γ_n — это абсцисса точки пересечения прямой $y = f^*$ и касательной к кривой

$$y = f_n(\gamma) = f(x_n + \gamma s_n)$$

в точке $(0, f_n(0))$.

$$\text{з) } \gamma_n = \max \left\{ \gamma > 0 \mid f_n(\gamma) - f(x_n) \geq \frac{1}{2} \gamma \|s_n\| \frac{\partial f}{\partial s_n}(x_n) \right\}.$$

Более общим является другой способ:

$$\text{и) } \gamma_n = \max \{ \gamma > 0 \mid f(x_n + \gamma s_n) - f(x_n) \geq q_n \gamma s_n^T \nabla f(x_n) \},$$

где $0 < q < q_n \leq 1/2$.

2. Сходимость и скорость сходимости алгоритмов локального поиска. В настоящем пункте приводятся условия, достаточные для сходимости (4) и оценки скорости сходимости этого алгоритма. Введем множества:

$$X^* = \{x \mid \nabla f(x) = 0\}, \quad X_0 = \{x \mid f(x) \geq f(x_0)\}, \quad X_0^* = X^* \cap X_0.$$

Множество X^* называется *множеством стационарных точек*.

Теорема 1. *Предположим, что $f(x)$ ограничена сверху; x_0 — любая точка из X и $X_0^* \neq \emptyset$; функция f непрерывно дифференцируема на X , а ее градиент удовлетворяет условию Липшица с константой L :*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(x')\| \leq L \|x - x'\|, \quad x, x' \in X = \mathbb{R}^k;$$

для всех $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\omega_n = s_n^T \nabla f(x_n) [\|s_n\| \|\nabla f(x_n)\|]^{-1} \geq \omega > 0;$$

для любого $\varepsilon > 0$ найдется такое $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$, что при всех $x_n \in \{x \mid \rho(x, X_0^*) > \varepsilon\} \cap X_0$ выполняется $\|\nabla f(x_n)\| \geq \delta$, γ_n выбирается способом в) или и). Тогда алгоритм (4) сходится, т. е.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \rho(x_n, X^*) = 0.$$

Предположим, что в дополнение к условиям теоремы 1 функция f вогнута, т. е. для всех $x, x' \in X$, $\alpha \in [0, 1]$

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)x') \geq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(x').$$

Тогда последовательность (4) сходится к множеству точек глобального максимума; если выполняется в), то при всех $n = 1, 2, \dots$

$$v_n = f(x^*) - f(x_n) \leq v_0 \left[1 + v_0 (2Ld_0)^{-1} \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i \omega_i^2 \right]^{-1},$$

где $v_0 = f(x^*) - f(x_0)$, если же выполняется и), то

$$v_n \leq v_0 \left[1 + v_0 (Ld_0)^{-1} \sum_{i=0}^{n-1} q_i \omega_i^2 \right]^{-1}.$$

Другое утверждение о скорости сходимости (4) сформулируем для случая, когда функция f *сильно вогнута с параметром вогнутости* $\rho > 0$, т. е. для всех $\alpha \in [0, 1]$, $x, x' \in X$ имеет место неравенство

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)x') \geq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(x') + \alpha(1 - \alpha)\rho \|x - x'\|^2.$$

Предположим, что в дополнение к условиям теоремы 1 функция f *сильно вогнута с параметром вогнутости* ρ . Тогда точка x^* , в которой достигается максимум функции f , единственная, алгоритм (1) сходится к этой точке; $\|x_n - x^*\|^2 \leq 2\rho^{-1}v_n$; если γ_n выбирается по способу в), то

$$v_n \leq v_0 \exp \left\{ -\rho (2L)^{-1} \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i \omega_i^2 \right\}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

если же по способу и), то

$$v_n \leq v_0 \exp \left\{ -\rho L^{-1} \sum_{i=0}^{n-1} q_i \omega_i^2 \right\}, \quad n = 1, 2, \dots$$

3. Методы первого и второго порядков. Большинство методов, в которых используются производные функции f , являются частными случаями обобщенного градиентного метода, т. е. алгоритма (4), в котором $s_n = A_n \nabla f(x_n)$, где A_n ($n = 0, 1, \dots$) — симметричные положительно определенные матрицы. Если $\|A_n\| \leq a$ ($n = 0, 1, \dots$), а все собственные числа этих матриц ограничены снизу числом $b > 0$, то $\omega_n \geq ba^{-1}$ ($n = 0, 1, \dots$). Поэтому для исследования сходимости и скорости сходимости обобщенного градиентного метода можно использовать результаты, сформулированные в п. 2.

Для градиентного метода $A_n = I_n$ ($n = 0, 1, \dots$); если, кроме того, γ_n выбирается по способу а), то получающийся алгоритм называется *методом наискорейшего подъема*.

Для метода Ньютона $A_n = -[\nabla^2 f(x_n)]^{-1}$ ($n = 0, 1, \dots$). Этот метод обладает квадратичной скоростью сходимости.

В методах переменной метрики A_n — аппроксимация матрицы $-[\nabla^2 f(x_n)]^{-1}$; для значительной их части

$$A_{n+1} = A_n \frac{A_n a_n a_n^T A_n}{a_n^T A_n a_n} + \frac{r_n r_n^T}{r_n^T a_n} + c a_n^T A_n a_n V_n V_n^T, \quad A_0 = I_n,$$

$$a_n = \nabla f(x_{n+1}) - \nabla f(x_n), \quad r_n = x_{n+1} - x_n, \quad V_n = \frac{r_n}{r_n^T a_n} + \frac{A_n a_n}{a_n^T A_n a_n},$$

γ_n выбирается по способу а). Здесь c ($0 \leq c \leq 1$) обозначает параметр, выбираемый произвольно; при $c = 0$ получаем метод Дэвидона — Флетчера — Пауэлла.

В методах сопряженных направлений $s_0 = \nabla f(x_0)$, $s_n = \nabla f(x_n) - b_n s_{n-1}$ ($n = 1, 2, \dots$), γ_n выбирается по способу а), а b_n — таким образом, что если решается задача поиска максимума квадратичной функции $f(x) = -x^T Bx$, то направления $s_n, s_{n+1}, \dots, s_{n+k-1}$ являются сопряженными относительно матрицы $B > 0$ (т. е. $s_i^T B s_j = 0$, $i \neq j$). Отметим, что методами сопряженных направлений эта задача решается не более чем за k шагов, а методом Ньютона с $\gamma_n = 1$ — за один шаг. Скорость сходимости методов сопряженных направлений может быть оценена с помощью результатов п. 2 и следующего утверждения: если для некоторого $c > 0$ выполнено $|b_n| \leq c \|\nabla f(x_n)\| / \|s_{n-1}\|$ ($n = 1, 2, \dots$), то $\omega_n \geq (1+c)^{-1}$.

В частности, если b_n выбирать в виде

$$b_n = \|\nabla f(x_{n-1})\|^{-2} [\nabla f(x_n)]^T (\nabla f(x_n) - \nabla f(x_{n-1}))$$

и предполагать, что f — сильно вогнутая с параметром $\rho > 0$ функция, то $c = L\rho^{-1}$. Другими примерами методов сопряженных направлений являются метод, получающийся при

$$b_n = -\|\nabla f(x_n)\|^2 / \|\nabla f(x_{n-1})\|^2,$$

и метод Дэвидона — Флетчера — Пауэлла.

4. Детерминированные поисковые методы. На практике часто встречается задача поиска экстремума функции f , градиент которой (и тем более матрица вторых производных) с нужной точностью вычисляется лишь на основе чрезмерно большого объема вычислений. В этих случаях используют поисковые методы, описанные в этом и следующем пунктах (см. также § 14.4).

Наиболее известным из детерминированных поисковых методов является метод покоординатного подъема. Во всех его вариантах в качестве s_n выбирается то из двух направлений $+e, -e$, в котором функция f возрастает, а если $e^T \nabla f(x_n) = 0$, то полагают $x_{n+1} = x_n$ и переходят к следующему шагу. Здесь $e = \{e_j\}_{j=1}^k, e_j$ ($j = 1, \dots, k$) — орт. (координатный вектор j -го направления).

Весьма распространен метод циклического покоординатного подъема, в котором выбирается $s_n = \pm e$; $e = e_{j(n)+1}$, где $j(n)$ — остаток от деления n на k ($n = 0, 1, \dots$). Если при этом выполнены условия теоремы 1 и $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x_n - x_{n+1}\| = 0$, то $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho(x_n, X_0^*) = 0$.

Чаще для выбора величин γ_n используют способ г) или этот способ модифицируют таким образом, чтобы при всех $j = 0, 1, \dots, k-1$ и всех $i = 0, 1, \dots, k-1$ выполнялось равенство $\gamma_{jk+i} = \gamma(j)$; если выполняется $2k$ неравенств

$$f(x_{jk+i} \pm \gamma(j)e_{i+1}) < f(x_{jk+i}), \quad i = 0, \dots, k-1,$$

то $x_{(j+1)k} = x_{jk}$ и полагают $\gamma(j+1) = \gamma(j)/\gamma'$ (длину шага уменьшают в γ' раз); в противном случае (за предыдущие k шагов значения $f(x_n)$ увеличилось) полагают $\gamma(j+1) = \gamma(j)$. Так определенный метод покоординатного подъема сходится, если функция f

непрерывно дифференцируема, а множество $X_0 = \{x \in X | f(x) \geq f(x_0)\}$ ограничено.

Если в методе покоординатного подъема выбирать s_n равным e_j или $-e_j$, где e_j выбирается из условия

$$|e_j^T \nabla f(x_n)| = \max_{i=1, \dots, k} |e_i^T \nabla f(x_n)|,$$

то $\omega_n^2 \geq k^{-1}$ и для оценки скорости сходимости такого метода можно воспользоваться результатами п. 2.

5. Локальный случайный поиск. Алгоритмы локального случайного поиска имеют вид (4), где s_n — реализация случайного вектора с некоторым распределением вероятностей. Ряд алгоритмов случайного поиска приведен в п. 14.4.2, там же сформулированы условия, достаточные для их сходимости.

Рассмотрим следующий класс алгоритмов. Выберем в качестве e случайный вектор единичной длины ($\|e\| = 1$) и проверим, делая малый шаг из x_n в направлении e , будет ли функция возрастать вдоль этого направления (фактически проверяем знак величины $\omega_n = \|\nabla f(x_n)\|^{-1} e^T \nabla f(x_n)$) и полагаем $s_n = e \operatorname{sign} \omega_n$, где

$$\operatorname{sign} a = \begin{cases} 1, & \text{если } a > 0, \\ -1, & \text{если } a < 0, \\ 0, & \text{если } a = 0. \end{cases}$$

Пусть выполнены все условия теоремы 1, кроме условий для ω_n и γ_n , и существует такое $\omega > 0$, что

$$P\{|\omega_n| \geq \omega | x_0, x_1, \dots, x_n\} \geq p > 0, \quad n = 0, 1, \dots,$$

γ_n выбирается по способу в). Тогда $\rho(x_n, X^*) \rightarrow 0$ по вероятности при $n \rightarrow \infty$. Если, кроме того, функция f вогнута, то при всех $n = 1, 2, \dots$ имеет место оценка

$$P\{f(x^*) - f(x_n) \leq c_1 n^{-1}\} \geq 1 - c_2 n^{-1},$$

где $c_1 = 4Ld_0/(\lambda\omega^2 p)$, $c_2 = 4/(\omega^2 p^2)$, $d_0 = \operatorname{diam}(X_0)$. Если f сильно вогнута с параметром $\rho > 0$, то

$$P\{\|x_n - x^*\|^2 \leq 2\rho^{-1}(f(x^*) - f(x_0)) \exp\{-c_3 n\}\} \geq 1 - c_2 n^{-1},$$

где $c_3 = \rho\lambda\omega\rho/(4L)$.

Отметим, что для метода случайного покоординатного подъема (e случайно равновероятно выбирается среди множества координатных векторов) $\omega = p = n^{-1}$. Этот метод обладает важным свойством, которое не присуще методам детерминированного покоординатного подъема: независимость выбора направления подъема от градиента функции f и одновременно наличие априорных оценок скорости сходимости.

Одним из наиболее распространенных методов случайного поиска является метод случайного поиска с парной пробой, в котором вектор e представляет собой независимую реализацию равномерно распределенного на единичной сфере $S_1 = \{x | \|x\| = 1$,

$x \in \mathbb{R}^k$ случайного вектора. Здесь в качестве ω можно выбрать любое число ($0 < \omega < 1$), при этом $p = q(\omega)/r(1)$, где

$$q(t) = r \left((1-t)^2 - \frac{1}{4}(1-t)^4 \right), \quad 0 \leq t \leq 1,$$

$$r(t) = \int_{\substack{k-1 \\ \sum_{i=1} z_i < t}} \dots \int dz_1 \dots dz_{k-1} \left(\sqrt{1 - \sum_{i=1}^{k-1} z_i^2} \right)^{-1},$$

$r(1)$ — объем единичной сферы.

На практике часто используют случайный поиск с обучением, на каждом шаге которого учитывается накопленный опыт поиска на предыдущих шагах, а вероятностные свойства поиска перестраиваются так, чтобы направления, более перспективные в смысле возрастания функции f , становились более вероятными. Для некоторых из этих алгоритмов также могут быть использованы приведенные оценки скорости сходимости: предположим, что при всех $n = 0, 1, 2, \dots$

$$s_n = (u_n + v_n) \|u_n + v_n\|^{-1}, \quad \|v_n\| \leq c < 1,$$

где u_0, u_1, \dots — независимые реализации случайного вектора, равномерно распределенного на единичной сфере с центром в начале координат, v_n — обучающий вектор; тогда в качестве ω можно выбрать любое число ($0 < \omega < 1$), а $p = p(\omega)$ равно вероятности того, что длина проекции равномерно распределенного на сфере S_1 вектора на вектор $(0, 0, \dots, 0, 1)$ больше или равна

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega) = 1 - (1 - \omega)^2(1 - c)^2/8, \quad p(\omega) = r(\varepsilon)/r(1).$$

Достоинствами методов случайного поиска являются простота выбора направления движения, относительно слабая зависимость количества требуемых на каждом шаге вычислений от размерности пространства, возможность поиска этими методами максимума недифференцируемых и даже разрывных функций, простой учет ограничений, если множество X не совпадает с \mathbb{R}^k (ограничения обычно учитываются следующим образом: после выбора направления движения s_n проверяют его возможность, т. е. выясняют, принадлежит ли при малом γ точка $x_n + \gamma s_n$ множеству X ; если не принадлежит, то выбирают новое направление).

Опишем метод случайного m -градиента. Пусть u_0, u_1, \dots, u_m ($1 \leq m \leq k$) — независимые реализации равномерно распределенного на единичной сфере S_1 случайного вектора. С помощью процедуры ортогонализации построим из этого набора систему ортонормированных векторов q_1, \dots, q_m . Случайный m -градиент функции f в точке $x \in X$ определяется следующим образом:

$$G^m = G^m(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{i=1}^m q_i \frac{f(x + \alpha q_i) - f(x)}{\alpha}.$$

В случае $m = k$ этот вектор с вероятностью 1 совпадает с градиентом, $G = G^k = G^k(x) = \nabla f(x)$, а при $m = 1$ получающийся алгоритм оптимизации является методом случайного поиска с парной пробой. При всех $m = 1, \dots, k$ имеет место

$$G_m = \cos \varphi (G \cos \varphi + F \sin \varphi),$$

где случайный вектор F не зависит от случайного угла φ и имеет равномерное распределение на $(n-2)$ -мерной сфере S_F , определяемой уравнениями $\|F\| = \|G\|$, $F^T G = 0$, а плотность распределения угла φ ($0 \leq \varphi \leq \pi/2$) равна

$$p(\varphi) = 2 \left[B\left(\frac{m}{2}, \frac{k-m}{2}\right) \right]^{-1} \cos^{m-1} \varphi \sin^{k-m-1} \varphi, \quad m < k.$$

Отсюда при $m = 1$ вытекает, что случайный и фиксированный векторы при больших k близки к ортогональным, но асимптотика этой ортогональности $E \cos \varphi \sim k^{-1/2}$, $k \rightarrow \infty$, благоприятствует применению случайных направлений в задачах оптимизации.

Если ограничиться методом, определяемым равенством (4) с $s_n = G^m(x_n)$, $\|\gamma_n s_n\|$ — случайной величиной с заданным законом распределения для случая линейных функций $f(x)$, и измерять эффективность алгоритма средним продвижением в направлении градиента, отнесенным к числу пробных шагов n , то лучшим будет метод при $m = 1$, за ним идет метод при $m = 2$ и т. д.; при этом преимущество случайного ($m = 1$) метода перед градиентным ($m = k$) пропорционально \sqrt{k} .

Более важно с точки зрения выдачи практических рекомендаций об относительной эффективности алгоритмов исследовать их для задачи поиска максимума отрицательно определенной квадратичной формы, которую, не умаляя общности, запишем в следующем виде:

$$f(x) = -(\lambda_1 x_{(1)}^2 + \dots + \lambda_k x_{(k)}^2), \quad x = (x_{(1)}, \dots, x_{(k)})^T, \\ 1 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_k = \rho_0.$$

В качестве исследуемых алгоритмов оптимизации возьмем G^m -методы скорейшего подъема (это означает, что γ_n выбирается по способу а)) и без ограничения общности будем считать, что $\|G\| = \|F\| = 1$.

При $m < k$ получаем ($x = x_n$, $x' = x_{n+1}$)

$$E[f(x')/f(x)] = 1 - p_m^k(f, G),$$

где

$$p_m^k(f, G) = \\ = \pi^{2/(k-1)} \Gamma\left(\frac{k-1}{2}\right) \left[B\left(\frac{m}{2}, \frac{k-m}{2}\right) \right]^{-1} \int_0^{\pi/2} \int_{S_F} \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i^{-1} g_i^2 \right)^{-1} \times \\ \times \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i (g_i + f_i \operatorname{tg} \varphi)^2 \right)^{-1} \cos^{m-1} \varphi \sin^{k-m-1} \varphi dS_F d\varphi.$$

Если $m = k$, то

$$p_k^h(f, G) = \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i^{-1} g_i^2 \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i g_i^2 \right)^{-1}$$

Отметим, что при всех m, f, G справедливо $p_m^h(f, G) \geq m/(\rho_0 k)$.
Обозначим

$$r_m^h(f) = \min_{|G|=1} p_m^h(f, G).$$

Эта величина является важной характеристикой метода, поскольку при всех $n = 0, 1, \dots$

$$E(f(x')/f(x)) \leq 1 - r_m^h(f)$$

и на всяком эллипсоиде уровня имеются точки $x = x_n$, в которых достигается равенство (такие точки называются «наихудшими» для G^m -метода).

Для градиентного наискорейшего подъема

$$p_k^h(f) = 4\rho_0/(1 + \rho_0)^2,$$

причем в этом случае «наихудшие» точки переходят в «наихудшие».

Сравнивая G^1 - и G^k -методы на основе сформулированного подхода, приходим к следующему качественному выводу. Если число ρ_0 велико (велика «овражность» формы $-f(x)$) и большинство из коэффициентов $\lambda_2, \dots, \lambda_{k-1}$ не слишком велики (т. е. велика размерность «дна оврага» формы $-f(x)$), то G^1 -метод лучше, он дает не только экономию в затратах на определение направлений подъема, но и обеспечивает в среднем лучший выбор самих направлений. Это преимущество имеет место уже при $k=2$ и растет с ростом k и ρ_0 . Если ρ_0 близко к 1, то при любом разумном k G^k -метод лучше; при $\rho_0 = 1$ он обеспечивает достижение точки максимума за один шаг.

Литература к § 3: [8, 42*, 42, 75].

§ 4. Поиск глобального экстремума

В настоящем параграфе кратко описаны методы поиска глобального экстремума, широко используемые в задачах построения оптимальных планов.

1. Особенности задачи и основные направления ее решения. Предположим, что X — компактное подмножество \mathbb{R}^k ($k \geq 1$), f — ограниченная сверху функция, заданная на X и принадлежащая некоторому классу функций \mathcal{F} . Задача поиска максимума функции f состоит в построении последовательности точек x_0, x_1, \dots

($x_i \in X, i = 0, 1, \dots$), сходящейся к $x^* = \underset{x \in X}{\text{Arg max}} f(x)$. Будем

предполагать, что в каждой точке $x \in X$ можно вычислить $f(x)$ без случайной ошибки.

В отличие от задач поиска локального экстремума, задачи поиска глобального для достаточно широких классов функций \mathcal{F} не могут быть решены, если множество X неограниченно. Границы множества X определяют априорную информацию о положении x^* ; чем шире границы множества X , тем больше неопределенность о положении x^* и тем менее эффективен поиск этой точки.

Иногда множество X задается с помощью различных ограничений типа равенств и неравенств и имеет сложную структуру. В этих случаях обычно с помощью метода штрафных функций или других стандартных приемов, частично описанных в гл. 14, исходная задача сводится к задаче оптимизации на множестве более простой структуры (например, на гиперпараллелепипеде). Далее будем предполагать, что $0 < \mu_k(X) < \infty$ (μ_k — мера Лебега) и структура множества X настолько простая, насколько это необходимо для построения того или иного алгоритма.

Решая задачу поиска x^* , на практике обычно ограничиваются любой точкой из множества

$$A_\delta = A(\delta) = \{x \in X \mid f(x) \geq f^* - \delta\}$$

или множества

$$B_\varepsilon(x^*) = B(\varepsilon) = \{x \in X \mid \|x - x^*\| \leq \varepsilon\}.$$

Здесь $\varepsilon > 0$ представляет собой допустимую погрешность при отыскании максимума по аргументу, а $\delta > 0$ — по значению функции.

Сложность задачи поиска x^* во многом зависит от размерности множества X (одномерность экстремальной задачи, если $k = 1$ и многомерность, если $k > 1$) и количества локальных максимумов функции f (униmodalность функции, если известно, что локальный максимум один, и многоэкстремальность, если их количество неизвестно или известно, но больше одного).

Методы одномерного поиска изучены значительно лучше, чем многомерного. Это стимулировало разработку способов сведения многомерных экстремальных задач к одномерным (см. [88]).

Использование априорной информации о функции f играет первостепенную роль при построении эффективных алгоритмов глобальной оптимизации. Известны следующие основные типы задания априорной информации:

- а) $\mathcal{F} \subset C(X)$;
- а') $\mathcal{F} \subset C^1(X)$;
- а'') $\mathcal{F} \subset C^2(X)$;
- б) $\mathcal{F} \subset \text{Lip}(X, M) = \{f \mid \|f(x) - f(x')\| \leq M\|x - x'\| \text{ для всех } x, x' \in X\}$, $0 < M < \infty$;
- б') $\mathcal{F} \subset \text{Lip}(X, \rho, M) = \{f \mid \|f(x) - f(x')\| \leq M\rho(x, x') \text{ для всех } x, x' \in X\}$, $0 < M < \infty$, ρ — некоторая метрика на X ;
- в) $\mathcal{F} \subset \{f \in C^1(X) \mid \nabla f \in \text{Lip}(X, M)\}$.

в') $\mathcal{F} \subset \{f \in C^1(X) \mid \|\nabla f\| \leq C < \infty\}$.

г) $\mathcal{F} = \{f(x, \theta), \theta \in \Theta\}$, Θ — множество неизвестных параметров.

г') $\mathcal{F} = \{f(x, \omega), \omega \in \Omega\}$, где (Ω, \mathcal{A}, P) — некоторое вероятностное пространство, т. е. \mathcal{F} — множество реализаций некоторого случайного процесса (поля).

д) В \mathcal{F} входят только функции, имеющие ровно l локальных максимумов.

д') В \mathcal{F} входят только функции, имеющие не более чем l локальных максимумов.

е) \mathcal{F} — множество функций, которые могут быть достаточно хорошо аппроксимированы функциями из некоторого класса \mathcal{F}_0 .

ж) Для всех функций из \mathcal{F} условия гладкости типа а) — г) выполнены в некоторой окрестности x^* .

з) Для любой $f \in \mathcal{F}$ точка $x^* = \arg \max_{x \in X} f(x)$ единственна и существует такое $\varepsilon_0 > 0$, что при любом ε ($0 < \varepsilon \leq \varepsilon_0$) множество A_ε односвязно и $\mu(A_\varepsilon) > 0$, где μ — некоторая вероятностная мера на (X, \mathcal{B}) .

и) $\mathcal{F} \subset \{f \mid f = f_1 + f_2, \text{ для } f_1 \text{ выполняется д) с } l=1, \|f_2\| \leq \varepsilon\}$, где $\varepsilon > 0$ — заданное число; $\|\cdot\|$ — некоторая норма.

к) $\mathcal{F} \subset \{f \mid f = f_1 + f_2, \text{ где } f_1 \text{ зависит не более чем от } l \ (l \ll k) \text{ переменных, } \|f_2\| \leq \varepsilon\}$.

л) $\mathcal{F} \subset \{f \mid \mu_k(A_\varepsilon) / \mu_k(X) \geq \delta\}$, где $\delta > 0$ — заданное число.

м) Для любой $f \in \mathcal{F}$ существуют такие числа $\varepsilon_1 > 0, \beta_1 > 0, c_1 > 0$, что при всех $x \in B(\varepsilon_1)$ выполнено $c_1 \|x - x^*\|^{\beta_1} \leq f^* - f(x)$.

м') Для любой $f \in \mathcal{F}$ существуют такие числа $\varepsilon_2 > 0, \beta_2 > 0, c_2 > 0$, что при всех $x \in B(\varepsilon_2)$ выполнено $f^* - f(x) \leq c_2 \|x - x^*\|^{\beta_2}$.

н) $\mathcal{F} \subset \{f \mid x^* = \arg \max_{x \in X} f(x) \text{ — внутренняя точка } X\}$.

Априорных предположений а) — а') недостаточно для построения эффективных алгоритмов поиска x^* ; обычно они используются вместе с предположениями типа д), д'), и), к) и часто (неявно) считаются выполненными при применении ряда эвристических алгоритмов, значительная часть которых содержится в [5]. Множество алгоритмов (некоторые из них приведены в п. 3) разработано в предположении б); для этого случая известны оптимальные (в минимаксном смысле) и близкие к оптимальным алгоритмы, но при $n > 1$ эти алгоритмы чрезмерно громоздки и ниже не описаны. Отметим, что константа Липшица функции $\psi(x, \xi)$ (см. § 1) иногда легко может быть оценена (например, для случая полиномиальной регрессии на отрезке с $\lambda \in C^1(x)$).

Интенсивно разрабатываемые в последние годы байесовы [12], [65] и информационно-статистические [88] алгоритмы основаны на предположении г').

Предположения д), д') при малых l (вместе с а) — в') или ж)) и е) благоприятствуют применению алгоритмов локального поиска (см. п. 2). Отметим, что для функции $\psi(x, \xi)$ (см. алгоритм 4) предположения д') и д) часто могут быть проверены. Отметим также, что в ряде работ по планированию эксперимента

неоправдано часто (т. е. при больших l) используются алгоритмы, основанные на предположении $д'$).

При выполнении $и$) могут быть построены эффективные алгоритмы (см. п. 14.4.4), основанные на поиске максимума сглаженной функции; поскольку градиент сглаженной функции вычисляется со случайной ошибкой, задача сводится к задаче планирования экстремальных экспериментов.

Предложение $к$) может стать основой для создания алгоритмов глобального поиска, включающих в себя редукцию размерности путем выделения существенных переменных с помощью серии отсеивающих экспериментов (см. [98] и гл. 15).

Предположения $ж$), $з$), $л$), $н$) являются типичными для методов глобального случайного поиска (см. пп. 4, 5). При построении алгоритмов случайного поиска, основанных на оценивании f^* , кроме того, иногда используется $г$), а также $м$), $м'$) и некоторые предположения о функции распределения

$$F(t) = \int_{f(x) < t} \dots \int P(dx), \quad (5)$$

где $P(dx)$ — некоторое вероятностное распределение на (X, \mathcal{B}) (см. п. 5).

Методы поиска глобального экстремума для случая, когда X состоит из конечного числа точек, описаны в специальной литературе. В указанном случае могут быть использованы и некоторые из методов, описанных ниже (в особенности в п. 4).

2. Алгоритмы локального поиска и равномерно распределенные последовательности в многоэкстремальных задачах. Методы поиска локального экстремума (см. § 3) используются при поиске глобального различными способами. Первый способ заключается в уточнении местоположения точки x^* и значения f^* путем локального подъема из точки x_* , являющейся приближением к x^* и полученной с помощью одного из методов глобального поиска. Это соответствует априорному предположению о принадлежности x_* той окрестности x^* , в которой функция f унимодальная и достаточно гладкая (см. $ж$), $з$). Естественной представляется комбинация методов локального поиска с методами глобального случайного поиска (см. пп. 4, 5) и методами, основанными на предположениях $е$), $и$) (т. е. x_* находится как точка максимума аппроксимирующей или сглаженной функции).

Второй способ, в основе которого лежат априорные предположения $д$), $д'$), состоит в последовательном отыскании локальных максимумов. Даже если l невелико, обычно трудно определить, из каких начальных точек нужно производить локальный поиск, чтобы не попасть в уже найденные локальные максимумы. Частичным решением служит следующий полуэвристический прием: найденные точки локальных максимумов окружаются некоторыми окрестностями, которые считаются запрещенными для новых начальных точек. Локальный поиск можно начинать из таких точек $x_i \in X$ ($i = 1, 2, \dots$), что последовательность $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$ рав-

номерно распределена в X , т. е. для всех $A \in \mathcal{B}$ справедливо $\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} S_N(A) = \mu_k(A)$, где $S_N(A)$ — количество точек x_i с номерами $1 \leq i \leq N$, принадлежащих A .

Часто в качестве начальных точек для локального поиска выбираются независимые реализации равномерно распределенного в X случайного вектора или ограничиваются теми, в которых значение f относительно велико. При этом из разных начальных точек можно проводить разное количество итераций локального поиска в зависимости от перспективности этих точек. Если решение о том, сколько итераций локального подъема проводить из той или иной начальной точки, делается независимо от аналогичных решений, принимаемых для других точек, то получаемые в результате применения такого метода точки можно считать независимыми реализациями случайного вектора с некоторым распределением $P(dx)$ на (X, \mathcal{B}) , и для оценивания значения f^* в этом случае могут быть использованы результаты, сформулированные в п. 5. Очевидно, что если алгоритм локального поиска релаксационный, то указанный метод сходится при тех же предположениях, при которых сходится метод простого случайного бросания точек в X (см. п. 4).

При априорном предположении о том, что в пределах шара некоторого радиуса $\rho > 0$ функция f меняется незначительно, естественно на первом этапе поиска выбирать сетку с хорошими свойствами равномерной распределенности. Наилучшая из таких сеток состоит из центров сфер, наиболее плотно упакованных в X , но в многомерном случае на практике не используется вследствие чрезмерной сложности построения.

Количественной характеристикой равномерной распределенности набора точек $\Xi_N = \{x_1, \dots, x_N\}$ в предположении $X = D_{(k)} = \{x = (x^{(1)}, \dots, x^{(k)}) \mid 0 \leq x^{(i)} \leq 1, i = 1, \dots, k\}$ является $D_N(\Xi_N)$ — отклонение от равномерности:

$$D_N(\Xi_N) = \sup_B |S_N(B) - N\mu_k(B)|,$$

где супремум берется по всем множествам вида

$$B = [0, b_1] \times \dots \times [0, b_k], \quad 0 < b_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, k.$$

Для кубических сеток $\Xi_N^{(0)}$ (иногда их называют *равномерными*), состоящих из $N = M^k$ точек с координатами

$$\left(\frac{i_1 + 1/2}{M}, \frac{i_2 + 1/2}{M}, \dots, \frac{i_k + 1/2}{M} \right),$$

$$i_1, i_2, \dots, i_k = 0, 1, \dots, M - 1, \quad D_N(\Xi_N^{(0)}) = \frac{1}{2} N^{1-k-1}.$$

Эта величина минимальна при $k = 1$, при больших же k отклонение от равномерности D_N для кубической сетки очень велико. Так, при $k \geq 3$ кубическая сетка хуже с точки зрения равномерной распределенности, чем случайная сетка $\Xi_N^{(1)}$, состоящая из

N независимых реализаций случайного вектора, равномерно распределенного в $D_{(k)} = X$, поскольку с любой вероятностью, меньшей единицы, $D_N(\Xi_N^{(1)}) = O(\sqrt{N})$ ($N \rightarrow \infty$). Среди известных сеток при $k > 1$ отклонение от равномерности асимптотически (при $N \rightarrow \infty$) минимально по порядку для параллелепипедальных сеток (см. п. 3.5.4) и сеток, состоящих из первых N членов Λ_{τ} -последовательностей $\Xi_N^{(2)}$ и последовательностей Холтона (см. [86]). Для этих сеток $D_N(\Xi_N) = O(\ln^k N)$ ($N \rightarrow \infty$). Λ_{τ} -последовательности обладают следующим свойством: если $N = 2^{r+}$ ($r = 1, 2, \dots$), то по крайней мере один элемент $\Xi_N^{(2)}$ содержится в произвольном гиперкубе из $X = D_{(k)}$ объема 2^{-r} . Поэтому, если алгоритм поиска x^* состоит в вычислении f в точках сетки $\Xi_N^{(2)}$, то часто (в зависимости от \mathcal{F}) можно указать значение N , необходимое для нахождения x^* с заданной точностью.

Случайные сетки $\Xi_N^{(2)}$ используются из соображений простоты построения, в случаях, когда трудности при построении в X сетки с более хорошими свойствами равномерности оказываются практически непреодолимыми, а также потому, что после вычисления f в точках $\Xi_N^{(2)}$ и применения аппарата теории вероятностей можно извлечь дополнительную информацию об f и x^* .

Сетки с хорошими свойствами равномерной распределенности особенно полезны при решении задач многокритериальной оптимизации: на основе вычисления значений критериев в точках сетки может быть построено приближение к множеству Парето (см. [87]).

3. Метод ломаных и его обобщения. Методы одномерного поиска являются наиболее изученными вследствие их относительной простоты и широкой применимости. Наиболее известен метод ломаных, а многие другие являются его обобщениями или модификациями.

Пусть $\mathcal{F} = \text{Lip}(X, L)$, $X = [a, b]$ ($-\infty < a < b < \infty$). Положим

$$x_0 = \frac{a+b}{2}, \quad x_{n+1} = \text{Arg} \max_{x \in [a,b]} \varphi_n(x), \quad n = 0, 1, \dots,$$

где $\varphi_n(x) = \min_{i=0,1,\dots,n} \{f(x_i) + L|x - x_i|\}$. Этим определяется метод ломаных, который сходится со скоростью $|x_n - x^*| = O(n^{-1})$. Функции $\varphi_n(x)$ ($n = 0, 1, \dots$) — кусочно-линейные ($\varphi_n \geq \varphi_{n+1} \geq f$, $n = 0, 1, \dots$), и на каждом шаге метода ломаных решается относительно простая задача поиска максимума кусочно-линейной функции. Недостатком этого метода является то, что с ростом номера шага n растет объем требуемой памяти и вычислительной работы, необходимых для вычисления x_{n+1} . От этого недостатка в значительной степени свободен следующий метод:

$$x_0 = a + h/2, \quad x_{n+1} = x_n + h + (f_n^* - f(x_n))/L,$$

$$n = 0, 1, \dots, n_0 - 2,$$

$$x_{n_0} = \min \{b, x_{n_0-1} + h + (f_{n_0-1}^* - f(x_{n_0-1}))/L\},$$

где $h = 2\epsilon/L$, $f_n^* = \max \{f(x_0), \dots, f(x_n)\}$, $x_{n_0} \geq b - h/2$. Очевидно, что $\text{Arg } f_{n_0}^* \in A(\epsilon)$. В худшем для данного метода случае, когда $f(x)$ — неубывающая функция ($f(x_n) = f_n^*$), метод последовательного перебора превращается в метод пассивного перебора на равномерной сетке

$$x_0 = a + h/2, \quad x_{n+1} = x_n + h, \quad x_{n_0} = \min \{b, x_0 + (n_0 - 1)h\}, \\ n = 0, \dots, n_0 - 1,$$

и для нахождения x^* с точностью ϵ потребуется в этом случае $N_1 = \lceil L(b-a)/(2\epsilon) \rceil$ вычислений значений функции f . В лучшем для метода случае, когда f — убывающая линейная функция, понадобится всего $N_2 = 1 + \lceil \log_2 L(b-a)/(2\epsilon) \rceil$ вычислений функции f .

Метод ломаных, очевидно, обобщается на многомерный случай. Единственное изменение в алгоритме состоит в том, что

$$\varphi_n(x) = \min_{i=0, \dots, n} \{f(x_i) + L\|x - x_i\|\}, \quad n = 0, 1, \dots$$

Конечно, искать на каждом шаге минимум многоэкстремальной вспомогательной функции $\varphi_n(x)$ — задача непростая, и поэтому указанный метод может быть рекомендован для использования только в тех случаях, когда трудоемкость вычисления функции f велика.

Недостатком рассмотренных методов является то, что при их построении должна быть точно известна константа Липшица L функции f , чего на практике обычно не бывает. Поэтому L приходится оценивать в ходе оптимизации. В многомерном случае поступают следующим образом: пусть проведено $n+1$ вычислений функций f в точках x_0, \dots, x_n ; тогда положим

$$L_n = r_n \max_{\substack{i, j=0, \dots, n \\ i < j}} \left\{ \frac{|f(x_i) - f(x_j)|}{\|x_i - x_j\|} \right\},$$

где $r_n > 1$ — числа, выбираемые из эвристических соображений. В одномерном случае процедура оценки L несколько проще: точки x_0, \dots, x_n переупорядовываются в порядке возрастания: $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, после чего полагают

$$L_n = r_n \max_{1 \leq i \leq n} \frac{|f(x_i) - f(x_{i-1})|}{x_i - x_{i-1}}.$$

Отметим, что если оценка константы Липшица оказывается заниженной, то исчезает достоверность результатов (точка максимума может быть пропущена), а если завышена, то сильно возрастает трудоемкость методов.

Указанную процедуру оценки константы Липшица включает в себя следующий алгоритм одномерного ($n=1$, $X=[a, b]$) глобального поиска максимума, являющийся одним из наиболее удачных примеров использования так называемого *информационно-статистического подхода*.

Полагаем $x_0 = a$, $x_1 = b$. Предположим, что есть точки x_0, \dots, x_n , перенумерованные в порядке возрастания так, что $x_0 < x_1 < \dots < x_n$. Новая точка x_{n+1} выбирается следующим образом:

$$x_{n+1} = \frac{x_i + x_{i-1}}{2} + \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{2m_n},$$

где

$$m_n = r \max_{1 < j < n} \frac{|f(x_j) - f(x_{j-1})|}{x_j - x_{j-1}}, \quad i = \arg \max_{1 < j < n} R(j),$$

$$R(j) = m_n(x_j - x_{j-1}) + \frac{(f(x_j) - f(x_{j-1}))^2}{m_n(x_j - x_{j-1})} + 2(f(x_j) + f(x_{j-1})).$$

Если $f \in \mathcal{F} = \text{Lip}(X, L)$ и при достаточно больших n выполняется $m > 2L$ (этого можно достичь за счет выбора r), то множество предельных точек для последовательности, получаемой описанным способом, совпадает со множеством точек глобального максимума функции f .

4. Глобальный случайный поиск. Если размерность k пространства X достаточно велика, а класс функций \mathcal{F} широк (что обычно имеет место в экстремальных задачах планирования экспериментов), то нелегко найти удовлетворительный метод решения задачи поиска глобального экстремума. В указанных случаях, по крайней мере на первом этапе поиска, часто используют один из описанных ниже алгоритмов глобального случайного поиска.

Рассмотрим лишь алгоритмы случайного поиска, принадлежащие к классу алгоритмов «независимого глобального поиска» (в терминологии [82]), поскольку именно они наилучшим образом зарекомендовали себя в задачах оптимизации различных критериев, встречающихся при оптимальном планировании экспериментов. Алгоритмы типа «блуждающего глобального поиска» и «поиска с самообучением» по существу представляют собой модификации локальных алгоритмов и при решении существенно многоэкстремальных задач большой размерности часто оказываются практически беспомощными.

Простейший из рассматриваемых алгоритмов состоит в том, что все точки x_0, x_1, \dots представляют собой независимые реализации случайного вектора, имеющего некоторое распределение $P_0(dx)$ на (X, \mathcal{B}) . За приближение к x^* принимается $x_{(N)}^* = \text{Arg} \max_{x_i, i=0, \dots, N-1} f(x_i)$, где N — число полученных точек. Выбор

распределения $P_0(dx)$ зависит от априорной информации о положении x^* . При отсутствии этой информации обычно выбирают $P_0(dx)$ равномерным на X и предполагают выполнение л). Очевидно, что если $P_0(A_\varepsilon) > 0$ при всех $\varepsilon > 0$, то $f(x_{(N)}^*)$ сходится по вероятности к f^* при $N \rightarrow \infty$. Из оценок скорости этой сходимости

сти следует, что $P\{x_{(N)}^* \in A_\varepsilon\} \geq p$ при

$$N \geq N(p, \varepsilon) = [(\ln(1-p))/\ln(1-P_0(A_\varepsilon))]^+, \quad \varepsilon > 0, \quad 0 < p < 1,$$

и $P\{x_{(N)}^* \in A_\varepsilon\} < p$ при $N < N(p, \varepsilon)$. Таким образом, если $P_0(A_\varepsilon)$ мало (это соответствует тому, что велика требуемая точность или априорная информация о положении x^* либо мала, либо неточна), то для того, чтобы обеспечить достаточно большую вероятность попадания $x_{(N)}^*$ в A_ε , нужно провести чрезмерно большое количество вычислений функции f . Отметим, что использовать в качестве x_0, x_1, \dots точки последовательностей с хорошими свойствами равномерности (см. п. 2) более выгодно, чем независимые реализации равномерно распределенного в X случайного вектора.

Эффективность приведенного алгоритма низка, поскольку в нем не используется информация, получаемая в ходе поиска. Чаще применяют алгоритмы, в которых указанная информация используется. Эти алгоритмы состоят из нескольких этапов, на каждом из которых некоторое число раз моделируются распределения, конструируемые на основе полученной на предыдущих этапах информации таким образом, чтобы область поиска постепенно сужалась вокруг точек, признаков наиболее перспективными. Общая схема таких алгоритмов состоит в следующем.

Алгоритм 6.

1) Выбираем распределение $P_0(dx)$ на (X, \mathcal{B}) и полагаем $i = 0$.

2) Моделируем N_i раз распределение $P_i(dx)$, получаем точки $x_1^{(i)}, \dots, x_{N_i}^{(i)}$.

3) На основе вычисления значений функции f в точках $x_j^{(i)}$ ($j = 1, \dots, N_i, t = 0, \dots, i$) определяем распределение $P_{i+1}(dx)$ на (X, \mathcal{B}) .

4) Заменяем i на $i + 1$ и переходим к 2).

Здесь N_i ($i = 0, 1, \dots$) — заданные натуральные числа. Вычисления прекращают либо по истечении вычислительных ресурсов, либо при достижении заданной точности, которая может быть оценена на основе результатов п. 5.

Наиболее известны варианты алгоритма 6, в которых $P_i(dx)$ ($i \geq 1$) имеют вид

$$c(z_i) \beta_i^{-h} \varphi(\beta_i^{-1}(x - z_i)) \mu_h(dx), \quad (6)$$

где $c(z_i) = \left[\int_X \beta_i^{-h} \varphi(\beta_i^{-1}(x - z_i)) \mu_h(dx) \right]^{-1}$, φ — плотность распределения

в \mathbf{R}^h , $\int_{\mathbf{R}^h} x \varphi(x) \mu_h(dx) = 0$, $\beta_i > 0$, z_i — некоторые

точки из X или случайные векторы с распределением на (X, \mathcal{B}) . Уменьшение β_i с ростом i соответствует сужению области поиска. В алгоритмах из [82] φ -плотность нормального или равно-

мерного на некотором гиперпараллелепипеде распределения,

$$z_i = \arg \max_{\substack{x_j^{(t)} \\ j=1, \dots, N_i \\ t=0, \dots, i-1}} f(x_j^{(t)}).$$

Сходимость алгоритма 6 может быть основана на том, что любая точка из X — точка сгущения последовательности $x_j^{(i)}$ ($j=1, \dots, N_i$, $i=0, 1, \dots$). Достаточным условием этого является:

А) Для любого $\varepsilon > 0$ выполнено $\sum_{i=0}^{\infty} N_i \min_{x \in X} P_i(D_\varepsilon(x)) = \infty$, где $D_\varepsilon(x) = \{z \in \mathbb{R}^k \mid \|x - z\| \leq \varepsilon\}$.

Пусть $P_i(dx)$ выбраны в виде (6), где $\text{supp } \varphi = \mathbb{R}^k$. Тогда, если $\beta_i \geq \beta > 0$, то А) выполнено. Для некоторых видов φ А) выполнено при произвольных $z_i \in X$ и при $\beta_i \rightarrow 0$ ($i \rightarrow \infty$). В частности, если φ распадается в произведение одномерных плотностей распределения Лапласа и $\beta_i \geq c_1 / \ln(c_2 \ln i)$ или нормального распределения и $\beta_i \geq c_1 (\ln(c_2 \ln i))^{-1/2}$, то выполнено А). Здесь $i \geq 2$, c_1, c_2 — любые, $c_1 > 0$, $c_2 \geq 1$.

Далее в этом пункте будем предполагать, что для всех $x \in X$ выполнено $f(x) \geq c_3 > 0$ и в алгоритме 6

$$P_{i+1}(dx) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{f(x_j^{(i)})}{\sum_{i=1}^{N_i} f(x_i^{(i)})} Q_i(x_j^{(i)}, dx), \quad (7)$$

где $Q_i(y, dx)$ — заданные переходные вероятности (т. е. измеримые функции на X по первому аргументу и вероятностные меры на (X, \mathcal{B}) по второму).

Для моделирования распределений (7) нужно сначала получить независимую реализацию j случайной величины τ , принимающей значения на множестве $\{1, 2, \dots, N_i\}$ с вероятностями

$$P\{\tau = l\} = f(x_l^{(i)}) \left(\sum_{i=1}^{N_i} f(x_i^{(i)}) \right)^{-1},$$

а затем получить независимую реализацию случайного вектора с распределением $Q_i(x_j^{(i)}, dx)$.

Рассматриваемый алгоритм является математической моделью ряда методов, используемых для решения практических задач (в том числе и для вычисления дискретных оптимальных планов). Суть этой модели — моделирование последовательности вероятностных распределений, сходящейся для широкого класса функций к предельному распределению, сосредоточенному в x^* .

Отметим, что приведенные ниже результаты могут быть обобщены на случай, когда X — произвольное компактное метрическое пространство, а функция f вычисляется со случайной ошибкой [31].

Ниже приведены результаты о поведении $R(i, N_{i-1}, dx)$ — безусловных распределений случайных векторов, независимыми ре-

лизациями которых являются $x_j^{(i)}$ ($j = 1, \dots, N_i$). При этом, кроме з), используются следующие предположения:

Б) Существует такое $\varepsilon > 0$, что f непрерывна на B_ε (ср. с ж)).

В) μ_h (мера Лебега) абсолютно непрерывна относительно μ .

Г) Для всех $i = 0, 1, \dots$ выполнено $Q_i(z, dx) = q_i(z, x) \mu(dx)$, $\sup_{x, z \in X} q_i(z, x) \leq M_i < \infty$.

Д) При любом $z \in X$ выполнено $Q_i(z, dx) \Rightarrow \varepsilon_z(dx)$ ($i \rightarrow \infty$) (\Rightarrow — слабая сходимость, $\varepsilon_z(dx)$ — распределение, сосредоточенное в точке z).

Е) Для любого $\varepsilon > 0$ существуют такие $\delta > 0$ и натуральное i_0 , что $R_i(B_\varepsilon) \geq \delta$ при всех $i \geq i_0$.

Ж) μ абсолютно непрерывна относительно P_0 .

З) $\mu_h(X) > 0$, $\mu = [\mu_h(X)]^{-1} \mu_h|_{\mathcal{A}}$, $Q_i(z_i, dx)$ определены по (6), φ — непрерывная симметричная плотность распределения в \mathbb{R}^h , $\int_{\mathbb{R}^h} \|x\| \varphi(x) \mu_h(dx) < \infty$, $\beta_i > 0$ ($i = 0, 1, \dots$).

И) Для всех $z \in X$ выполнено $Q_i(z, \{x \in X | f(x) \leq f(z)\}) = 0$ ($i = 0, 1, \dots$).

Если выполнено Г), то для всех $i = 0, 1, \dots$ при $N_i \rightarrow \infty$ распределения $R(i+1, N_i; dx)$ сходятся к пределу $R_{i+1}(dx)$ и

$$R_{i+1}(dx) = \left[\int_X f(z) R_i(dz) \right]^{-1} \int_X f(z) R_i(dz) Q_i(z, dx),$$

где $R_0(dx) = P_0(dx)$.

Теорема 2. Если выполнены условия Б) — Е) и З), то $R_i(dx) \Rightarrow \varepsilon_{x^*}(dx)$ ($i \rightarrow \infty$); при выполнении Б) — Д), З) ($N_i \rightarrow \infty$) и условия Е) для распределений $R(i, N_{i-1}; dx)$ имеет место $R(i, N_{i-1}; dx) \Rightarrow \varepsilon_{x^*}(dx)$ ($i \rightarrow \infty$).

В основе доказательства теоремы 2 лежит следующий факт: Если выполнены условия Б), В) и З), то

$$f^i(x) \mu(dx) \left(\int_X f^i(z) \mu(dz) \right)^{-1} \Rightarrow \varepsilon_{x^*}(dx), \quad i \rightarrow \infty.$$

Для двух наиболее важных (определяемых в З), И)) способов выбора $Q_i(z, dx)$ можно указать простые условия (т. е. не являющиеся условиями типа Е)), достаточные для сходимости рассматриваемого алгоритма.

Теорема 3. Пусть выполнены условия Б), з), а также либо В) — Д), Ж), И), либо З), $\sum_{i=0}^{\infty} \beta_i < \infty$. Тогда $R_i \Rightarrow \varepsilon_{x^*}$ ($i \rightarrow \infty$), и существует такая последовательность чисел N_0, N_1, \dots , что $R(i+1, N_i, dx) \Rightarrow \varepsilon_{x^*}(dx)$ ($i \rightarrow \infty$).

Отметим, что для моделирования случайного вектора η с распределением (при фиксированном z_i) $Q(z_i, dx)$, определенным по (7), нужно получить независимую реализацию ξ случайного вектора, распределенного с плотностью φ , проверить принадлеж-

ность $z_i + \beta_i \zeta \in X$ (в противном случае получить новую реализацию ζ) и принять $\eta = z_i + \beta_i \zeta$.

По-видимому, результаты могут улучшаться при использовании квазислучайных чисел, хотя этот вопрос требует дополнительного исследования.

5. Оценивание экстремума в алгоритмах случайного поиска. На i -м ($i=0, 1, \dots$) шаге алгоритма 6 имеем выборку $\Xi_i = \{x_1^{(i)}, \dots, x_{N_i}^{(i)}\}$ значений случайного вектора ζ_i , имеющего распределение $P_i(dx)$. В данном пункте показано, как по этой выборке может быть оценено значение $f_Z^* = \max_{x \in Z} f(x)$ и построен доверительный интервал для f_Z^* , где Z — любое множество из \mathcal{R} , в котором содержится достаточно большое количество элементов Ξ_i . Это может служить как дополнительным источником получаемой об f и x^* на каждом шаге алгоритма 6 информации, так и основой для построения ряда специальных вариантов алгоритма 6, наиболее естественным (при отсутствии дополнительной априорной информации об x^*) из которых является следующая.

Алгоритм 7.

1) Полагаем $i=0, X_0 = X$.

2) Определяем распределение $P_i(dx)$ как равномерное на множестве X_i .

3) Моделируем N_i раз распределение $P_i(dx)$, получаем Ξ_i .

4) Полагаем $f_i^* = \max_{\substack{t=1, \dots, N_i \\ j=0, \dots, i}} f(x_t^{(j)})$.

5) Представляем X_i в виде $X_i = \bigcup_{j=1}^{k_i} Z_{ij}$, где $k_i \geq 1, Z_{ij}$ ($j = 1, \dots, k_i$) — измеримые односвязные подмножества (не обязательно непересекающиеся), в каждое из которых попало достаточное для проведения статистических выводов количество точек из Ξ_i .

6) В каждом из Z_{ij} ($j=1, \dots, k_i$) находим b_{ij} — верхнюю доверительную границу уровня $1 - \gamma_i$ ($\gamma_i > 0$) для значения $f_{ij}^* = \max_{x \in Z_{ij}} f(x)$.

7) Полагаем $X_{i+1} = \bigcup_{j=1}^{k_i} Z_{ij}^*$, где

$$Z_{ij}^* = \begin{cases} Z_{ij}, & \text{если } b_{ij} \geq f_i^*, \\ \emptyset & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

8) Заменяем i на $i+1$ и переходим к 2).

Иногда (что менее строго) вместо доверительных границ b_{ij} вычисляют оценки a_{ij} для f_{ij}^* , а в качестве X_{i+1} выбирают множество Z_{ij_0} , где $j_0 = \arg \max_{j=1, \dots, k_i} a_{ij}$.

Поскольку статистические выводы о значениях f_z^* на каждом шаге алгоритма 6 и для всех $Z \in \mathcal{B}$ делаются однотипно, будем предполагать, что $Z = X$, имеется N независимых реализаций ζ_1, \dots, ζ_N случайного вектора ζ с распределением $P(dx)$ на (X, \mathcal{B}) и требуется сделать статистические выводы о величине f^* .

Положим $\theta = f(\zeta)$, $\theta_i = f(\zeta_i)$ ($i = 1, \dots, N$). Очевидно, что f^* — верхняя граница сосредоточения случайной величины θ , функцией распределения которой является (5). Иногда (например, [64]) для оценки f^* используется следующий подход: предполагают, что функция распределения (5) известна с точностью до нескольких параметров (см. г)); эти параметры, а вместе с ними и f^* , оцениваются по выборке $\theta_1, \dots, \theta_N$ с помощью стандартных методов математической статистики. Недостатки этого подхода: 1) адекватность параметрической модели априори обычно не очевидна (особенно при малом числе параметров); 2) за счет того, что оцениваются «лишние» параметры, точность оценки f^* понижается, а количество необходимой вычислительной работы увеличивается; 3) построение доверительного интервала для f^* обычно затруднительно.

Ниже приводятся результаты относительно более естественного пути оценивания f^* , основанные на следующем факте теории экстремальных порядковых статистик.

Предположим, что о функции распределения $F(v)$ случайной величины θ известно, что для некоторого f^* ($-\infty < f^* < \infty$) выполняется $F(f^*) = 1$ и $F(v) < 1$ при $v < f^*$. Пусть выполнено следующее условие.

К) Функция $V(v) = 1 - F(f^* - v^{-1})$ ($v > 0$) правильно меняется на бесконечности с некоторым показателем ν ($0 < \nu < \infty$) (т. е. $\lim_{v \rightarrow \infty} [V(tv)/V(v)] = t^{-\nu}$ при всех $t > 0$).

Тогда функция распределения $F(v)$ принадлежит области притяжения предельного закона максимальных значений с функцией распределения

$$\Phi_\nu(u) = \begin{cases} \exp\{-(-u)^\nu\}, & u < 0, \\ 1, & u \geq 0. \end{cases}$$

В частности, при выполнении условия К) имеет место равенство

$$\lim_{N \rightarrow \infty} F^N(j_z^* + (j_z^* - a_N)u) = \Phi_\nu(u),$$

где $a_N = \inf\{v \in R^1 \mid 1 - F(v) \leq 1/N\}$.

Если значение параметра ν неизвестно, то набор параметров (ν, f^*, a_N) может быть стандартным образом (см. гл. 1) оценен по выборке из независимых порядковых статистик выборок объема N из заданного распределения. Ясно, что количество необходимой для такого оценивания вычислительной работы (в том числе количество вычислений f) велико. Покажем, что во многих случаях значение параметра ν может быть точно определено на основе априорных сведений о поведении f вблизи точки x^* .

Теорема 4. 1) Пусть $\mu_k(X) > 0$, пусть выполнены условия
 з) для $\mu = [\mu_k(X)]^{-1} \mu_k |_{\mathcal{B}}; m); m')$; $\beta_1 = \beta_2 = \beta$; $K)$; и пусть
 л) существуют такие числа $\varepsilon_2 > 0$, $c_4 > 0$, $c_5 > 0$, что при всех ε
 $(0 < \varepsilon \leq \varepsilon_2)$

$$c_4 \leq P\{B(\varepsilon)\} / \mu_k\{D(\varepsilon)\} \leq c_5.$$

Тогда $\nu = k/\beta$.

2) Если $f = \sum_{i=1}^l f_i$ где f_i — измеримые функции с носителем
 $X_i \subset X$, $P(X_i \cap X_j) = 0$, $P(X_i) > 0$ ($i \neq j$, $i, j = 1, \dots, l$) и для функции
 распределения $F_i(u) = [P(X_i)]^{-1} \int_{f_i(x) < u, x \in X_i} P(dx)$ выпол-

няется условие $K)$ с параметром ν_i , то для функции распределе-

ния (5) условие $K)$ выполняется с параметром $\nu = \min\{\nu_1, \dots, \nu_l\}$.
 Сделаем ряд замечаний относительно условий теоремы 4.
 В классе тех функций f , у которых точка глобального супремума
 x^* единственна, условия з), л) выполнены, например, если f
 непрерывна в исходной окрестности x^* , меры P и μ_k эквивалентны
 и либо выполнено п), либо для любого ε ($0 < \varepsilon \leq \varepsilon_2$) имеем
 $c_4 \leq \mu_n\{B(\varepsilon)\} / \mu_n\{D(\varepsilon)\}$. Условия м), м') характеризуют поведение
 f вблизи x^* . Обычно априорной информации об f достаточно для
 того, чтобы определить β_1 и β_2 . Так, если производные функции
 f в x^* по всем допустимым направлениям существуют и не равны
 0, то $\beta_1 = \beta_2 = 1$ (указанный случай возникает, в частности, при
 использовании алгоритма 7, когда глобальные максимумы дости-
 гаются на границах множества Z_{ij}); а если f дважды дифферен-
 цируема в некоторой окрестности x^* , $\nabla f(x^*) = 0$ и матрица
 $\nabla^2 f(x^*)$ невырождена, то $\beta_1 = \beta_2 = 2$. Отметим, что в этих двух
 случаях условие $K)$ выполнено, если выполнено п). Зная пара-
 метр ν , можно по выборке $\theta_1, \dots, \theta_N$ из независимых реализаций
 случайной величины θ с функцией распределения $F(v)$ (для ко-
 торой, естественно, выполнено условие $K)$ оценивать параметр
 f_Z^* и строить для него доверительные интервалы следующим
 образом.

Обозначим за $\theta_{(i)}$ ($i = 1, \dots, N$) порядковые статистики, по-
 лученные из выборки $\theta_1, \dots, \theta_N$ ($\theta_{(1)} \leq \theta_{(2)} \leq \dots \leq \theta_{(N)}$), и пусть
 $m > 1$ — некоторое число, которое мало по сравнению с N . Оцен-
 ку для f_Z^* будем строить в следующем виде: $\hat{\eta}_{N,m} = \sum_{i=1}^m b_i \theta_{(N-m+1)}$,
 используя для построения оценки только m наибольших поряд-
 ковых статистик. Для состоятельности $\hat{\eta}_{N,m}$ необходимо выпол-
 нение условия $b_1 + \dots + b_m = 1$. Если это условие и условие $K)$
 выполнены, то при $N \rightarrow \infty$, $m/N \rightarrow 0$

$$(f_Z^* - \theta_N)^{-2} E(\hat{\eta}_{N,m} - f_Z^*) \rightarrow \gamma_m(\nu) = \sum_{i,j=1}^m \lambda_{ij} b_i b_j = b^T A b,$$

где

$$\lambda_{ij} = \Gamma(2\nu^{-1} + i)\Gamma(\nu^{-1} + j)[\Gamma(\nu^{-1} + i)\Gamma(j)]^{-1} \quad (j \leq i), \quad \lambda_{ji} = \lambda_{ij},$$

$$\Lambda = (\lambda_{ij})_{i,j=1}^m, \quad \lambda = (1, 1, \dots, 1)^T, \quad b = (b_1, \dots, b_m)^T.$$

Поэтому оптимальная в рассматриваемом классе оценка будет иметь вектор коэффициентов $b^* = \arg \min_{b: b^T \lambda = 1} b^T \Lambda b = (\lambda^T \Lambda^{-1} \lambda)^{-1} \times$
 $\times \Lambda^{-1} \lambda$, при этом $(b^*)^T \Lambda b^* = (\lambda^T \Lambda^{-1} \lambda)^{-1}$.

В частном случае при $\nu = 1$

$$b_1^* = 1 + \frac{1}{m}, \quad b_2^* = b_3^* = \dots = b_{m-1}^* = 0, \quad b_m^* = -\frac{1}{m},$$

$$\gamma_m(1) = \frac{m+1}{m}.$$

Простой, но достаточно близкой к оптимальной, является оценка

$$\hat{\eta}_{N,m} = \left\{ 1 + \frac{2\nu - 1}{m} \right\} \theta_{(N)} - \frac{2\nu - 1}{m} \theta_{(N-m+1)}.$$

Если выполнено условие К), то при всех $m \geq 1$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{f_Z^* - \theta_{(N)}}{\theta_{(N)} - \theta_{(N-m)}} \leq v \right\} = 1 - \left\{ 1 - \left(\frac{v}{1-v} \right)^v \right\}^m.$$

Отсюда следует, что ($0 < \alpha < 1$)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \{ f_Z^* \leq \theta_{(N)} + \{ (1 - \alpha^{1/m})^{-1/\nu} - 1 \}^{-1} (\theta_{(N)} - \theta_{(N-m)}) \} = 1 - \alpha,$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \{ f_Z^* \geq \theta_{(N)} + \{ [1 - (1 - \alpha)^{1/m}]^{-1/\nu} - 1 \}^{-1} (\theta_{(N)} - \theta_{(N-m)}) \} = 1 - \alpha.$$

Основываясь на этих соотношениях, можно построить асимптотические доверительные интервалы для f_Z^* . Так, асимптотический односторонний доверительный интервал уровня $1 - \alpha$ для f_Z^* есть

$$[\theta_{(N)}, \theta_{(N)} + \{ (1 - \alpha^{1/m})^{-1/\nu} - 1 \}^{-1} (\theta_{(N)} - \theta_{(N-m)})].$$

При больших N ($N \rightarrow \infty$) и маленьких m ($m/N \rightarrow 0$) средняя длина этого интервала приближенно равна

$$[\{ (1 - \alpha^{1/m})^{-1/\nu} - 1 \} (f_Z^* - a_N) [\Gamma(\nu^{-1} + m + 1) / \Gamma(m + 1) - \Gamma(\nu^{-1} + 1)].$$

Отсюда вытекает, в частности, следующий результат. Возьмем в качестве меры точности алгоритма случайного равномерного бросания точек в X (см. п. 4) среднюю длину одностороннего доверительного интервала для f_Z^* уровня $1 - \alpha$ ($\alpha > 0$) и предположим, что выполнено К) с $\nu = k/\beta$. Тогда число испытаний N , необходимое для того, чтобы асимптотическая длина

этого интервала равнялась ε , должно расти с ростом размерности пространства k со скоростью.

$$N \sim c_0 c^k, \quad k \rightarrow \infty,$$

где

$$c = \{[\psi(m+1) - \psi(m)] / [-\varepsilon \ln(1 - \alpha^{1/m})]\}^{1/\beta},$$

$\psi(a) = \Gamma'(a)/\Gamma(a) - \psi$ -функция, $c_0 > 0$ — некоторая константа, зависящая от f .

§ 5. Оптимальные решения многокритериальных задач

Реальные постановки задач оптимального планирования экспериментов обычно многокритериальны, а один компромиссный критерий строится на основе дополнительных соображений. Исследователя часто интересует не один план, а множество планов, каждый из которых нельзя улучшить равномерно по всем критериям. Для построения такого множества планов или для нахождения некоторых элементов этого множества важны свойства оптимальных решений и признаки их оптимальности. Основные факты об этих свойствах и признаках приведены в настоящем параграфе.

1. Основные понятия. В многокритериальных задачах оптимизации сравнение решений по предпочтению осуществляется при помощи заданных на X функций (критериев)

$$f_i: X \rightarrow \mathbf{R}^1, \quad i = 1, \dots, m.$$

Векторным критерием называется вектор-функция

$$f(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))^T.$$

Решением называется любой элемент x из множества X .

Оценкой называется любой вектор y из множества

$$Y = f(X) = \{y \in \mathbf{R}^m \mid y = f(x), x \in X\}.$$

Множество $Y = f(X)$ называется *множеством достижимых оценок*.

Функция $\Phi: \mathbf{R}^1 \rightarrow \mathbf{R}^1$ называется *допустимым преобразованием* критерия f_i , если функция $\Phi(f_i)$ вновь оказывается критерием, измеряющим то же свойство. С каждым критерием связывают *множество допустимых преобразований* Φ и говорят, что этот критерий имеет шкалу типа Φ .

Распространенным является случай измерения в шкале интервалов:

$$\Phi_x = \{\Phi: \mathbf{R}^1 \rightarrow \mathbf{R}^1 \mid \Phi(u) = au + b, a > 0, b \in \mathbf{R}^1\}.$$

Критерий называется *количественным*, если он имеет шкалу $\Phi \in \Phi_x$.

Значения количественных критериев имеет смысл сравнивать, указывая, насколько или во сколько раз одно значение больше другого.

Порядковой шкалой называется шкала

$$\Phi_{\Pi} = \{ \varphi: \mathbf{R}^1 \rightarrow \mathbf{R}^1 \mid \varphi(u) > \varphi(v) \quad \forall u, v \in \mathbf{R}^1, \bar{u} > v \},$$

т. е. множество монотонно возрастающих функций.

Критерии, имеющие порядковую шкалу, называются *качественными*.

Значения качественного критерия имеет смысл сравнивать только по отношениям «больше», «меньше», «равно».

Бинарные отношения $\cong, \supseteq, >, \supset$ определяются на \mathbf{R}^m следующим образом $\{a_i = (a_i(1), \dots, a_i(m))^T, i = 1, 2\}$:

$$a_1 \cong a_2 \Leftrightarrow a_1(i) \supseteq a_2(i) \quad \forall i = 1, \dots, m;$$

$$a_1 \supseteq a_2 \Leftrightarrow a_1 \cong a_2, a_1 \neq a_2;$$

$$a_1 > a_2 \Leftrightarrow a_1(i) > a_2(i) \quad \forall i = 1, \dots, m;$$

$a_1 \supset a_2 \Leftrightarrow a_1 = a_2$ или $a_1(i) > a_2(i)$ хотя бы для одного $i \in \{1, 2, \dots, m\}$. Здесь символ « \Leftrightarrow » обозначает: «если, и только если».

Критерий f_i ($i = 1, \dots, m$) независим по предпочтению \cong от критериев f_j ($j = 1, \dots, m, j \neq i$), если для любых четырех оценок a_1, \dots, a_4 из Y вида

$$a_1 = (y_1, \dots, y_{i-1}, s, y_{i+1}, \dots, y_m)^T,$$

$$a_2 = (y_1, \dots, y_{i-1}, t, y_{i+1}, \dots, y_m)^T,$$

$$a_3 = (y'_1, \dots, y'_{i-1}, s, y'_{i+1}, \dots, y'_m)^T,$$

$$a_4 = (y'_1, \dots, y'_{i-1}, t, y_{i+1}, \dots, y_m)^T$$

из соотношения $a_1 \cong a_2$ всегда следует $a_3 \cong a_4$.

Задачи, в которых все критерии независимы по предпочтению \cong , называются *многокритериальными задачами максимизации*.

Отношения $\cong, \supseteq, >, \supset, =$, определенные на множестве Y достижимых оценок, естественным образом порождают аналогичные по смыслу отношения $\underset{=f}{>}, \underset{=f}{>}, \underset{=f}{>}, \underset{=f}{=}$ в множестве решений X : так, $x_1 \supseteq x_2$ тогда и только тогда, когда $f(x_1) \supseteq f(x_2)$.

Векторные критерии f и g эквивалентны по отношению $\underset{=f}{>}$, если порождаемые ими отношения $\underset{=f}{>}$ и $\underset{=g}{>}$ совпадают (т. е. $f(x) \supseteq f(x')$, если и только если $g(x) \supseteq g(x')$).

Аналогично определяется эквивалентность по отношению $\underset{=f}{>}, =, \underset{=f}{>}, \underset{=f}{=}$.

С помощью приведенных ниже утверждений иногда можно решать вопрос об эквивалентности векторных критериев и строить новые критерии, эквивалентные данному.

А. Если критерии $f = (f_1, \dots, f_m)^T$ и $g = (g_1, \dots, g_m)^T$ эквивалентны по \geq , то эквивалентны в том же смысле и критерии $(f_1, \dots, f_m, \psi)^T$ и $(g_1, \dots, g_m, \psi)^T$, где $\psi: X \rightarrow \mathbf{R}^1$ — произвольная функция.

Б. Пусть $h: f_i(X) \rightarrow \mathbf{R}^1$ — возрастающая функция; тогда критерии $(f_1, \dots, f_m)^T$ и $(f_1, \dots, f_{i-1}, h(f_i), f_{i+1}, \dots, f_m)^T$ эквивалентны по \geq .

В. Если $\varphi: Y \rightarrow \mathbf{R}^1$ — неубывающая по \geq функция, то критерии $(f_1, \dots, f_m)^T$ и $(f_1, \dots, f_m, \varphi(f_1, \dots, f_m))^T$ эквивалентны по \geq .

Оценка $y_* \in Y$ называется *максимальной по \geq (по $>$)* относительно Y , если не существует такого $y \in Y$, что $y \geq y_*$ ($y > y_*$). *Эффективной (оптимальной по Парето) оценкой* называется оценка, максимальная по \geq .

Множеством Парето называется множество $P(Y)$ эффективных оценок.

Слабо эффективной (оптимальной по Слейтеру) оценкой называется оценка, максимальная по $>$. Множество слабо эффективных оценок будет обозначаться через $S(Y)$.

Поскольку всякая эффективная оценка является слабо эффективной, имеет место $P(Y) \subset S(Y)$.

Для случая, когда все критерии количественные, можно ввести еще два определения эффективности.

Собственно эффективной (оптимальной по Джозффриону) оценкой называется эффективная оценка $y_* = (y_*(1), \dots, y_*(m))^T$, для которой существует такое $\theta > 0$, что для любых $y = (y(1), \dots, y(m))^T \in Y$, $i = 1, \dots, m$, для которых $y(i) > y_*(i)$, и некоторого такого $j \in \{1, \dots, m\}$, что $y(j) < y_*(j)$, выполняется неравенство

$$(y(i) - y_*(i)) / (y_*(j) - y(j)) \leq \theta.$$

Из этого определения следует, что если решение эффективно, но не является собственно эффективным, то можно таким образом перейти к другому эффективному решению, что потери по всем тем критериям, значения которых уменьшаются, являются малыми более высокого порядка по сравнению с приращением по крайней мере по одному из критериев.

Подлинно эффективной (оптимальной по Борвейну) называется эффективная оценка y_* , для которой

$$T(Y_0, y_*) \cap \mathbf{R}_+^m = \{0\},$$

где $Y_0 = Y - \mathbf{R}_+^m = \{z \in \mathbf{R}^m \mid z = y - r, y \in Y, r \in \mathbf{R}_+^m\}$,

$$\mathbf{R}_+^m = \{z \in \mathbf{R}^m \mid z \geq 0\}, \quad T(A, y) = \left\{ z = \lim_{i \rightarrow \infty} t_i (y_i - y) \right\},$$

где $\{i_j\}$ — произвольная последовательность неотрицательных чисел, $\{y_j\}$ — произвольная последовательность точек из A , сходящаяся к $y \in \bar{A}$; $T(\bar{A}, y)$ — касательный конус к множеству $A \subseteq \mathbb{R}^m$ в точке $y \in \bar{A}$.

Множество собственно эффективных оценок будет обозначаться через $G(Y)$, а подлинно эффективных — через $B(Y)$.

Между различными типами эффективности существует следующая взаимосвязь:

$$G(Y) \subseteq B(Y) \subseteq P(Y) \subseteq S(Y).$$

Аналогично множествам эффективных оценок в X определяются множества эффективных решений; все утверждения о множествах оценок с точностью до замены $A \subseteq Y$ на $f^{-1}(A) \subseteq X$ справедливы для множеств решений.

В силу своей естественности на практике обычно используются решения, оптимальные по Парето.

2. Свойства слабо эффективных оценок. Предположим, что

$$y_* = (y_*(1), \dots, y_*(m))^T \in Y, \\ y_*(i) > 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

Оценка y_* слабо эффективна тогда и только тогда, когда существует такой вектор:

$$\mu \in M = \left\{ \mu = (\mu(1), \dots, \mu(m))^T \in \mathbb{R}^m \mid \mu(i) > 0, \sum_{i=1}^m \mu(i) = 1 \right\},$$

что

$$y_* = \arg \max_{y \in Y} [\min_i \mu(i) y(i)].$$

Для слабо эффективной оценки $y_* \in Y$ можно положить $\mu = \mu_*$, где $\mu_* \in M$ — вектор с компонентами

$$\mu_*(i) = \lambda_* / y_*(i), \quad i = 1, \dots, m, \quad \lambda_* = \left[\sum_{j=1}^m [y_*(j)]^{-1} \right]^{-1};$$

в этом случае $\max_{y \in Y} \min_i \mu_*(i) y(i) = \lambda_*$.

Достаточными условиями слабой эффективности являются следующие:

1) Пусть $\varphi: Y \rightarrow \mathbb{R}^1$ — возрастающая по $>$ функция. Тогда любая ее точка максимума на Y слабо эффективна.

2) Пусть $\varphi_j: Y \rightarrow \mathbb{R}^1$ ($j = 0, \dots, n$), φ_0 — возрастающая по $>$ функция, а φ_i ($i = 1, \dots, n$) — неубывающие по $>$ функции, t_1, \dots, t_n — произвольные фиксированные числа,

$$Z = \{y \in Y \mid \varphi_i(y) \geq t_i, \quad i = 1, \dots, n\}. \quad (8)$$

Тогда оценка

$$y_* = \arg \max_{y \in Z} \varphi_0(y) \quad (9)$$

слабо эффективна.

3. Свойства эффективных оценок. Необходимыми и достаточными условиями эффективности оценки $y_* \in Y$ являются следующие:

а) Для каждого $i \in \{1, \dots, m\}$ справедливо равенство

$$y_*(i) = \max_{y \in Z_i} y(i),$$

где $Z_i = \{y \in Y \mid y(j) \geq y_*(j), j \in \{1, \dots, m\} \setminus \{i\}\}$,

б) $\max_{(y,z) \in T} \sum_{i=1}^m z(i) = 0$, где $T = \{(y, z) \in Y \times \mathbf{R}_+^m \mid y - z \hat{=} y_*\}$.

в) Существует такая вектор-функция $\mu: Y \rightarrow M$, что для всех $y \in Y$ справедливо неравенство $\langle \mu(y), y_* \rangle \geq \langle \mu(y), y \rangle$ (где $\langle \cdot, \cdot \rangle$ — скалярное произведение):

На практике часто используют следующий факт. Пусть функция $\varphi: Y \rightarrow \mathbf{R}^1$ не убывает по \geq , y_* — точка ее максимума на Y . Для эффективности y_* достаточно выполнения одного из следующих условий: φ возрастает по \geq на Y ; y_* — единственная точка максимума φ на Y . Например, любая точка максимума функции $\sum_{i=1}^m \mu(i) y(i)$ ($\mu(i) > 0, i = 1, \dots, m$) эффективна.

Полезно также следующее достаточное условие эффективности.

Пусть φ_j ($j = 0, 1, \dots, n, n \geq 1$) — неубывающие по \geq на Y функции. Тогда для эффективности точки (9), где множество Z определено в (8), достаточно выполнения одного из двух следующих условий: φ_0 возрастает по \geq на Z ;

y_* — единственная точка максимума φ_0 на Z .

4. Свойства собственно и подлинно эффективных оценок. Оценка $y_* \in Y$ собственно эффективна в том и только в том случае, если существует набор векторов $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n \in M$ ($n \leq m$), обладающий следующим свойством: для каждой оценки $y \in Y$ найдется номер $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, при котором выполняется неравенство $\langle \mu_i, y_* \rangle \geq \langle \mu_i, y \rangle$.

В частности, если все $\mu(i) > 0$ ($i = 1, \dots, m$), то любая точка максимума функции $\sum_{i=1}^m \mu(i) y(i)$ на множестве Y является собственно эффективной оценкой.

Если множество Y замкнуто и существует такой вектор $\mu \in M$, что $\langle \mu, y \rangle \leq \text{const} < \infty$ для всех $y \in Y$, то $G(Y) = B(Y)$. В частности, если Y — компакт, то $G(Y) = B(Y)$.

5. Условия оптимальности решений для вогнутых задач. В пп. 2—4 приведены некоторые необходимые и достаточные условия оптимальности оценок; эти условия одновременно являются условиями оптимальности соответствующим оценкам решений без каких-либо предположений о структуре множества X и свойствах вектор-функции f . Для случая, когда X — выпуклое множество, а вектор-функция f вогнута, можно сформулировать еще несколько условий оптимальности решений.

Пусть X выпукло, f вогнута. Для слабой эффективности точки $x_* \in X$ необходимо и достаточно, чтобы существовал вектор

$$\mu \in \bar{M} = \left\{ \mu = (\mu(1), \dots, \mu(m))^T \in \mathbb{R}_+^m \mid \sum_{i=1}^m \mu(i) = 1 \right\},$$

при котором

$$\langle \mu, f(x_*) \rangle = \max_{x \in X} \langle \mu, f(x) \rangle. \quad (10)$$

Пусть X выпукло, f строго вогнута. Для эффективности точки $x_* \in X$ необходимо и достаточно, чтобы существовал такой вектор $\mu \in \bar{M}$, что выполняется (10).

Пусть X выпукло, f вогнута. Для собственной эффективности точки $x_* \in X$ необходимо и достаточно, чтобы существовал вектор $\mu \in \bar{M}$, при котором имеет место (10).

Если множество $Y = \mathbb{R}_+^m$ выпукло, то $B(Y) = G(Y)$ (в частности, это справедливо, если X выпукло, а f вогнута).

Пусть вектор-функции f и $h = (h_1, \dots, h_n)^T$ определены на выпуклом множестве $D \subset \mathbb{R}^n$ и вогнуты,

$$X = \{x \in D \mid h_1(x) \geq 0, \dots, h_n(x) \geq 0\},$$

выполняется условие регулярности Слейтера (т. е. существует такая точка $x \in D$, что $h(x) > 0$). Тогда для слабой эффективности (собственной эффективности) точки $x_* \in X$ необходимо и достаточно, чтобы существовали такие векторы $\mu \in \bar{M}$ ($\mu \in M$) и $\lambda_* \in \mathbb{R}_+^n$, что пара (x_*, λ_*) является седловой точкой функции Лагранжа $\langle \mu, f(x) \rangle + \langle \lambda, g(x) \rangle$.

6. О численном построении множеств оптимальных решений.

Для численного построения множества Парето часто используется следующий подход [87]. В множестве X выбирается некоторая сетка E_N (см. п. 4.2) с хорошими свойствами равномерной распределенности (например, П-сетка), вычисляются значения вектор-функции f в точках этой сетки, после чего за конечное число сравнений строится множество Парето на E_N , являющееся (при больших N и естественных предположениях на f и X) приближением к множеству Парето относительно X .

Можно использовать также различные варианты следующего эвристически понятного алгоритма: на первой итерации одну или несколько точек множества Парето получаем как точки максимума некоторых компромиссных критериев (например, вида $\langle \mu, f(x) \rangle$, $\mu \in M$); имея на n -й итерации несколько точек множества Парето, строим S_n — линейную оболочку этих точек, после чего детерминированно или случайно (вид закона распределения должен зависеть от S_n) получаем еще несколько точек в X , вычисляем значения f в этих точках, проверяем с помощью приведенных в пп. 2—5 результатов, принадлежат ли эти точки множеству Парето, и переходим к следующей итерации. Приближением к множеству Парето служит S_n .

Литература к § 5 : [73, 87].

ГЛАВА 5

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

§ 1. Основные понятия последовательного планирования

1. Предпосылки применения последовательного планирования. Априорные предположения об описании объекта регрессионной моделью, зависящей от параметров $\theta \in \mathbb{R}^m$, редко приводят к линейным моделям. В нелинейных регрессионных моделях численный поиск оценок параметров обычно значительно сложнее, чем в линейных. Статистические свойства и оптимальность оценок удается установить обычно лишь асимптотически при росте объема выборки (см. § 1.3). Асимптотическая матрица ковариаций оценок МНК (или ИРДЖИНА для F -модели) зависит от неизвестных параметров, что делает, вообще говоря, невозможным оптимизацию некоторого функционала от нее сразу для любого $\theta \in \mathbb{R}^m$ статическим планом. Эти обстоятельства, а также итерационный характер вычисления типовых оценок, например МНК, подсказывают целесообразность последовательного планирования соответствующих экспериментов и рекуррентного вычисления оценок параметров через оценки предыдущего шага и следующее измерение. Они экономят память ЭВМ и объем вычислений, а в некоторых случаях и число экспериментов.

Простейшее последовательное планирование заключается в выборе момента остановки N наблюдений в зависимости от результатов измерений. Его называют *последовательным оцениванием*, если целью эксперимента является оценка параметров, и последовательным анализом в случае проверки гипотез о выборке. Последнему посвящены пионерские работы А. Вальда. В случае двух простых гипотез доказано, что вальдовский последовательный критерий отношения вероятностей минимизирует средний объем выборки одновременно при справедливости обеих гипотез. По сравнению со статическим планом среднее число экспериментов может быть в несколько раз меньше при тех же малых вероятностях ошибок. Экономия экспериментов при последовательном оценивании может достигаться в байесовской постановке, где есть априорное распределение $\alpha(\cdot)$ для неизвестного параметра θ и

минимизируется $\int E_{\theta} N d\alpha(\theta)$ (предполагается, что для рассматриваемой задачи $E_{\theta} N$ есть суммируемая функция θ). Если, например, информационная матрица $M(\theta, \xi)$ нормированного плана на ξ и функционал Φ от нее таковы, что функция $\Phi(M(\theta, \xi))$ зависит от θ , то можно истратить малый относительно общего числа экспериментов объем выборки на предварительную (состоятельную) оценку $\hat{\theta}_0$ для θ и выбрать количество дополнительных измерений в зависимости от $\Phi(M(\hat{\theta}_0, \xi))$. Подобную стратегию можно сделать асимптотически оптимальной для общего последовательного планирования (см. § 4). Можно показать, что на втором этапе такой стратегии последовательный план асимптотически не имеет преимущества перед статическим.

Отметим, что, справившись с помощью последовательного плана с зависимостью $M(\theta, \xi)$ от θ , мы получили новое затруднение. Измерения теперь нельзя трактовать как независимые, и необходимо найти матрицу ковариаций оценок МНК параметров регрессионной модели, что делается асимптотически для больших выборок и регулярных семейств последовательных планов в §§ 2, 3.

2. Схема последовательного планирования. Смысл последовательного планирования заключается в следующем. На каждом шаге экспериментатор может принять решение о завершении наблюдений — в этом случае он принимает решение об изучаемом параметре распределения измерений на основе всех проведенных экспериментов. Если измерения решено продолжить, то в зависимости от результатов предыдущих экспериментов выбирается управление для следующего измерения (точка проведения нового эксперимента). Так продолжается до конца наблюдений.

Формально последовательное планирование описывается следующей схемой. Пусть X, Y, Θ, Λ — полные сепарабельные метрические пространства, $\mathcal{B}_X, \dots, \mathcal{B}_{\Lambda}$ — σ -алгебры борелевских подмножеств, P_{θ}^x — семейство мер на пространстве Y , μ — σ -конечная мера на Y , P_{θ}^x абсолютно непрерывны взаимно и относительно меры μ , p_{θ}^x — плотность P_{θ}^x по мере μ . Здесь $\theta \in \Theta$ — неизвестный параметр, $x \in X$ — управление, выбираемое статистиком. Последовательная стратегия s есть тройка правил (N, U, Q) соответственно остановки, управления и принятия решения, определяемых последовательностями измеримых функций v_n, x_n, d_n , заданных на Y^n со значениями соответственно в $\{0, 1\}, X, \Lambda$ ($N = \min\{n | v_n(y_1, \dots, y_n) = 1\}$). *Последовательным планом* ξ называется пара (N, U) . Функция d_n определена на $\{y_1, \dots, y_n | N = n\}$. Выражение $Q = \lambda$ означает, что для некоторого n имеем $d_n(y_1, \dots, y_n) = \lambda$.

Управление x_{n+1} определено на множестве

$$C_n = \{y_1, \dots, y_n | N > n\} \subset Y^n;$$

Следующее измерение y_{n+1} имеет условное распределение, опре-

деляемое соотношением для $B \in \mathcal{B}_Y$:

$$P(y_{n+1} \in B | y_1, \dots, y_n) = P_{\theta}^{x_{n+1}}(B)$$

почти наверное (п. н.) при $(y_1, \dots, y_n) \in C_n$ и $y_{n+1} = y_n$, $x_{n+1} \dot{=} x_n$ в противном случае. Каждой стратегии s и распределению для x_1 соответствует мера на $Y^\infty \times X_1$ обозначаемая P_{θ}^s . Если $\inf_{\theta \in \Theta} P_{\theta}(N < \infty) = 1$, то все эти меры взаимно абсолютно непрерывны. Для некоторой измеримой функции потерь w на $\Theta \times \Lambda$ $R(\theta, s) = E_{\theta}^s w(\theta, Q)$ обозначает риск стратегии s .

Например, если $\Theta = \bigcup_{i=1}^m \Theta_i$, $\Theta_i \cap \Theta_j = \emptyset$ при $i \neq j$, $\Lambda = \{1, \dots, m\}$, $w(\theta, \lambda)$ — индикатор события $\theta \in \Theta_{\lambda}$ (т. е. $w(\theta, \lambda) = 1$ при $\theta \in \Theta_{\lambda}$ и $w = 0$ в противном случае), то получаем задачу дискриминации m гипотез, причем $R(\theta, s)$ есть вероятность ошибки дискриминации. Если $\Theta = \Lambda = \mathbb{R}^m$ и $w(\theta, \lambda) = \|\theta - \lambda\|^2$, то имеем задачу оценивания с квадратичным риском.

При обобщении на рандомизованные стратегии будет предполагаться, что функции v_n , x_n , d_n дополнительно зависят от случайных величин (соответственно τ_n , η_n , ζ_n), которые независимы от \mathcal{F}_{n-1} , где σ -алгебра \mathcal{F}_n порождена $\{\mathcal{F}_{n-1}, y_n, \tau_n, \eta_n, \zeta_n\}$. Через $E_{\theta}^x f(x, y_1)$ обозначено $\int_Y f(x, y) P_{\theta}^x(dy)$.

3. Обобщение тождества Вальда. Фундаментальная роль далее принадлежит обобщениям двух тождеств А. Вальда на последовательное планирование, установленным с помощью теории мартигалов.

Сопоставим каждому последовательному плану ξ вероятностную меру $\pi_{\theta}^s(dx)$ на (X, \mathcal{B}_X) , определяемую для любого $A \in \mathcal{B}$ формулой

$$\pi_{\theta}^s(A) = (E_{\theta}^s N)^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} P_{\theta}^s \{N \geq n, x_n \in A\}.$$

Мера π_{θ}^s называется *нормированным статическим планом*, отвечающим последовательному плану ξ , или просто *нормированным планом*. Нормированный план показывает, как часто в среднем в последовательном плане используется то или иное управление.

Пусть функция $g: X \times Y \rightarrow \mathbb{R}^h$ такова, что

$$\sup_{\theta \in X} E_{\theta}^x \|g(x, y_1)\| < \infty,$$

а план ξ удовлетворяет условию $\sup_{\theta} E_{\theta}^s N < \infty$. Тогда

$$E_{\theta}^s \sum_{i=1}^N g(x_i, y_i) = E_{\theta}^s N \int_X g_{\theta}^x \pi_{\theta}^s(dx), \quad (1)$$

где $g_{\theta}^x = E_{\theta}^x g(x, y_1)$.

Наглядный смысл тождества (1) таков: среднее значение функции от последовательно спланированных (с помощью плана ξ) измерений можно вычислять интегрированием по нормированному плану π_θ^s .

В задачах оценивания с квадратичным риском полезно следующее тождество. Если $\sup_{\Theta \times X} E_\theta^x (g_i(x, y_1))^2 < \infty$ для

$$g_i : X \times Y \rightarrow R^1 \quad (i = 1, 2, \dots),$$

то

$$E_\theta^s \left[\sum_{i=1}^N (g_i(x_i, y_i) - g_{i,\theta}^{x_i}) \right]^2 = E_\theta^s \sum_{i=1}^N D[g_i(x_i, y_i) | \mathcal{F}_{i-1}]. \quad (2)$$

Если, кроме того, $D[g_i(x_i, y_i) | \mathcal{F}_{i-1}] = D(x_i) (P_\theta^s - \text{п. н.})$, то правая часть (2) равна $E_\theta^s N \int_X D(x) \pi_\theta^s(dx)$ и

$$D \sum_{i=1}^N g_i(x_i, y_i) = E_\theta^s N \int D(x) \pi_\theta^s(dx) \text{ при } D_\theta^s \sum_{i=1}^N g_{i,\theta}^{x_i} = 0.$$

§ 2. Нижние границы для квадратичного риска оценивания с известной регулярной плотностью

Известная нижняя граница Крамера — Рао (см. § 1.1) для квадратичного риска оценивания без изменений переносится (при подходящих условиях регулярности) как на последовательное оценивание, так и на последовательное планирование.

1. Последовательное планирование. При известном семействе плотностей p_θ измерений y любой стратегии s для решения Q на $\Theta = \Lambda \subset R^m$ существует плотность распределения, которую обозначим через $q_\theta(\cdot)$ ($\theta \in \Theta$). Пусть выполнены условия:

а) $\sup_\theta E_\theta^s N < +\infty$; $\sup_{\Theta \times X} \|I_p^x(\theta)\| < \infty$, $I_p^x(\theta) > 0$ для всех $x \in X$,

где

$$I_p^x(\theta) = E_\theta^x (\nabla \ln p_\theta^x(y_1) \nabla^T \ln p_\theta^x(y_1))$$

есть матрица информации Фишера.

б) Для некоторого $r > 0$ имеем $\sup_{\theta \in B(r)} E_\theta^s \|Q\|^2 < \infty$, где

$$B(r) = \{\theta \in \Theta \mid \|\theta - \theta^*\| < r\}.$$

в) Выполнены условия регулярности а), б), в) из [35], с. 93, для плотности меры P_θ^s по $P_{\theta^*}^s$, обеспечивающие существование и непрерывность градиента $\nabla b = \nabla b(\theta)$ смещения $b = b(\theta) = E_\theta^s Q - \theta ((\nabla b)_{ij} = \partial b_i / \partial \theta_j, i, j = 1, \dots, m)$.

Для выполнения условия в) при справедливости а) достаточно, чтобы в $B(r)$ была непрерывно дифференцируема плотность меры P_θ^x , а также $E_\theta^s N$, $I_p^x(\theta)$, π_θ^s (последняя — в слабой топологии). Тогда для любых $l \in \mathbb{R}^m$, $\theta \in B(r)$ справедливо

$$E_\theta^s [l^T (Q - \theta)]^2 \geq l^T \left[bb^T + (I_m + \nabla b) \left(E_\theta^s N I_p^{\pi_\theta^s}(\theta) \right)^{-1} (I_m + \nabla b) \right] l, \quad (3)$$

где $I_p^\pi(\theta) = \int_X I_p^x(\theta) \pi(dx)$.

Часто оказывается полезным асимптотическое упрощение неравенства (3), заключающееся в следующем. Пусть s_t ($t = 1, 2, \dots$) — семейство стратегий, удовлетворяющих при каждом t условиям а)–в) и условию

$$r) \liminf_{t \rightarrow \infty} \inf_{\theta \in B(r)} n_t(\theta) = \infty, \text{ где } n_t(\theta) = E_\theta^{s_t} N, \quad r > 0, \quad J(t, \theta) = I_p^{\pi_\theta^{s_t}}(\theta)$$

равномерно по t непрерывны при $\theta \in B(r)$, $\lim_{t \rightarrow \infty, \theta \rightarrow \theta^*} J(t, \theta) = J(\theta^*) > 0$.

Тогда для любого $l \in \mathbb{R}^m$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow \infty} R_t^r \geq l^T (J(t, \theta^*))^{-1} l, \quad (4)$$

где $R_t^r = \sup_{\theta \in B(r)} n_t(\theta) E_\theta^s [l^T (Q - \theta)]^2$.

Сравнительная с (3) простота применения (4) связана с тем, что в правой части (4) отсутствует ∇b . Асимптотически оптимальной процедурой оценивания (в (4) достигается равенство) является, в частности, метод максимального правдоподобия, если выполнено условие, следующее за неравенством (7).

2. Нижняя граница для последовательного оценивания. Пусть плотность измерений $p_\theta(y)$ дифференцируема по θ в $B(r)$ для некоторого $r > 0$ и для μ — почти всех y , а $I_p(\theta)$ непрерывна и невырождена в $B(r)$. Тогда для любой последовательности моментов остановки N , удовлетворяющих условию $\sup_{\theta \in B(r)} E_\theta N \leq n < \infty$, и любого $a > 0$ справедливо

$$\lim_{r \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{\theta \in B(r)} n^{a/2} E_\theta |Q - \theta|^a \geq \sqrt{\frac{|I_p(\theta)|}{(2\pi)^m}} \int_{\mathbb{R}^m} \|y\|^a \exp \left\{ -\frac{1}{2} y^T I_p(\theta) y \right\} dy,$$

Это неравенство представляет собой обобщение неравенства (2) из § 1.1.

§ 3. Нижние границы для квадратичного риска последовательной стратегии оценивания параметров регрессии

1. *F*-модель. Схема оценивания обобщенной регрессионной модели *F* определяется условиями (см. § 1.4)

$$\begin{aligned} E_{\theta}^s(y_i | \mathcal{F}_{i-1}) &= \eta(x_i, \theta), \\ D_{\theta}^s(y_i | \mathcal{F}_{i-1}) &= V(x_i, \theta), \quad i = 1, \dots, N \quad (P_{\theta}^s - \text{п. н.}). \end{aligned} \quad (5)$$

Далее предполагается, что выполнено условие

а) функции $\eta(x, \theta)$, $f(x, \theta) = \partial \eta(x, \theta) / \partial \theta$, $\partial f / \partial \theta_i$ ($i = 1, \dots, m$), $V(x, \theta)$ и $\nabla V(x, \theta)$ принадлежат $C(X \times \Theta)$, причем $\inf_{X \times \Theta} V(x, \theta) > 0$.

Семейство последовательных планов ξ_t ($t = 1, 2, \dots$) называется *регулярным*, если выполнены условия:

б) $n_t(\theta) = E_{\theta}^{s_t} N < \infty$, $n_t(\theta) / n_t(\theta') \rightarrow 1$ при $\theta' \rightarrow \theta \in \Theta$ и $t \rightarrow \infty$,
 $\inf_{\theta \in B(r)} P_{\theta}^{s_t}(N > k) \rightarrow 1$ при $t \rightarrow \infty$ для любого $k > 0$.

в) Соответствующие планам ξ_t нормированные планы $\pi_{\theta}^{s_t}$ равномерно по $\theta \in \Theta$ слабо сходятся при $t \rightarrow \infty$ к предельным планам π_{θ} , непрерывным по θ в слабой топологии.

г) Информационная матрица предельного нормированного плана

$$M(\theta) = \int_X f(x, \theta) [V(x, \theta)]^{-1} [f(x, \theta)]^T \pi_{\theta}(dx)$$

невырождена при всех $\theta \in \Theta$.

В следующем утверждении приведена нижняя граница для квадратичного риска оценок из класса

$$\mathcal{L} = \left\{ S_{\theta}(y_1, \dots, y_N) = \theta + T_{\theta}(y_1, \dots, y_N) \sum_{i=1}^N A_{\theta}(x_i) \times \right. \\ \left. \times (y_i - \eta(x_i, \theta)) \right\},$$

где θ — заданное начальное приближение параметра; $A(x_i): X \rightarrow \mathbf{R}^m$; $T(y_1, \dots, y_N)$ — матрица $m \times m$; $A(x_i)$ и $T(y_1, \dots, y_N)$ удовлетворяют некоторым условиям регулярности.

Если выполнены условия а)–г), то для всех $s \in \mathcal{L}$ и любого $l \in \mathbf{R}^m$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \sup_{\theta \in B(r/\sqrt{n_t(\theta^*)})} n_t(\theta^*) R_{\theta}^t \geq l^T [M(\theta^*)]^{-1} l, \quad (6)$$

где $R_{\theta}^t = E_{\theta^*}^{s_t} [l^T (S_{\theta}(y_1, \dots, y_N) - \theta^*)]^2$.

Обозначим через $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\eta, V)$ класс всех распределений P_{θ}^x на \mathbf{R}^1 :

$$\int_{\mathbf{Y}} y P_{\theta}^y(dy) = \eta(x, \theta), \quad \int_{\mathbf{Y}} (y - \eta(x, \theta))^2 P_{\theta}^x(dy) \leq V(x, \theta).$$

Пусть семейство последовательных планов ξ_t регулярно и при любом $P_\theta^x \in \mathcal{K}$ выполнены условия а) — в) из § 3 для семейства стратегий s_t и б) из § 2 для произвольного решения Q . Тогда для любого $l \in \mathbb{R}^m$ справедливо

$$\sup_{P_\theta^x \in \mathcal{K}} \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \sup_{\theta \in B(r/\sqrt{n_t(\theta^*)})} n_t(\theta) E_\theta^{s_t} [l^T (Q - \theta)]^2 \geq \geq l^T [M(\theta^*)]^{-1} l. \quad (7)$$

Если $\sup_{\theta \in \Theta} n_t^{-2}(\theta) D_\theta^s \sum_{i=1}^N g(x_i) \rightarrow 0$ для $g \in C(X)$ при $t \rightarrow \infty$ и семейство последовательных планов ξ_t регулярно, выполнено а), равномерно ограничены 5 абсолютных моментов распределений P_θ^x , то для первой итерации $\theta^{(1)}$ ИРДЖИНА (см. § 1.3) при начальном приближении $\theta^{(0)}$ — оценке МНК с единичной весовой матрицей, $\sqrt{n_t}(\theta^*)(\theta^{(1)} - \theta^*)$ асимптотически нормально с параметрами $(0, M^{-1}(\theta^*))$, и, следовательно, $\theta^{(1)}$ обращает в равенства неравенства (6) и (7) и процедура оценивания ИРДЖИНА асимптотически оптимальна.

Таким образом, точность асимптотически оптимальных оценок при фиксированном нормированном плане π характеризуется нормированной информационной матрицей $M(\theta^*) = M(\pi, \theta^*)$, и задача построения оптимального последовательного плана состоит в нахождении такого плана ξ^* , что ему соответствует

$$\pi^* = \arg \min_{\pi} \Psi[M(\pi, \theta^*)], \quad (8)$$

где Ψ — некоторый выпуклый функционал, заданный на множестве информационных матриц (см. гл. 2).

2. Линейная регрессионная модель. Схема оценивания для линейной регрессионной модели $\mathcal{R}(\theta^T f(x[1:N], V(x[1:N]))$ задается соотношениями (5) с заменой $\eta(x, \theta)$ на $f^T(x)\theta$ и $V(x, \theta)$ на $V(x)$.

Пусть нормированный план $\pi_\theta^s = \pi$ и $E_\theta^s N = n < \infty$ для последовательного плана ξ не зависят от θ (т. е. выбирается только порядок очередности управлений) и матрица $M = \int_X f(x) V^{-1}(x) \times \times f^T(x) \pi(dx)$ невырождена. Для любой несмещенной оценки $\hat{\theta}$ для θ из класса оценок вида $\sum_{i=1}^N A_i y_i$, где функции $A_i = A(x_i)$, $A(x)$ измерима и

$$\int (|A^T(x) f(x)| + \|A(x)\|^2 V(x)) \pi(dx) < \infty,$$

справедливо неасимптотическое неравенство

$$D_{\hat{\theta}}^s \geq M^{-1} \quad (9)$$

для любых $\theta \in \Theta$. Если $\sum_{i=1}^N V^{-1}(x_i) f^T(x_i) f(x_i) = \text{const}$ (п. н. P_θ^s) и $\hat{\theta}$ оценка МНК, то в (9) имеет место равенство.

Если план ξ статический, то приведенное утверждение совпадает с теоремой Гаусса — Маркова (см. п. 1.2.1).

Для модели $\mathcal{R}(\theta^T f(x[1: N]), V(x[1: N]))$ легко выписывается асимптотически оптимальная рекуррентная процедура оценивания θ :

$$\hat{\theta}_n = \hat{\theta}_{n-1} - \Gamma_n f(x_n) [f^T(x_n) \hat{\theta}_{n-1} - y_n],$$

$$\Gamma_n = \Gamma_{n-1} - \frac{\Gamma_{n-1} f(x_n) f^T(x_n) \Gamma_{n-1}}{1 + f^T(x_n) \Gamma_{n-1} f(x_n)},$$

где $\Gamma_0 > 0$ — матрица $m \times m$, $\hat{\theta}_0$ — любая точка из Θ . Аналогичная асимптотически оптимальная рекуррентная процедура может быть выписана для оценивания параметров нелинейной регрессионной модели, F -модели и для случая, когда имеется информация о плотности распределения измерений.

§ 4. Асимптотически оптимальные последовательные планы для оценивания параметров регрессии

Из результатов п. 3.1 следует, что задача построения оптимального последовательного плана для оценки параметров регрессии сводится к решению задачи (8). План π^* , определяемый по (8), называется *локально-оптимальным*. Принципиальным отличием локально-оптимальных планов от оптимальных планов оценивания параметров линейной регрессии является их зависимость от неизвестных параметров, и поэтому для построения локально-оптимальных планов используют последовательные процедуры. Их очевидным недостатком является зависимость последовательности планов от ошибок наблюдения. При большом разбросе экспериментальных данных трудно априори составить представление о сходимости процедуры. Наиболее надежным способом получить уверенность в обоснованности той или иной процедуры последовательного планирования является моделирование экспериментальной ситуации с помощью ЭВМ.

Экспериментатор для данного вида регрессии выбирает конкретные значения оцениваемых параметров в области ожидаемых значений и задается конкретным распределением погрешностей наблюдений. С помощью датчика случайных чисел он получает значения погрешности и вычисляет точные значения функции регрессии (при выбранных значениях параметра). Таким образом, для заданных значений аргумента можно получить «экспериментальные данные». Для такого модельного эксперимента можно проводить обработку данных, проводить последовательное планирование и сравнивать полученные значения параметров с заданными. При заметной стойкости реального эксперимента лучше провести предварительное проигрывание нескольких вариантов планирования, прежде чем осуществлять реальный эксперимент.

Предположим, что критерий оптимальности Ψ удовлетворяет условиям типа а)—г) из § 2.3, $\gamma(n) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Из (7) следует, что при выполнении условий а)—г) из § 2.3 для семейства стратегий s_i

$$\lim_{r \rightarrow 0} \lim_{i \rightarrow \infty} \sup_{\theta \in B(r)} \gamma^{-1}(n_i(\theta)) \Psi[M(\pi_i, \theta)] \geq \Psi[M^*], \quad (10)$$

где M^* — некоторая невырожденная информационная матрица.

Нижняя граница в (10) достижима. Ниже приведены две часто используемые асимптотически оптимальные стратегии последовательного планирования.

А л г о р и т м 1.

1) Строим такой статический план $\xi_0 = \{x_1, \dots, x_{\alpha(n)}\}$, состоящий из таких $\alpha(n)$ ($\alpha(n) = o(n)$, $\alpha(n) \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$), что

$$\sum_{i=1}^{\alpha(n)} (\eta(x_i, \theta) - \eta(x_i, \theta'))^2 \rightarrow \infty \text{ при } n \rightarrow \infty.$$

2) Вычисляем состоятельную $\hat{\theta}_0$ — оценку для θ^* по результатам измерений $y(x_i)$ ($i = 1, \dots, \alpha(n)$).

3) Отыскиваем нормированный план

$$\pi_* = \arg \min_{\pi} \Psi[M(\pi, \hat{\theta}_0)].$$

4) Оставшиеся $n - \alpha(n)$ наблюдений проводим в соответствии с планом π_* .

5) По результатам наблюдений $y(x_i) - \eta(x_i, \hat{\theta}_0)$ ($i = 1, \dots, n$) вычисляем $\hat{\theta}_1$ — оценку МНК для линейной регрессионной модели $\mathcal{R}(f(x[1:n]), \hat{\theta})(\theta_1 - \theta_0)$, $V(x[1:n], \hat{\theta}_0)$.

Момент остановки N в алгоритме 1 фиксированный: $N = n$.

В тех случаях, когда имеется возможность анализа данных в режиме реального времени, можно использовать следующую процедуру.

А л г о р и т м 2.

1) Выбираем такой план $\xi_{N_0} = \{x_1, \dots, x_{N_0}\}$, что матрица $M(\xi_{N_0}, \theta)$ невырождена при всех $\theta \in \Theta$. Полагаем $j = 0$.

2) Вычисляем оценки МНК

$$\hat{\theta}_{N_j} = \text{Arg} \min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^{N_j} (y(x_i) - \eta(x_i, \theta))^2$$

и матрицу

$$M(\xi_{N_j}, \hat{\theta}_{N_j}) = N_j^{-1} \sum_{i=1}^{N_j} f(x_i, \hat{\theta}_{N_j}) f^T(x_i, \hat{\theta}_{N_j}).$$

3) Отыскиваем точку

$$x_{N_{j+1}} = \text{Arg} \inf_{x \in X} \psi(x, \hat{\theta}_{N_j}, \xi_{N_j}),$$

где

$$\psi(x, \theta, \xi) = f^T(x, \theta) \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M(\xi, \theta)} f(x, \theta).$$

4) Проводим наблюдение $y(x_{N_j+1})$, полагаем

$$\xi_{N_{j+1}} = \left(1 - \frac{1}{N_j+1}\right) \xi_{N_j} + \frac{1}{N_j+1} \xi(x_{N_j+1}),$$

где $N_{j+1} = N_j + 1$, заменяем j на $j + 1$ и переходим к 2).

Помимо асимптотической оптимальности, алгоритм 2 доставляет на каждом N -м шаге приближенно (а в линейном случае для ряда критериев и, в частности, для D -критерия — точно) максимальное уточнение оценок $\hat{\theta}_N$ (в смысле выбранного критерия Ψ).

В практических исследованиях вместо алгоритма 2 нередко используются различные его модификации, более удобные в вычислительном или экспериментальном аспекте. Например, на каждом шаге можно отыскивать сразу несколько опорных точек x_{N+1}, \dots, x_{N+q} , повторяя 3), 4) с одними и теми же значениями оценок $\hat{\theta}_N$. Можно в одной опорной точке проводить серии наблюдений, длина которых близка к $\gamma_s N / (1 - \gamma_s)$, где γ_s выбирается так же, как в п. 4.1.2. Аналогично процедуре из п. 3.2 оценки $\hat{\theta}_{N_{j+1}}$ при использовании алгоритма 2 можно вычислять через $\hat{\theta}_{N_j}$ рекуррентно.

Отметим, что если эксперимент многоэтапен, то результаты, полученные на предыдущих этапах, могут рассматриваться как априорные сведения для этапов последующих. Это позволяет сочетать последовательный подход с описанным в § 6 байесовским и минимаксным.

§ 5. Последовательное планирование эксперимента при проверке гипотез

Последовательное планирование в задачах проверки гипотез часто требует меньшего числа экспериментов (при том же риске) и меньшего объема вычислений, чем статическое. Поэтому оно широко применяется, например, в задачах дискриминации моделей (гл. 16), при отсеивании несущественных эффектов (гл. 15) и др. В данном параграфе описан общий подход к проблеме асимптотической оптимальности последовательных стратегий.

1. Нижние границы средней длительности эксперимента. Пусть

$$l_{\theta, \varphi}^x = \ln [p_{\theta}^x(y) / p_{\varphi}^x(y)], \quad L_{\theta, \varphi}^s = \sum_{i=1}^N l_{\theta, \varphi}^{x_i}(y_i), \quad \theta, \varphi \in \Theta$$

есть функции правдоподобия для одного измерения (условные) и для всей выборки,

$$K^x(\theta, \varphi) = E_{\theta}^x l_{\theta, \varphi}^x(y_1), \quad FK^s(\theta, \varphi) = E_{\theta}^s L_{\theta, \varphi}^s,$$

есть информационные уклонения Кульбака распределений P_θ от P_ϕ соответственно в эксперименте с управлением x и финальных (в момент принятия решения).

Нижняя граница длительности последовательно планируемого эксперимента определяется через границу снизу для финальной информации Кульбака. В некоторых случаях (см. примеры 1, 2) такая граница может быть получена через ограничения на риск стратегий.

Ниже используются обозначения: $a: \Theta \times \Theta \rightarrow \mathbb{R}^1$ — некоторая положительная функция; \mathcal{X}_0 — множество вероятностных мер на (X, \mathcal{B}_X) ; для $\pi \in \mathcal{X}_0$

$$K^\pi(\theta, \varphi) = \int_X K^x(\theta, \varphi) \pi(dx), \quad R^\pi(\theta, \varphi) = K^\pi(\theta, \varphi)/a(\theta, \varphi),$$

$$S_a = \{s \mid FK^s(\theta, \varphi) \geq a(\theta, \varphi) \quad \forall \theta, \varphi \in \Theta_0 \subseteq \Theta, \theta \neq \varphi\}$$

есть класс стратегий;

$$\bar{R}(\theta) = \sup_{\pi \in \mathcal{X}_0} \inf_{\varphi \neq \theta, \varphi \in \Theta} R^\pi(\theta, \varphi).$$

Если для всех $\theta \in \Theta$ выполнено $\inf_{\varphi \in \Theta_0, \theta \in \Theta} \bar{R}(\theta) > 0$, $\sup_{\theta} \bar{R}(\theta) < \infty$, то для всех $\theta \in \Theta$, $s \in S_a$ имеем $E_\theta^s N \geq 1/\bar{R}(\theta)$, $\sup_{\theta} E_\theta^s N \geq \sup_{\pi \in \mathcal{X}_0} \inf_{\theta \neq \varphi \in \Theta^2 = \Theta \times \Theta} R^\pi(\theta, \varphi)$.

Пример 1. Пусть $\Theta = \Lambda$ конечно; A — множество стратегий с фиксированными вероятностями $\alpha_\theta(\psi) = P_\theta^s(Q = \psi)$, $\theta, \psi \in \Theta^2 = \Theta \times \Theta$, причем все распределения $\alpha_\theta(\cdot)$ эквивалентны;

$$FK_0(\theta, \varphi) = \sum_{\psi \in \Theta} \alpha_\theta(\psi) \ln [\alpha_\theta(\psi)/\alpha_\varphi(\psi)].$$

Тогда

$$E_\theta^s N \geq \left[\sup_{\pi \in \mathcal{X}_0} \inf_{\varphi \in \Theta \setminus \{\theta\}} K^\pi(\theta, \varphi)/FK_0(\theta, \varphi) \right]^{-1}.$$

Это неравенство является обобщением известного неравенства Хёффдинга, установленного для последовательного анализа.

Пример 2. Пусть $\Lambda = \{0, 1\}$; $w(\theta, \lambda) = 1$ при $\theta \in \Theta$ и $w(\theta, \lambda) = 0$ при $\theta \in \Theta \setminus \Theta_\lambda$ (здесь $\Theta_i = \Theta \setminus \Theta_0$); $\Sigma(w_0, w_1)$ — класс таких стратегий s , что $R(\theta, s) \leq w_i$ на Θ_i ; $\max\{w_0, w_1\} \leq 1/2$. Тогда для всех $\theta \in \Theta_i$

$$E_\theta^s N \geq \omega(w_i, w_{1-i})/K^*(\theta), \quad (11)$$

где $\omega(a, b) = a \ln [a/(1-b)] + (1-a) \ln [(1-a)/b]$,

$$K^*(\theta) = \sup_{\pi \in \mathcal{X}_0} \inf_{\varphi \in \Theta_{1-i}} K^\pi(\theta, \varphi).$$

Нижние границы в примерах 1, 2 асимптотически точны, если все вероятности ошибок стремятся к нулю.

2. Асимптотически оптимальные процедуры. Асимптотически оптимальными являются некоторые аналоги алгоритмов 1, 2 из § 4. Ниже приведена процедура, аналогичная алгоритму 1 в ситуации примера 2 при Θ -конечном множестве и

$$\min_{\varphi \in a(\theta), \theta \in \Theta} K^x(\theta, \varphi) > 0,$$

где $a(\theta) = \Theta_{i-1}$ при $\theta \in \Theta_i$.

Алгоритм 3.

1) Построим при $c = \max(w_0, w_1) \rightarrow 0$ стратегию из $\Sigma(w_0, w_1)$, для которой $E_0^c N$ эквивалентно правой части (11).

2) Проводим $t(c)$ ($t(c) \rightarrow \infty$, $t(c) = o(-\ln c)$ при $c \rightarrow 0$) измерений с произвольным планом, обеспечивающим состоятельную оценку наибольшего правдоподобия $\hat{\theta}_{t(c)}$.

3) Выбираем нормированный план

$$\pi^* = \arg \max_{\pi \in \mathcal{P}_0} \min_{\varphi \in a(\hat{\theta})} K^\pi(\theta, \varphi).$$

4) Остальные измерения проводятся в соответствии с планом π^* до момента N , в который минимальное по $\varphi \in a(\hat{\theta}_N)$ из соотношений правдоподобия при $\theta = \hat{\theta}_N$ не превышает $|\ln c|$.

Статистическое моделирование показало, что алгоритм 3 не всегда предпочтительнее алгоритма (аналогичного алгоритму 2), в ближайшем измерении которого максимизируется прирост информации. Один из путей для более тонкого сравнения свойств асимптотически оптимальных процедур — изучение следующих членов асимптотики.

В качестве примера далее рассмотрена проверка однородности n выборок. Пусть \mathcal{P} — класс абсолютно непрерывных взаимно и относительно σ -конечной меры μ на Y распределений; $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_n$ — генеральные совокупности случайных элементов, имеющих соответственно распределения P_1, \dots, P_n из \mathcal{P} ; Θ_0 — n -набор совпадающих распределений из \mathcal{P} , а Θ_1 — n -набор распределений P_1, \dots, P_n из \mathcal{P} , максимальное расстояние по вариации между которыми не меньше $\Delta > 0$, $\Theta = \Theta_0 \cup \Theta_1$.

Для принятия решения $d = 0$ или $d = 1$ о справедливости Θ_0 или Θ_1 последовательно выбираются элементы совокупностей $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_n$ и сравниваются с помощью некоторого теста. Таким образом, здесь $X = \{1, \dots, n\}$, $\Lambda = \{0, 1\}$. Для этого примера

$$K^*(\theta) \geq \begin{cases} -\frac{1}{n} [\ln(1 + \Delta) + \ln(1 - \Delta)] & \text{при } \theta \in \Theta_0, \\ \frac{1}{2} [(1 + \Delta) \ln(1 + \Delta) + (1 - \Delta) \ln(1 - \Delta)] & \text{при } \theta \in \Theta_1. \end{cases}$$

Для реального применения при

$$0 \leq a \leq r_0/r_1 \leq b < \infty, \quad r_0 \rightarrow 0,$$

удобна следующая двухступенчатая процедура. На первом этапе

длительностью

$$a(r_0) \rightarrow \infty, \quad a(r_0) = o(-\ln r_0), \quad r_0 \rightarrow 0,$$

тратится одинаковое число измерений на каждую из совокупностей $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_n$. Затем для каждой пары совокупностей с номерами (i, j) с помощью критерия Колмогорова — Смирнова проверяется гипотеза совпадения распределений P_i и P_j . В результате для каждой пары распределений будет получен вывод об их совпадении или отличии по вариации не менее чем на Δ с вероятностями ошибок, стремящимися к нулю при $r_0 \rightarrow 0$. Далее выбирается пара распределений с номерами (i^*, j^*) , для которой статистика Колмогорова — Смирнова приняла максимальное значение и оставшиеся измерения проводятся парами: из совокупностей $\mathcal{A}_{i^*}, \mathcal{A}_{j^*}$ выбираются значения до тех пор, пока статистика Колмогорова — Смирнова не пересечет верхний или нижний критический уровень, выбираемые из того условия, чтобы вероятности ошибок при Θ_0 и Θ_1 были меньше соответственно r_0 и r_1 .

Литература к §§ 4—5: [9, 54, 92*, 127, 187*].

§ 6. Байесовские и минимаксные оптимальные планы для оценивания параметров нелинейной регрессии

При каждом фиксированном значении $\theta \in \Theta$ функция $\Psi[M(\theta, \xi)]$ может рассматриваться в качестве критерия оптимальности. Ситуация, при которой ищется оптимальный план, соответствующий $\theta = \theta^*$, рассматривалась в §§ 1—4. Если известно, что θ принадлежит некоторому множеству Ω , то задача оптимального планирования может рассматриваться как многокритериальная (см. п. 2 Введения), и может быть определено множество оптимальных по Парето планов, а также компромиссные критерии. В частности, если имеется априорная информация о параметрах, можно рассматривать байесовские и минимаксные оптимальные планы, которые выбираются в классе статических планов, поскольку для них критерии оптимальности не зависят от θ .

1. Основные свойства байесовских планов. Предположим, что экспериментатор обладает априорной информацией, которая описывается распределением $\mathcal{F}(d\theta)$. План ξ^* называется *байесовским оптимальным планом*, если

$$\xi_B^* = \text{Arg inf}_{\xi} E \{ \Psi [M(\theta, \xi)] \}. \quad (12)$$

Здесь и в остальной части этого параграфа подразумевается, что $E[\dots] = \int_{\Omega} \dots \mathcal{F}(d\theta)$. Из результатов гл. 2 следует, что если функция Ψ удовлетворяет требованиям (a)—(d) из § 2.1, то:

1) Существует по крайней мере одно решение экстремальной задачи (12).

2) Множество байесовских оптимальных планов выпукло.

3) Необходимым и достаточным условием оптимального плана является выполнение следующего неравенства для всех $x \in X$:

$$\psi_B(x, \xi_B^*) \geq E \left[\operatorname{tr} M \frac{\partial \Psi}{\partial M} \right]_{M=M(\theta, \xi^*)},$$

где $\psi_B(x, \xi) \geq E[\psi(x, \theta, \xi)]$, а функция $\psi(x, \theta, \xi)$ определена в § 4.

4) Для любого плана ξ имеет место неравенство

$$E \left[\operatorname{tr} M \frac{\partial \Psi}{\partial M} \right]_{M=M(\theta, \xi)} - \inf_{x \in X} \psi_B(x, \xi) \geq \Psi_B(\xi) - \Psi_B(\xi_B^*),$$

где $\Psi_B(\xi) = E\{\Psi[M(\theta, \xi)]\}$.

5) Если $\int_{X'} \xi_B^*(dx) > 0$, то найдется такая точка $x \in X'$, где функция $\Psi_B(x, \xi_B^*)$ достигает своей нижней границы, указанной в 3).

В отличие от линейного случая, использование этих результатов для аналитического построения оптимальных планов, за исключением тривиальных случаев, весьма проблематично, так как подсчет соответствующих интегралов (существование которых подразумевается) в явном виде чаще всего невозможен.

В приведенных утверждениях отсутствует пункт о количестве опорных точек в оптимальных планах. Дело в том, что $\Psi_B(\xi)$ невозможно представить как функцию, зависящую лишь от элементов информационной матрицы, как это было в линейном случае. Но именно последнее лежит в основе доказательства существования оптимального плана, имеющего не более чем $m(m+1)/2$ опорных точек.

Если известна матрица вторых моментов D_0 априорного распределения, то естественно использовать критерий оптимальности, зависящие от суммарной информационной матрицы $\mathfrak{M}(\theta, \xi) = M(\theta, \xi) + N^{-1}D_0^{-1}$, где N — предполагаемое число наблюдений в планируемом эксперименте. При этом полагается, что

$$\hat{\theta} = \operatorname{Arg} \inf_{\theta \in \Omega} \left[\sum_{i=1}^N (y_i - \eta(x_i, \theta))^2 + (\theta - \theta_0)^T D_0^{-1} (\theta - \theta_0) \right],$$

где θ_0 — априорное среднее.

Экстремальная задача (12) лишь одна из возможных при байесовском подходе. С практической точки зрения может оказаться целесообразным решение несколько иных задач. Например, для D -критерия операция усреднения может вводиться на различных этапах:

$$E[\ln |M^{-1}(\theta, \xi)|], E[|M^{-1}(\theta, \xi)|], \{E[|M(\theta, \xi)|]\}^{-1}, |E[M^{-1}(\theta, \xi)]|.$$

Вообще говоря, все четыре соответствующие экстремальные задачи могут приводить к различным решениям.

2. Численное построение байесовских оптимальных планов. Так же как и в линейном случае, нетрудно указать итерационную

процедуру численного построения байесовских оптимальных планов, аналогичную процедуре из § 4.1 (с очевидной заменой $\psi(x, \xi)$ на $\psi_B(x, \xi)$). С практической точки зрения такая процедура бесполезна, если не удастся отыскать экономного способа подсчета интегралов, встречающихся в предыдущем пункте. В то же время экстремальная задача (12) может быть истолкована как задача планирования экстремальных экспериментов. Численные методы экстремального планирования развиты в основном для конечномерных пространств. В (12) оптимальную точку приходится искать среди вероятностных мер, определенных на компакте X . Одним из возможных путей упрощения исходной задачи является переход к мерам, определенным лишь на дискретном наборе точек x_i ($i = 1, \dots, n$), достаточно представительном описывающем область действия X , и заменой (12) на конечномерную экстремальную задачу

$$\xi_n^* = \underset{\vartheta}{\text{Arg inf}} \Psi_B(\xi_n),$$

где $p^T = (p_1, \dots, p_n)$, $\sum_{i=1}^n p_i = 1$, $p_i \geq 0$, $\xi_n = \{p_i, x_i\}_{i=1}^n$. При достаточно большом n и подходящем расположении опорных точек x_i план ξ_n^* может рассматриваться как приближенное решение (12)..

Один из возможных методов отыскания плана ξ_n^* заключается в следующем (индекс « n » в дальнейшем опускается). Имеется план ξ_s , определяемый вектором p_s . С помощью датчика случайных чисел в соответствии с распределением $\mathcal{F}(d\theta)$ выбирается θ_s . Подсчитывается новый вектор

$$p_{s+1} = \pi[p_s - \alpha_s \gamma_s \psi(\theta_s, \xi_s)],$$

где $\pi(p)$ означает проекцию вектора p на множество допустимых значений, $\psi^T(\theta_s, \xi_s) = (\psi(x_1, \theta_s, \xi_s), \dots, \psi(x_n, \theta_s, \xi_s))$. Функция $\psi(x, \theta, \xi)$ определена в § 4.

Процедура сходится в среднеквадратичном к плану ξ_n^* , если наряду с требованиями п. 1 выполняются следующие условия:

- а) начальный план ξ_0 невырожден при $\forall \theta \in \Omega$;
- б) существует такое $C < \infty$, что

$$E\{[\Psi(\xi_{s-1}, \theta) - E(\Psi(\xi_{s-1}, \theta))]^2 / \xi_0, \dots, \xi_{s-1}\} \leq \eta_s^2 \leq C, \\ \gamma_s > 0, \quad \gamma_s \eta_s \leq \text{const};$$

$$\text{в) } \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s = \infty, \quad \lim_{s \rightarrow \infty} \alpha_s = 0, \quad \alpha_s > 0.$$

Данное утверждение является следствием результатов п. 14.3.5.

3. Минимаксные планы. Пусть априори известно, что истинные значения параметров принадлежат множеству Ω . Задачу минимаксного планирования для данного Ω и $\Psi[M(\theta, \xi)]$ назовем *нетривиальной*, если существует непустое множество E_0 планов ξ , что для каждого $\xi \in E_0$ $\sup_{\theta \in \Omega} \Psi[M(\theta, \xi)]$ ограничен. План ξ_M^*

называется *минимаксным*, если

$$\xi_M^* = \text{Arg} \inf_{\xi} \sup_{\theta \in \Omega} \Psi [M(\theta, \xi)].$$

Данная экстремальная задача близка к задачам, рассмотренным в § 2.6, с той лишь разницей, что от дополнительного аргумента (в § 2.6 это — u) теперь зависят и базисные функции $f(x, \theta)$. Если функция $\Psi [M(\theta, \xi)]$ при каждом $\theta \in \Omega$ удовлетворяет требованиям (б), (в) и (г) из § 2.3 и Ω — компакт, то необходимым и достаточным условием оптимальности плана ξ_M^* является выполнение неравенства

$$\sup_{\xi} \inf_x \int_{\theta(\xi_M^*)} \left[\psi(x, \theta, \xi^*) - \text{tr} M \frac{\partial \Psi}{\partial M} \Big|_{M=M(\theta, \xi_M^*)} \right] \zeta(d\theta) \geq 0,$$

где $\theta(\xi)$ — множество всех решений экстремальной задачи $\sup_{\theta \in \Omega} \Psi [M(\theta, \xi)]$.

4. Минимаксные и локально D -оптимальные планы для экспоненциальной регрессии. Ниже рассмотрен пример построения оптимальных планов для регрессии специального вида. Пусть

$$\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^h \sum_{j=0}^{t_i} \theta_{j+s_i} x^j \exp\{-\theta_{i+t_i} x\},$$

где $s_1 = 0, s_2 = 1 + t_1, \dots, s_i = (i-1) + t_1 + \dots + t_{i-1}, \dots, t_i$ — заданные целые числа ($i = 1, \dots, k$); $t = s_{k+1}$; $x \in [0, \infty), \theta_j \neq 0$ ($j = 1, \dots, t$), $\theta_{i+t} > 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$). Обозначим $\Lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_k)^T$ ($\lambda_i = \theta_{i+t}$). Локально D -, G -, E -, A -, Φ -оптимальный план зависит только от Λ . Поэтому при минимаксном подходе нужна информация только относительно Λ . Будем считать, что $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ перенумерованы в порядке убывания: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_k$. Если $\lambda_i = \lambda_{i+1}$ при некотором i , то определитель информационной матрицы равен нулю тождественно и задача планирования тривиальна. Поэтому будем рассматривать множество Ω вида

$$\Omega = \{\Lambda; \lambda_1 \leq d, \lambda_{i+1} - \lambda_{i-1} \geq p_i, i = 1, 2, \dots, k-1\}, \quad (13)$$

где p_i, d — заданные положительные числа. D -минимаксный план для множества Ω указанного вида существует и является одновременно локально D -оптимальным при $\Lambda =$

$$\left(d, d - p_1, \dots, d - \sum_{i=1}^{h-1} p_i \right)^T \text{ и наоборот.}$$

Утверждение сохраняет силу, если D -минимаксный и соответствующий локально D -оптимальный план ищутся не в множестве всех непрерывных планов, а в множестве дискретных планов с фиксированным числом узлов.

Под насыщенными локально D -оптимальными планами будем понимать дискретные планы с минимальным числом узлов (т. е.

$N = k + t$), максимизирующие определитель информационной матрицы в классе всех таких планов при фиксированном Λ . Эти планы имеют вид

$$\tau^*(\Lambda) = \{x_1^*(\Lambda), \dots, x_{k+t}^*(\Lambda)\}.$$

Пусть Λ принадлежит множеству Ω вида (13) при любых фиксированных p_i, d_i .

Справедливы утверждения:

1) вектор-функция $\Lambda \in \Omega \rightarrow \tau^*(\Lambda)$ определена и притом единственным образом;

2) $x_1^*(\Lambda) \equiv 0, x_j^*(\Lambda) (j = 2, \dots, k+t)$ — аналитические, монотонно (строго) убывающие по каждому $\lambda_i (i = 1, \dots, k)$ функции;

3) $\tau^*(\Lambda) \rightarrow \Gamma_\varepsilon$ при $\Lambda \rightarrow \Lambda_\varepsilon$, где $\Lambda = (\varepsilon, \dots, \varepsilon)^T, \varepsilon$ — любое положительное число, $\Gamma_\varepsilon = \{0, \gamma_2, \dots, \gamma_{k+t}\}, \gamma_{i+1} = 2\gamma_i'/\varepsilon (i = 1, \dots, k+t-1), \{\gamma_i'\}_1^{k+t-1}$ — совокупность нулей многочлена Лагерра $L_{t+k-1}^1(x)$.

В случае $k = 1, 2$ (непрерывный) локально D -оптимальный план можно получить, приписав равные веса узлам насыщенного локально D -оптимального плана.

Литература к § 6: [26, 92*, 114*, 127, 161, 166].

ГЛАВА 6

УЧЕТ НЕАДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ В ЗАДАЧАХ ПЛАНИРОВАНИЯ РЕГРЕССИОННЫХ И ИМИТАЦИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

§ 1. Критерии оптимальности и планы, связанные с неадекватностью модели

1. Постановка задачи. Теория планирования эксперимента, изложенная в гл. 2, 3, по праву считается классической. Она имеет большое количество приложений в научных исследованиях и технике. Следует, однако, помнить об условиях ее применимости, главные из которых состоят в том, что вид функции регрессии известен с точностью до параметров и аппроксимирующая модель отыскивается в адекватном виде. Если одно из этих условий нарушено, то оптимальное планирование может привести к нежелательным и даже ошибочным результатам.

Пусть, например, истинная функция регрессии $\eta(x)$ есть многочлен 2-й степени на $[a, b]$, а исследователь выбрал линейную модель $\eta_1(x) = \theta_1 + \theta_2 x$. D -оптимальный план по отношению к линейной модели при этом сосредоточен на концах промежутка. Ясно, что восстановление многочлена 2-й степени по его значениям в двух точках может привести к сколь угодно большой ошибке. В этом примере главную роль может играть систематическая погрешность, и выбор указанного плана только усугубляет положение.

Таким образом, необходимо особо рассмотреть случаи, когда параметрический вид функции регрессии точно не известен, но имеется иная информация относительно $\eta(x)$, например:

а) Известно, что $\eta(x) = \eta_2(x, \theta)$, $\theta \in \Theta_2$, но исследователь по каким-либо причинам выбирает параметрическую модель $\eta_1(x, \theta)$, $\theta \in \Theta_1$, $\Theta_1 \subset \Theta_2$. Допустим известно, что $\eta(x)$ есть многочлен степени не выше d_2 , но экспериментатор может осуществить ограниченное число измерений, достаточное лишь для восстановления многочлена степени d_1 ($d_1 < d_2$) с допустимой малой погрешностью, либо из соображения упрощения модели, особенно в имитационном эксперименте, стремится выбрать меньшее число параметров.

б) Имеется информация относительно функции регрессии типа, описанного в § 1.2.

в) Имеется информация о гладкости $\eta(x)$: $\eta(x)$ принадлежит некоторому классу дифференцируемых функций.

Как и во Введении, будем считать, что в конечном счете выбрана параметрическая модель с m параметрами $\eta_1(x, \theta)$ (m фиксировано), и рассмотрим следующее разложение погрешности $\eta(x) - \eta_1(x, \hat{\theta})$, где $\hat{\theta}$ — оценка векторного параметра θ :

$$\eta(x) - \eta_1(x, \hat{\theta}) = [\eta(x) - \eta_1(x, \theta^*)] + [\eta_1(x, \theta^*) - \eta_1(x, \hat{\theta})],$$

где θ^* — такое значение векторного параметра θ , при котором $\eta_1(x, \theta)$ наилучшим образом приближает $\eta(x)$ в выбранной метрике. Очевидно, если $\eta(x)$ принадлежит тому же параметрическому семейству, что и $\eta_1(x, \theta)$ ($\eta(x) = \eta_1(x, \theta)$ при некотором фиксированном $\theta = \theta^{(1)}$), то при всякой разумно выбранной метрике $\theta^* = \theta^{(1)}$, и первое слагаемое в указанном разложении равно нулю.

Критерии оптимальности, связанные только со вторым слагаемым, изучались в гл. 2, 3, а критерии, связанные только с первым слагаемым, служат объектом исследования теории аппроксимации. В общем же случае задача многокритериальна, и необходимо либо строить планы, оптимальные в смысле векторного критерия (см. Введение), либо конструировать компромиссный критерий. Нужно иметь в виду, что в такой общей постановке возникает задача одновременного выбора оптимальной оценки параметров и оптимального плана эксперимента.

Если \mathcal{F} — линейное метрическое пространство с метрикой ρ , $\eta(x)$ и $\eta_1(x, \theta)$ принадлежат \mathcal{F} при каждом θ из Θ , то $\rho(\eta(x) - \eta_1(x, \theta))$ можно рассматривать как функцию риска, зависящую также от плана эксперимента, и решать задачу одновременной оценки параметра и выбора плана.

Очевидно,

$$\rho(\eta(x) - \eta_1(x, \hat{\theta})) \leq \rho(\eta(x) - \eta_1(x, \theta^*)) + \rho(\eta_1(x, \theta^*) - \eta_1(x, \hat{\theta})),$$

и каждое из слагаемых правой части этого неравенства может быть выбрано в качестве независимого критерия оптимальности плана и оценки.

Когда вид оценки $\hat{\theta}$ определен, и ищется оптимальный план, то план, минимизирующий одно из слагаемых правой части этого неравенства, не является единственным, и рассматриваются следующие задачи:

а) Среди планов эксперимента ξ , минимизирующих

$$\Phi_1(\xi) = \rho(\eta(x) - \eta_1(x, \theta^*)),$$

найти план (планы), минимизирующий

$$\Phi_2(\xi) = \rho(\eta_1(x, \theta^*) - \eta_1(x, \hat{\theta})).$$

б) Среди планов ξ , минимизирующих $\Phi_2(\xi)$, найти план (планы), минимизирующий $\Phi_1(\xi)$.

в) Задача минимизации линейной комбинации $\Phi_1(\xi)$ и $\Phi_2(\xi)$. При этом определение коэффициентов указанной линейной комбинации может служить предметом специального предварительного эксперимента.

2. Рандомизованные планы. Оптимальное несмещенное планирование эксперимента. Если план эксперимента трактуется как вероятностная мера, то естественно рассматривать также средние по этой мере критерии оптимальности.

Пусть $\{\mathcal{U}, \mathcal{R}, \nu\}$ — вероятностное пространство, где \mathcal{R} — σ -алгебра подмножеств \mathcal{U} , ν — вероятностная мера. Через $y(x, u)$ обозначим измеримую случайную функцию, где x — параметр из некоторого множества параметров \mathcal{X} , на котором также определена σ -алгебра \mathcal{A} , и σ — конечная мера μ . Обозначим $Q = (x_1, \dots, x_N)^T \in \mathcal{X}^N$, $P = (u_1, \dots, u_N)^T \in \mathcal{U}^N$, где \mathcal{X}^N , \mathcal{U}^N — декартовы произведения N экземпляров \mathcal{X} , \mathcal{U} соответственно; \mathcal{A}^N , \mathcal{B}^N — σ -алгебры, порожденные подмножествами, являющимися декартовыми произведениями множеств из \mathcal{X} и \mathcal{U} ; ν^N — вероятностная мера на $(\mathcal{U}^N, \mathcal{B}^N)$: $\nu^N(dP) = \nu(du_1) \times \dots \times \nu(du_N)$.

Пусть, далее, y_j — реализации случайной функции y при $x = x_j$, $y_j = y(x_j, u_j)$ ($j = 1, \dots, N$) и $y(x, u) = \eta(x) + \varepsilon(x, u)$, где $\eta(x)$ — математическое ожидание $y(x, u)$ при фиксированном x . Пусть эксперимент состоит в однократном измерении значений y_j в точках x_j ($j = 1, \dots, N$).

Рандомизованным планом эксперимента назовем реализацию случайного вектора $Q = (x_1, \dots, x_N)$. Если $\xi(dQ)$ — вероятностная мера, задающая распределение Q , то эквивалентным определением рандомизованного плана может быть определение его, как $\xi(dQ)$ ($h(Q)$, если h — плотность совместного распределения x_1, \dots, x_N по отношению к заданной мере).

Рандомизованный план может быть реализован с помощью таблиц (датчиков) случайных чисел с использованием стандартных методов моделирования распределений. При этом связанные с планированием эксперимента условия оптимальности будут выполняться в среднем.

Рандомизованное планирование удобно, когда эксперименты по измерению y в N точках повторяются многократно независимыми сериями. Это имеет место, например, при имитационном эксперименте.

Зададим способ s (метод оценивания) построения функции $\hat{\eta}(x, y)$ по значениям результатов наблюдений y при выбранном плане ξ . Функция $\hat{\eta}(x, y)$ связана с методом оценивания s и планом эксперимента ξ , т. е. $\hat{\eta}(x, y) = \hat{\eta}(x, y, \xi, s)$.

Ставится задача выбора такой пары (ξ, s) , что $\hat{\eta}(x, y, \xi, s)$ приближает функцию $\eta(x)$ наилучшим в заданной метрике способом. Считаем, что $E\hat{\eta}(x, y, \xi, s) \in \mathcal{R} \subset \mathcal{F}$, где \mathcal{R} — подпространство нормированного пространства \mathcal{F} , среди элементов которого выбирается приближение к функции η из \mathcal{F} . Через $\Phi(x, \xi, s)$ обозначим критерий оптимальности плана. Пару (ξ, s) назовем

процедурой анализа и планирования эксперимента или просто процедурой.

Пусть Ξ — множество вероятностных мер на \mathcal{X}^N , а S — заданное множество методов оценивания. Пару (ξ^*, s^*) назовем *несмещенной процедурой* в метрике пространства \mathcal{F} , если

$$(\xi^*, s^*) = \text{Arg} \inf_{\xi \in \Xi, s \in S} \|\eta(x) - E\hat{\eta}(x, y, \xi, s)\|_{\mathcal{F}}$$

при любой функции $\eta \in \mathcal{F}$ и $\Phi(x, \xi^*, s^*) < \infty$ для всех $x \in \mathcal{X}$. В том случае, когда указанные условия выполняются лишь для некоторой конкретной функции η из \mathcal{F} , то процедура (ξ^*, s^*) называется *локально несмещенной процедурой* в метрике \mathcal{F} .

Пусть (Ξ', S') — класс всех несмещенных процедур (ξ, s) . (ξ^*, s^*) называют *Φ -оптимальной несмещенной* в метрике \mathcal{F} , если

$$(\xi^*, s^*) = \text{Arg} \inf_{\xi \in \Xi', s \in S'} E\Phi(x, \xi, s),$$

где либо $x \in \mathcal{X}$ — произвольное фиксированное, либо $\Phi(x, \xi, s) \equiv \Phi(\xi, s)$. Как и ранее (см., например, Введение), зависимости от x и η можно избежать, либо вводя соответствующий критерий минимаксного или байесовского типа и используя дополнительную информацию об η , либо рассматривая векторный критерий, опирающийся на понятие доминированности процедур оценивания и планирования (ξ, s) .

Говорят, что процедура $(\tilde{\xi}, \tilde{s})$ *доминирует* (ξ, s) в заданном классе несмещенных в метрике \mathcal{F} процедур по отношению к Φ , если

$$E\Phi(\tilde{\xi}, \tilde{s}) \leq E\Phi(\xi, s)$$

для любой функции $\eta \in \mathcal{F}$, причем по крайней мере для одной η из \mathcal{F} имеет место строгое неравенство.

Назовем (ξ, s) *допустимой* в классе (Ξ, S) , если в (Ξ, S) нет процедуры ее доминирующей.

Если аппроксимирующая модель отыскивается в виде

$$\hat{\eta}_m(x, y, \xi, s) = \sum_{i=1}^m \hat{\theta}_i(y, \xi, s) f_i(x), \quad f_i(x) \in \mathcal{R},$$

то условия несмещенности могут быть записаны в виде

$$E\hat{\theta}_i(y, \xi, s) = \theta_i^*(\eta), \quad i \in 1, \dots, m,$$

для любой функции $\eta(x) \in \mathcal{F}$, где $\theta_i^*(\eta)$ коэффициенты обобщенного полинома $\eta_m^*(x, \eta) \in \mathcal{R}$ наилучшего в смысле метрики \mathcal{F} приближения функции $\eta(x)$.

3. Учет априорной информации о гладкости функции регрессии. Полиномиальная модель. Если приближение $\hat{\eta}(x) = \hat{\theta}^T f(x)$ к функции регрессии $\eta(x)$ отыскивается в пространстве алгебраических многочленов степени d от k переменных, а \mathcal{X} — область в

\mathbf{R}^n , то учет дополнительной информации о гладкости $\eta(x)$ осуществляется путем конструирования критерия оптимальности, использующего интегральное представление остатка ряда Тейлора функции $\eta(x)$.

Так, при $k = 1$, $\mathcal{X} = [a, b]$, если $\eta(x)$ имеет производную порядка s , то

$$\eta(x) = \eta(a) + \eta'(a)(x-a) + \dots + \int_a^x \eta^{(s)}(t) \frac{(x-t)^{s-1}}{(s-1)!} dt,$$

или

$$\eta(x) = P_{s-1}(x) + \int_a^x \eta^{(s)}(t) \frac{(x-t)^{s-1}}{(s-1)!} dt,$$

где $P_{s-1}(x)$ — многочлен степени $s-1$ на $[a, b]$.

Предположим, что степень d многочлена $\hat{\eta}(x)$ не менее $s-1$ и параметры θ находятся по методу наименьших квадратов, так что $\hat{\eta}(x) = \hat{\theta}^T f(x) = \sum_{j=1}^N l_j(x) y_j$, где $l_j(x)$ — многочлены степени d .

Под *планом эксперимента* ξ будем понимать множество точек x_1, \dots, x_N (не обязательно различных) из $[a, b]$, в которых производятся измерения $y(x_j) = y_j$.

Тогда естественным критерием качества плана служит математическое ожидание среднеквадратичной погрешности:

$$\begin{aligned} \rho^2 &\equiv E \int_a^b [\eta(x) - \hat{\eta}(x)]^2 dx = \\ &= \int_a^b \left[\eta(x) - \sum_{j=1}^N l_j(x) \eta(x_j) \right]^2 dx + \sigma^2 \int_a^b \sum_{j=1}^N l_j^2(x) dx \end{aligned}$$

для модели равнооточных независимых погрешностей измерений с дисперсией σ^2 (этот случай рассматривается здесь для простоты). Первое слагаемое соответствует систематической погрешности, второе — случайной.

Из сделанных предположений следует

$$\begin{aligned} \rho_1^2 &\equiv \int_a^b \left[\eta(x) - \sum_{j=1}^N l_j(x) \eta(x_j) \right]^2 dx = \\ &= \int_a^b \left\{ \int_a^b \eta^{(s)}(t) \left[\frac{(x-t)^{s-1}}{(s-1)!} I(x-t) - \sum_{j=1}^N l_j(x) \frac{(x_j-t)^{s-1}}{(s-1)!} \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times I(x_j-t) \right] dt \right\}^2 dx, \end{aligned}$$

или

$$\rho_1^2 = \int_a^b \left[\int_a^b \eta^{(s)}(t) K(x, t, \xi) dt \right]^2 dx,$$

где через $K(x, t, \xi)$ обозначена квадратная скобка из предыдущего выражения, а

$$I(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0, \\ 0,5, & x = 0. \end{cases}$$

Обозначим также

$$\rho_2^2 \equiv \sigma^2 \int_a^b \sum_{j=1}^N l_j^2(x) dx.$$

Итак, $\rho^2 = \rho_1^2 + \rho_2^2$, причем ρ_2^2 зависит только от плана эксперимента, а ρ_1^2 — также и от самой функции $\eta(x)$, которая восстанавливается в процессе эксперимента (точнее, от ее s -й производной).

Дальнейшее зависит от дополнительных предположений относительно $\eta^{(s)}(t)$. Если считать, что она интегрируема с квадратом, — очень общее, но естественное в выбранной нами метрике

предположение, — и $\int_a^b [\eta^{(s)}(t)]^2 dt \leq M_s^2$, то

$$\rho^2 \leq \sup_{\|\eta^{(s)}\|=M_s} \rho_1^2 + \rho_2^2,$$

и существует такая функция $\eta^{(s)}$, что верхняя грань в последнем неравенстве достигается.

Используя неравенство Буняковского, имеем

$$\rho^2 \leq M_s^2 \int_a^b \int_a^b K^2(x, t, \xi) dx dt + \sigma^2 \int_a^b L^2(x, \xi) dx,$$

где $L^2(x, \xi) = \sum_{j=1}^N l_j^2(x)$.

Если M_s и σ или, по крайней мере, отношение $\gamma = \sigma/M_s$ известны априори, то оптимальный план эксперимента определяется как план, минимизирующий точную верхнюю границу для ρ^2 . Реально, однако, величина γ известна редко. Если σ^2 , как правило, интересует экспериментатора, то определение M_s , особенно при больших s , — задача трудная и, по-видимому, ненужная для иных целей, кроме конструирования данного критерия. По этой причине задачу выбора плана полезно рассматривать как двухкритериальную, считая, что критерии $\int_a^b \int_a^b K^2(x, t, \xi) dx dt$ и $\int_a^b L^2(x, \xi) dx$ независимы, либо конструируя компромиссный критерий

$$\xi^*(\gamma) = \text{Arg min}_{\xi} \left\{ \int_a^b \int_a^b K^2(x, t, \xi) dx dt + \gamma \int_a^b L^2(x, \xi) dx \right\}.$$

Аналитическое решение этой задачи, по-видимому, невозможно даже в простейших случаях. Однако численный подход оказывается плодотворным во многих случаях, представляющих практический интерес. (Для $s = 1$, $d = 1, 2$ результаты численного решения приведены в [25].)

Существенно более сложным оказывается случай $k > 1$. В этом случае можно указать также различные представления $\eta(x)$ в виде

$$\eta(x) = P_d(x) + \sum_{\alpha} \int_{D \subset R^k} \nabla_{\alpha}(\eta(t)) K(x, t) dt,$$

где $\nabla_{\alpha}(\cdot)$ — оператор частного дифференцирования, который определяется конкретным видом представления. Подобного вида представление может быть получено, в частности, путем разложения $\eta(x)$ в ряд Тейлора.

Как уже отмечалось, информацию о наличии у функции регрессии производных высокого порядка по различным причинам трудно использовать. Для придания же плану эксперимента свойства устойчивости (робастности) по отношению к систематической ошибке часто достаточно учесть факт существования смешанной производной по каждому из аргументов. Это можно сделать, используя представление

$$\eta(x) = \eta(\tilde{x}) + \sum_{s=1}^k \sum_{i_1, \dots, i_s} \int_{\tilde{x}^{(i_1)}}^{x^{(i_1)}} \dots \int_{\tilde{x}^{(i_s)}}^{x^{(i_s)}} \frac{\partial^s \eta(\tilde{T}_{i_1, \dots, i_s})}{\partial x^{(i_1)} \dots \partial x^{(i_s)}} dt^{(i_1)} \dots dt^{(i_s)},$$

где x и \tilde{x} изменяются в прямоугольной области $\{a_i \leq x^{(i)} \leq b_i\}$ ($1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_s \leq k$, $s \leq k$), $\tilde{T}_{i_1, \dots, i_s}$ — вектор, получаемый из вектора \tilde{x} заменой компоненты $\tilde{x}^{(i_j)}$ на $t^{(i_j)}$ ($j = 1, \dots, s$). С данным представлением связан следующий полезный факт: каковы бы ни были функции $g_{i_1, \dots, i_s}(\tilde{T}_{i_1, \dots, i_s})$, интегрируемые по переменным $t^{(i_j)}$ при $a_{i_j} \leq t^{(i_j)} \leq b_{i_j}$, существует такая функция $\eta(x)$, что при фиксированном \tilde{x} почти всюду

$$\frac{\partial^s \eta(\tilde{T}_{i_1, \dots, i_s})}{\partial x^{(i_1)} \dots \partial x^{(i_s)}} = g_{i_1, \dots, i_s}(\tilde{T}_{i_1, \dots, i_s}).$$

Таким образом, информация о наличии смешанных производных s -го порядка по каждому набору из s различных переменных позволяет установить связь между этими производными и функцией η в указанном выше виде, причем входящие в это представление $2^k - 1$ производные независимы в смысле сформулированного утверждения.

Если $\sum_{j=1}^N l_j(x) = 1$, то рассуждения, аналогичные случаю $k = 1$, дают для среднего квадрата погрешности ρ^2 выражение

$$\rho^2 = \rho_2^2 + \int_{\mathcal{X}} \left[\sum_{s=1}^k \sum_{i_1, \dots, i_s} \int_{a_{i_1}}^{b_{i_1}} \dots \int_{a_{i_s}}^{b_{i_s}} \frac{\partial^s \eta(\tilde{T}_{i_1, \dots, i_s})}{\partial x^{(i_1)} \dots \partial x^{(i_s)}} \times \right. \\ \left. \times K_{i_1, \dots, i_s}(\tilde{T}_{i_1, \dots, i_s}, x, \xi) dt^{(i_1)} \dots dt^{(i_s)} \right]^2 dx.$$

Здесь ρ_2^2 формально имеет тот же вид, что и в случае $k = 1$.

Если отсутствует информация о соотношении величины σ^2 и производных, входящих в выражение для ρ^2 , то оптимальность плана ξ следовало бы понимать в смысле всех 2^k независимых критериев, определяемых этим выражением.

Могут быть рассмотрены и другие представления для $\eta(x)$ с независимыми производными $\nabla_\alpha \eta$. Поскольку вопрос об оптимальном планировании в такого рода задачах недостаточно изучен, мы не будем на нем останавливаться. Отметим только, что интерес представляют разложения для $\dot{\eta}(x)$, введенные С. Л. Соколовым. Для них производные $\nabla_\alpha \eta$ уже не будут независимыми, и систематическая ошибка будет связана всего с одним критерием. К сожалению, вычисление этого критерия оказывается слишком сложной задачей для существующих ЭВМ.

Литература к § 1: [24, 25, 60].

§ 2. Рандомизованные процедуры планирования и анализа регрессионного эксперимента

Конкретные результаты относительно рандомизованных процедур планирования и анализа регрессионных экспериментов, определенных в § 1, получены в следующих предположениях: S — класс линейных процедур оценивания, $\mathcal{F} \subseteq L^2(\mathcal{X}, \mu)$, где μ — вероятностная мера на $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$. Кроме того, в данном параграфе принято: $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ — фиксированная система μ -ортонормированных функций, \mathcal{R} — линейная оболочка этой системы.

Как и ранее, аппроксимирующая модель отыскивается в виде

$$\hat{\eta}_m(x, y, h, s) = \sum_{i=1}^m \hat{\theta}_i f_i(x),$$

$Q = (x_1, \dots, x_N)$, $h(Q)$ — плотность по отношению к произведению мер $\mu^N(dQ) = \mu(dx_1) \otimes \dots \otimes \mu(dx_N)$, определяющая рандомизованный план эксперимента, и символ математического ожидания $E_u E_h = E$ означает осреднение по случайным погрешностям измерений (E_u) и случайным планам (E_h).

Рандомизованную процедуру (h^*, s^*) анализа и планирования эксперимента называют *несмещенной* в $L^2(\mathcal{E}, \mu)$, если

$$(h^*, s^*) = \text{Arg min}_{k, s} \int_{\mathcal{E}} [\eta(x) - E\hat{\eta}(x, y, h, s)]^2 \mu(dx).$$

Эквивалентным условием несмещенности является условие

$$E\hat{\theta}_i = \int_{\mathcal{E}} f_i(x) \eta(x) \mu(dx), \quad i = 1, \dots, m,$$

т. е. $E\hat{\theta}_i$ должно быть равно i -му коэффициенту Фурье функции $\eta(x)$ по системе $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$.

Рандомизованный несмещенный в $L^2(\mathcal{E}, \mu)$ план ξ^* называется *оптимальным* (при фиксированном s) по отношению к заданному критерию Φ (Φ -*оптимальным*), если

$$\xi^* = \text{Arg inf}_{\xi} \Phi(\xi, s).$$

При рандомизованном планировании критерий Φ представляет собой среднее по планам с заданной плотностью распределения h некоторой функции Φ' :

$$\Phi(h, s) = \int_{\mathcal{E}^N} \Phi'(Q, s) h(Q) \mu^N(dQ),$$

а условия несмещенности

$$E\hat{\theta}_j(\eta) \equiv \int_{\mathcal{E}^N} E_u \hat{\theta}_j(\eta) h(Q) \mu^N(dQ) = \int_{\mathcal{E}} f_j(x) \eta(x) \mu(dx),$$

$$i = 1, \dots, m,$$

линейны по h и η .

Задача построения Φ -оптимальных несмещенных в $L^2(\mathcal{E}, \mu)$ планов, таким образом, есть задача бесконечномерного линейного программирования. В терминах теории линейного программирования h называют *планом*, а если h удовлетворяет ограничениям задачи (в данном случае их роль играют условия несмещенности), то его называют *допустимым планом*. Следует отличать понятия плана и допустимости плана в терминах линейного программирования от соответствующих понятий в многокритериальных задачах оптимизации эксперимента.

Теорема 1. Процедура (h_1, s_1) , включающая в себя

1) в качестве функции плотности распределения рандомизованного плана функцию $h_1(Q)$, определяемую равенством

$$h_1(Q) = \frac{(N-m)!}{N!} \det \{[f_1, f_1], \dots, [f_m, f_1]\}_{i=1}^m,$$

где

$$[f_i, f_k] = \sum_{j=1}^N f_i(x_j) f_k(x_j), \quad N \geq m;$$

2) в качестве линейного метода оценивания s_1 — метод наименьших квадратов:

$$\hat{\theta}_i(y, h_1, s_1) = \sum_{j=1}^N A_{ij}(h_1, s_1) y_j, \quad i = 1, \dots, m,$$

где

$$A_{ij}(h_1, s_1) = \frac{\det \{[f_1, f_l], \dots, [f_{i-1}, f_l], f_l(x_j), [f_{i+1}, f_l], \dots, [f_m, f_l]\}_{l=1}^m}{\det \{[f_1, f_l], \dots, [f_m, f_l]\}_{l=1}^m},$$

Q распределены по закону $h_1(Q)$, является несмещенной процедурой рандомизованного планирования и анализа регрессионных экспериментов, какова бы ни была система μ -ортонормированных функций $\{f_i\}_{i=1}^m$. При этом

$$\begin{aligned} D\hat{\theta}_i(y, h_1, s_1) &\leq \\ &\leq \int_{\mathcal{X}} \left[\eta(x) - \sum_{t=1}^m (\eta, f_t) f_t(x) \right]^2 \mu(dx) + \int_{\mathcal{X}} \sigma^2(x) \mu(dx) - \\ &- \sum_{t=1, t \neq i}^m \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} \rho(x, x') f_t(x) f_t(x') \mu(dx) \mu(dx'), \quad i = 1, \dots, m, \\ &\text{cov}(\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_l) = 0, \quad i \neq l, \end{aligned}$$

где $(\eta, f_i) = \int_{\mathcal{X}} f_i(x) \eta(x) \mu(dx)$, $\rho(x, x')$ — корреляционная функция $y(x)$.

Остановимся кратко*) на интерпретации результатов, сформулированных в виде теоремы 1.

В простейшем случае, когда мера μ сосредоточена с равными весами в N ($m < N$) точках, результаты теоремы 1 допускают следующую интерпретацию.

Пусть x_{i_1}, \dots, x_{i_n} ($n \geq m$) есть n точек, в которых произведены измерения функции y , Δ_{i_1, \dots, i_n} — определитель соответствующей системы нормальных уравнений для оценивания параметров θ . Оценку θ по выбранным точкам обозначим $\hat{\theta}_{i_1, \dots, i_n}$. В соответствии с теоремой Бинэ — Коши

$$\Delta_{1, \dots, N} = \sum_{i_1, \dots, i_n} \Delta_{i_1, \dots, i_n}$$

Если положить $p_{i_1, \dots, i_n} = \Delta_{i_1, \dots, i_n} / \Delta_{1, \dots, N}$, то в соответствии с теоремой 1

$$\hat{\theta}_{1, \dots, N} = \sum_{i_1, \dots, i_n} \hat{\theta}_{i_1, \dots, i_n} p_{i_1, \dots, i_n}$$

*) Основные результаты этой теории подробно изложены в монографии: С. М. Ермаков. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. — М.: Наука, 1975.

Таким образом, если требуется осуществить случайный выбор n точек из N при проведении эксперимента, то нужно выбрать их с вероятностью p_{i_1, \dots, i_n} . Это приводит к дополнительной компоненте в выражении для дисперсии, которую также легко интерпретировать.

Такая интерпретация особенно проста при $n = m$.

Если несмещенный план эксперимента должен обеспечить малость систематической погрешности, то критерий качества должен быть связан со вторыми моментами оценок $\hat{\theta}_i$. Малость $D\hat{\theta}_i$ обеспечивает также малость систематической ошибки. Имеется ряд результатов относительно допустимости планов h по отношению к векторному критерию $\{D\hat{\theta}_i(y, h, s_1)\}_{i=1}^m$. Для их формулировки необходимы следующие определения и факты.

Система функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ называется *регулярной* на \mathcal{X} , если она линейно независима на любом подмножестве \mathcal{X} , μ -мера которого отлична от нуля. В противном случае она называется *нерегулярной*.

К числу регулярных систем относятся, в частности, чебышевские системы. Многочлены и тригонометрические функции образуют регулярные системы. Кусочно-постоянные функции (в частности, функции Хаара), а также сплайны могут служить примерами функций, образующих нерегулярные системы. Для дискретной меры все системы функций нерегулярны.

При $N = m$ (*насыщенное планирование*) в неравенстве для $D\hat{\theta}_i$ из теоремы 1 имеет место знак равенства, если система $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ регулярна.

Анализ выражения для $D\hat{\theta}_i$ в случае $N = m$ и регулярной системы функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ показывает, что дисперсия содержит два слагаемых, причем первое есть квадрат расстояния $\eta(x)$ от линейной оболочки $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$, а второе полностью определяется случайной ошибкой. В случае независимых равноточных наблюдений с дисперсией σ^2 — это просто σ^2 . Если эксперимент допускает повторные наблюдения в одних и тех же точках, то полученное выражение для $D\hat{\theta}_i$ может служить основой для методов разделения систематической и случайной составляющей дисперсии $\hat{\theta}_i$ (т. е. процедур типа дисперсионного анализа).

В частном случае $m = N$ приходим к процедуре (h_0, s_0) , где функция распределения $h_0(Q)$ определяется равенством

$$h_0(Q) = \frac{1}{m!} \Delta^2(Q),$$

а $\Delta = \det \{f_1(x_j), \dots, f_m(x_j)\}_{j=1}^m$, метод оценивания s_0 — метод интерполяции.

Пусть функция плотности распределения $\tilde{h}_1(Q)$ определяется равенством

$$\tilde{h}_1(Q) = \left[1 + \sum_{l=1}^L \beta_l \sum_{\varphi < q} \psi_l(x_\varphi) \psi_l(x_q) \right] h_1(Q);$$

где $\psi_l(x)$ ($l = 1, \dots, L$) — линейно независимые функции, ограниченные почти всюду (mod μ) в \mathcal{X} и ортогональные к всевозможным произведениям $f_i(x)f_j(x)$ и $f_l(x)$ ($i, j = 1, \dots, m$), β_l ($l = 1, \dots, L$) — положительные константы, удовлетворяющие при почти всех (mod μ^N) $Q \in \mathcal{X}^N$ условию

$$\sum_{l=1}^L \beta_l \sum_{p < q} \psi_l(x_p) \psi_l(x_q) \geq -1.$$

Тогда $\tilde{h}_i(Q)$ удовлетворяет условиям несмещенности в метрике $L^2(\mathcal{X}, \mu)$. Если $\Phi_D = \{D\hat{\theta}_i(y, h, s_i); i = 1, \dots, m; \eta(x) \in L^2(\mathcal{X}, \mu)\}$ — критерий оптимальности, то:

1. Процедура (h_1, s_1) недопустима по отношению к Φ_D , если $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ регулярна в \mathcal{X} по отношению к μ .

2. Если $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ — система функций Хаара, то (h_0, s_0) допустима по отношению к Φ_D .

3. Если $\{f_i(x)\}_{i=1}^m$ регулярна и существуют $\psi_i(x)$ с указанными выше свойствами, то (\tilde{h}_1, s_1) доминирует (h_1, s_1) по отношению к Φ_D .

Здесь, как и ранее, s_1 обозначает процедуру оценивания по методу наименьших квадратов.

Ряд допустимых процедур (h, s_1) построен в связи с изучением случайных квадратурных формул, в особенности так называемых случайных квадратурных формул с одним свободным узлом.

Ряд результатов для скалярных критериев оптимальности общего вида связан с теоремой двойственности для рассмотренной выше задачи рандомизованного несмещенного в метрике $L^2(\mathcal{X}, \mu)$ планирования.

Теорема 2. Пусть носитель \mathcal{X} меры μ есть компакт, $\Phi'(s, Q)$ — $h_1(Q)$ -непрерывная функция на \mathcal{X}^N . Двойственной к исходной задаче является задача определения функции $\pi^*(x)$:

$$\pi^*(x) = \text{Arg sup}_{\pi} \sum_{j=1}^m f_j(x) \int_{\mathcal{X}} \pi(x) f_j(x) \mu(dx)$$

при ограничении

$$\sum_{j=1}^m f_j(x) \theta_j(\eta, h_1, s_1) \leq \Phi'(x, Q) \pmod{h_1}.$$

Если также и $f_j(x)$ непрерывны на \mathcal{X} ($j = 1, \dots, m$), то существуют решения h^* прямой и двойственной задач линейного программирования. При этом

$$\int_{\mathcal{X}^N} \Phi'(x, Q) h^*(Q) \mu^N(dQ) = \sum_{j=1}^m f_j(x) \int_{\mathcal{X}} \pi^*(x) f_j(x) \mu(dx).$$

Теория несмещенного планирования для конкретного вида функций $f_i(x)$ и мер μ приводит к ряду содержательных результатов. Некоторые из результатов, приведенных выше, переносятся

также на случай, когда $\eta(x)$ принадлежит пространству функций, отличному от $L^2(\mathcal{X}, \mu)$ или конечномерному подпространству $L^2(\mathcal{X}, \mu)$.

Пусть \mathcal{F} и $\mathcal{R} \subset \mathcal{F}$ — конечномерные подпространства $L^2(\mathcal{X}, \mu)$, $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_2}$, $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1}$ — ортонормированные базисы \mathcal{F} и \mathcal{R} . При использовании для оценивания параметров метода наименьших квадратов по теореме 1 найдется по крайней мере один план h_1 , обеспечивающий выполнение условий несмещенности.

Теорема двойственности, сформулированная выше, позволяет определить структуру и итерационный метод нахождения Φ -оптимальных несмещенных планов эксперимента в классе планов вида $0 \leq h(Q) \leq ch_1(Q)$; где $c \geq 1$ — некоторая константа. Для простоты изложения ограничимся случаем $N = m_1$. Положим

$$\varphi_1(Q) = ch_1(Q),$$

$$\varphi_{i+1}(Q) = \sum_{j=1}^{m_1} f_j(x) A_{m_1+i,j} h_1(Q), \quad i = 1, \dots, m_2 - m_1,$$

где $A_{ij} = A_{ij}(h_1, s_1)$, $h_1(Q)$ определены в теореме 1,

$$\varphi_{r+1}(Q) = -c\Phi'(x, Q)h_1(Q), \quad r = m_2 - m_1 + 1.$$

Тогда Φ -оптимальный несмещенный (в указанном классе) план существует и имеет вид $\pi^*(Q)h_1(Q)$, где

$$\pi^*(Q) = \begin{cases} 1, & \sum_{i=1}^r \varphi_i(Q) k_i^* \leq \varphi_{r+1}(Q), \\ 0 & \text{в противном случае} \end{cases}$$

при некоторых $k_i^* \in \mathbb{R}^1$ ($i = 1, \dots, r$). Заметим, что этот результат может быть получен и из обобщенной леммы Неймана — Пирсона, одного из основных результатов теории проверки статистических гипотез.

Введем обозначения:

$$t = (t_1, \dots, t_{m_1})^T, \quad v = (v_1, \dots, v_{m_1})^T, \quad t, v \in \mathbb{R}^{m_1},$$

$$\pi_v(Q) = \begin{cases} 1, & \sum_{i=1}^r v_i (\varphi_i(Q) - 1) \leq \varphi_{r+1}(Q), \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

$$v(t, v) = \int_{\mathcal{X}^{m_1}} \left[\varphi_{r+1}(Q) - \sum_{i=1}^r t_i (\varphi_i(Q) - 1) \right] \pi_v(Q) \mu^{m_1}(dQ),$$

$$\rho(t) = v(t, t).$$

Положим $t_i^{(0)} = 0$ ($i = 1, \dots, m_1$). На каждом шаге $k = 0, 1, \dots$ положим

$$t_i^{(k+1)}(\alpha) = t_i^{(k)} - \alpha \int_{\mathcal{X}^{m_1}} [\varphi_i(Q) - 1] \pi_{v^{(k)}}(Q) \mu^{m_1}(dQ),$$

$$t_i^{(k+1)} = t_i^{(k+1)}(\alpha_k^*),$$

где $\alpha_k^* = \text{Arg} \min_{\alpha \in [0,1]} \rho(t^{(k+1)}(\alpha))$. Последовательность $t^{(k)}$ имеет точку сгущения t^* и $\pi^*(Q)h_1(Q) = \pi_{t^*}(Q)h_1(Q)$ есть Ф-оптимальный несмещенный план эксперимента.

Литература к § 2: [16, 23, 60].

§ 3. Оптимальное несмещенное планирование при условии, что функция регрессии принадлежит конечномерным пространствам функций

1. Постановка задачи. Свойство несмещенности, определенное в § 2 для рандомизованных планов, вводится также и для детерминированных (непрерывных) планов, когда функция регрессии принадлежит конечномерному подпространству $L^2(\mathcal{X}, \mu)$. Пусть \mathcal{F} и $\mathcal{R} \subset \mathcal{F}$ — конечномерные подпространства $L^2(\mathcal{X}, \mu)$ μ -интегрируемых с квадратом на \mathcal{X} функций соответственно с базисами $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_2}$, $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1}$, причем $m_1 < m_2$. Считаем $\eta \in \mathcal{F}$, и при каждом x_j из \mathcal{X} возможно измерение $y(x_j) = \eta(x_j, \theta) + \varepsilon(x_j)$, где $E\varepsilon(x_j) = 0$, $E\varepsilon(x_j)\varepsilon(x_r) = \sigma_{jr}$, $\Sigma = \{\sigma_{jr}\}$ — невырожденная матрица. Пусть ξ — непрерывный план эксперимента:

$$\xi = \{x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n\}, \quad \sum_{j=1}^n p_j = 1, \quad p_j > 0,$$

где x_j — различные точки наблюдений, p_j — веса наблюдений в них, s — линейный относительно результатов наблюдений метод получения оценок $\hat{\theta}_i$ ($i = 1, \dots, m_1$) в модели $\hat{\eta}_{m_1}(x; y, \xi, s)$:

$$\hat{\theta}^{(1)} = AY,$$

где $\hat{\theta}^{(1)} = (\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_{m_1})^T$, $A = (A_{11}, \dots, A_{1n})_{i=1}^{m_1}$ — матрица коэффициентов, не зависящих от результатов наблюдений, $Y = (y_1, \dots, y_n)^T$ — вектор результатов наблюдений в точках плана.

Несмещенная в метрике $L^2(\mathcal{X}, \mu)$ процедура определяется равенством

$$B_{L^2}^* \equiv \int_{\mathcal{X}} [\eta(x, \theta) - E\hat{\eta}_{m_1}(x, y, \xi^*, s^*)]^2 \mu(dx) = \inf_{\xi \in \mathcal{Z}, s \in \mathcal{S}},$$

где
$$\hat{\eta}(x, \theta) = \sum_{i=1}^{m_2} \theta_i f_i(x) = \theta^T f(x),$$

$$\theta^T = (\theta_1, \dots, \theta_{m_2}), \quad f(x) = (f_1(x), \dots, f_{m_2}(x))^T.$$

Часто полагают также $\mu(dx) = w(x)dx$. Весовую функцию вводят при необходимости придать ошибкам приближения в некоторых точках $x \in \mathcal{X}$ больший вес.

Для несмещенных в метрике L^2 процедур задача выбора Ф-оптимальной процедуры для критериев, являющихся функциона-

лами от матрицы ковариаций, формулируется следующим образом (см. § 1):

$$(\xi^*, s^*) = \text{Arg} \inf_{\xi \in \mathcal{E}', s \in \mathcal{S}'} \Phi [D^{(1)}(\xi, s)],$$

где $D^{(1)}(\xi, s) = ND(\hat{\theta}^{(1)})$ — нормированная ковариационная матрица оценок параметров, N — общее число наблюдений ($N \geq n$).

Поставленную задачу имеет смысл рассматривать при так называемом *условии сверхнасыщенности*: $n < m_2$, ибо в противном случае она легко сводится к задаче усеченного планирования в классической постановке и теряет самостоятельное значение. Кроме того, ограничение на число точек плана хорошо согласуется с природой систематической ошибки в подобных задачах.

2. Основные результаты для регрессии общего вида.

2.1. Необходимые и достаточные условия несмещенности в метрике L^2 . Обобщение основной схемы Гаусса — Маркова на случай присутствия систематической ошибки и коррелированных наблюдений было приведено в § 1.2.

Из этих результатов непосредственно следует.

1) Для несмещенности в метрике $L^2(\mathcal{X}, \mu)$ процедуры (ξ, s) необходимо и достаточно, чтобы выполнялось любое из следующих эквивалентных условий:

а) Параметрическая вектор-функция $T\theta$ допускает оценку, т. е. $E\hat{\theta}^{(1)} = T\theta$, где

$$T = (I_{m_1} : W_{11}^{-1}W_{12}), \quad W_{11} = \int_{\mathcal{X}} f^{(1)}(x) (f^{(1)}(x))^T \mu(dx),$$

$$W_{12} = \int_{\mathcal{X}} f^{(1)}(x) (f^{(2)}(x))^T \mu(dx), \quad f^T(x) = ((f^{(1)}(x))^T : (f^{(2)}(x))^T),$$

$$f^{(1)}(x) = (f_1(x), \dots, f_{m_1}(x))^T; \quad f^{(2)}(x) = (f_{m_1+1}(x), \dots, f_{m_2}(x))^T.$$

б) $AF = T$, где $F = (f_1(x_j), \dots, f_{m_2}(x_j))_{j=1}^n$.

в) $TM^{-1}(\xi)M(\xi) = T$, где $M(\xi)$ — информационная матрица.

2) Наилучшие линейные несмещенные оценки $\hat{\theta}^{(1)}$ в процедуре (ξ, s) вычисляются по формуле

$$\hat{\theta}^{(1)} = T(F^T D^{-1}(Y)F)^{-1} F^T D^{-1}(Y)Y,$$

где $D(Y) = P^{-1/2} \Sigma P^{-1/2}$ — матрица ковариаций ошибок наблюдений в точках плана с учетом их весов, $\Sigma = \{\sigma_{jr}\}_{j,r=1}^n$, $P = \{p_j \delta_{jr}\}_{j,r=1}^n$ — диагональная матрица весов наблюдений.

3) Нормированная ковариационная матрица НЛН-оценок $\hat{\theta}^{(1)}$ равна

$$D^{(1)}(\xi) = T(F^T D^{-1}(Y)F)^{-1} T^T.$$

4) Минимальное значение систематической ошибки равно

$$B_{L^2}^* = (\theta^{(2)})^T [W_{22} - W_{12}^T W_{11}^{-1} W_{12}] \theta^{(2)},$$

где $\theta^{(2)} = (\theta_{m_1+1}, \dots, \theta_{m_2})^T$, $W_{22} = \int_{\mathcal{X}} f^{(2)}(x) (f^{(2)}(x))^T \mu(dx)$, и достигается для любого плана эксперимента, при котором параметрическая вектор-функция $T\theta$ допускает оценку.

Заметим, что в силу жесткого ограничения на число точек несмещенного плана ($n < m_2$) информационная матрица $M(\xi) = F^T D^{-1}(Y) F$ вырождена, и любой несмещенный в метрике L^2 план будет сингулярным. В дальнейшем будем считать, что матрица F имеет полный строчный ранг, причем $|F_{nm}| \equiv \det \{f_1(x_j), \dots, f_n(x_j)\}_{j=1}^n \neq 0$. Важно отметить, что условия несмещенности в метрике L^2 не ограничивают выбор весов наблюдений в процедуре (ξ, s) и условие в) может быть записано как

$$TF - F = T.$$

Приведенные результаты позволяют выбрать и зафиксировать метод оценивания и рассмотреть задачу выбора Φ -оптимального плана

$$\xi^* = \text{Arg} \inf_{\xi \in \Xi'} \Phi [TM^+(\xi) T^T],$$

где Ξ' — множество непрерывных планов, допускающих оценку $T\theta$, спектры которых сосредоточены в конечном числе $n < m_2$ точек, а веса наблюдений произвольны, $M^+(\xi)$ — псевдообратная матрица. К функционалу Φ будем предъявлять следующие требования:

- выпуклость на множестве информационных матриц;
- существование непрерывных и ограниченных частных производных $\partial\Phi/\partial D_{il}^{(1)}$ по элементам матрицы $D^{(1)}(\xi)$;
- $\Phi[D^{(1)}(\xi_1)] \leq \Phi[D^{(1)}(\xi_2)]$, если $D^{(1)}(\xi_1) \leq D^{(1)}(\xi_2)$. Случай сингулярных оптимальных планов ($\text{rg } M(\xi^*) < m_2$) существенно сложнее регулярного ($\text{rg } M(\xi^*) = m_2$), так как операция обобщенного обращения, вообще говоря, не является непрерывной, а следовательно, дифференцируемой.

Пусть

$$\xi(\alpha) = (1 - \alpha)\xi^* + \alpha\xi_1, \quad 0 \leq \alpha < 1.$$

Если план ξ^* допускает оценку $T\theta$, то этим же свойством обладает и план ξ . Можно показать, что если $\text{rang } M(\xi, \alpha) \equiv M(\alpha)$ постоянен на $[0, 1)$, то $M^+(\alpha) \in C^1$ на $[0, 1)$, в противном случае операция псевдообращения не является непрерывной на $[0, 1)$. Кроме того, если $M(\alpha) \in C^1$ и $M^+(\alpha) \in C^1$, то

$$M^+(\alpha) M(\alpha) \frac{\partial M^+(\alpha)}{\partial \alpha} M(\alpha) M^+(\alpha) = -M^+(\alpha) \frac{\partial M(\alpha)}{\partial \alpha} M^+(\alpha).$$

В сингулярном случае постоянство ранга, вообще говоря, не гарантируется, а значит, может не существовать производная $\partial M^+(\alpha)/\partial \alpha|_{\alpha=0+}$. Но из известного представления

$$TM^+T^T = \sup_H [2TH - H^T M H]$$

и свойства функции максимума следует, что элементы матрицы TM^+T дифференцируемы при $\alpha = 0$ по любому направлению $\xi_i - \xi^*$, где $\xi_i, \xi^* \in \Xi$. Отсюда можно получить выражения для производной $\partial [TM^+(\alpha)T^T]/\partial \alpha|_{\alpha=0+}$, а также аналоги необходимых и достаточных условий оптимальности плана ξ^* в сингулярном случае. Основное отличие этих условий от регулярного случая заключается в необходимости их проверки на всем множестве непрерывных планов Ξ , тогда как в регулярном случае достаточно было ограничиться множеством одноточечных планов. Это обстоятельство, а также необходимость учета требования $n < m_2$ на точки плана значительно затрудняют такой путь построения оптимальных сингулярных планов для неадекватных моделей.

Подход, упрощающий решение задачи, состоит в разбиении ее на этапы. Сначала решается задача о выборе метода оценивания, а затем находятся точки плана из условий несмещенности, причем остается свобода в выборе весов наблюдений. При таком подходе важную роль играет следующая теорема.

Теорема 3. *Достаточным условием несмещенности в метрике L^2 плана эксперимента служит совпадение его спектра с узлами кубатурной формулы*

$$\int_{\mathcal{X}} g(x) \mu(dx) \approx \sum_{j=1}^n C_j g(x_j), \quad n < m_2,$$

точной для произведений функции $f_i(x)f_l(x)$ ($i = 1, \dots, m_1, l = 1, \dots, m_2$). При этом матрица A в линейном методе оценивания может быть также вычислена по формуле

$$A = W_{11}^{-1} F_1^T C,$$

где $F_1 = (f_1(x_j), \dots, f_{m_1}(x_j))_{j=1}^n$, $C = (C_j \delta_{jr})_{j,r=1}^n$.

Этот результат указывает на связь задачи несмещенного в метрике L^2 планирования с теорией интерполяционно кубатурных формул. Известные результаты этой теории позволяют в отдельных случаях аналитически получить решение задачи оптимального несмещенного планирования.

Во многих задачах предпочтения заслуживают кубатурные формулы, содержащие наименьшее число узлов. Искомый спектр обладает следующим свойством: точки несмещенного в метрике L^2 плана суть общие нули обобщенных полиномов вида

$$\omega_{n+r}(x) = \tilde{f}_{n+r}(x) - \lambda_{m_1+1}^{(n+r)} \tilde{f}_{m_1+1}(x) - \dots - \lambda_n^{(n+r)} \tilde{f}_n(x),$$

где $r = 1, \dots, m_2 - n$, $\lambda_i^{(n+r)}$ — произвольные константы, $\tilde{f}_i(x)$ — μ -ортонормированные в \mathcal{X} функции.

2.2. Оптимальные несмещенные процедуры. Итак, пусть спектр несмещенного в метрике L^2 плана найден с использованием приведенных выше результатов и зафиксирован, а веса

наблюдений требуется выбрать из решения следующей экстремальной задачи:

$$p^* = \text{Arg inf}_{p \in \Omega} \Phi [D^{(1)}(\xi(p))];$$

где $p = (p_1, \dots, p_n)^T$, $\Omega = \left\{ p \in \mathbf{R}^n \mid p_j > 0, \sum_{j=1}^n p_j = 1 \right\}$, функционал $\Phi[D^{(1)}(\xi(p))]$ удовлетворяет следующим условиям:

а) $\Phi(p)$ — выпуклый функционал на Ω :

$$\Phi[(1-\alpha)p^{(1)} + \alpha p^{(2)}] \leq (1-\alpha)\Phi(p^{(1)}) + \alpha\Phi(p^{(2)}), \quad 0 < \alpha < 1;$$

б) существуют непрерывные и ограниченные частные производные $\partial\Phi(p)/\partial p$ на Ω ;

в) $\Phi(p^{(1)}) \leq \Phi(p^{(2)})$, если $D^{(1)}(\xi(p^{(1)})) \leq D^{(1)}(\xi(p^{(2)}))$.

Теорема 4.1 Существует p^* , доставляющее в Ω инфимум $\Phi[D^{(1)}(\xi(p))]$. При строгой выпуклости $\Phi(p)$ оно единственно.

2) Необходимым и достаточным условием оптимального выбора весов наблюдений p_1^*, \dots, p_n^* в точках несмещенного плана служит выполнение для всех x_r ($r = 1, \dots, n$) равенства

$$\sum_{j=1}^n p_j^* \varphi_{jr}(\xi^*) = \text{tr } D^{(1)} \frac{\partial \Phi}{\partial D^{(1)}} \Big|_{D^{(1)}=D^{(1)}(\xi^*)},$$

где

$$\varphi_{jr}(\xi) = \sigma_{jr} p_j^{-3/2} A_j^T \frac{\partial \Phi}{\partial D^{(1)}} \Big|_{D^{(1)}(\xi)} A_r p_r^{-3/2},$$

$\xi^* = (x_1, \dots, x_n; p_1^*, \dots, p_n^*)$; A_j ($j = 1, \dots, n$) — столбцы матрицы A , x_j — точки спектра несмещенного плана.

Учет коррелированности наблюдений может привести к потере выпуклости функционала $\Phi[D^{(1)}(p)]$. Так, например, для выпуклости линейного критерия $\text{tr } BD^{(1)}(p)$ на Ω необходимо и достаточно выполнение неравенств $\sigma_{jr} A_j^T B A_r \geq 0$ ($j, r = 1, \dots, n$). Условия теоремы 4 и для невыпуклых функционалов остаются необходимыми.

Следствие 1. Для случая некоррелированных наблюдений условия теоремы 4 принимают вид

$$\varphi_j(\xi^*) = \text{tr } D^{(1)} \frac{\partial \Phi}{\partial D^{(1)}} \Big|_{D^{(1)}=D^{(1)}(\xi^*)}, \quad j = 1, \dots, n,$$

где

$$\varphi_j(\xi) = \lambda^{-1} (x_j) p_j^{-2} A_j^T \frac{\partial \Phi}{\partial D^{(1)}} \Big|_{D^{(1)}(\xi)} A_j, \quad \lambda(x_j) = \sigma_{jj}^{-1}.$$

При фиксированном спектре плана можно гарантировать существование производной $\partial M^+(\xi)/\partial \alpha$, где $\xi = (1-\alpha)\xi^* + \alpha\xi_1$, так как $\text{rg } M(\xi) = \text{rg } M(\xi^*)$. Поэтому следствие 1 легко может быть переформулировано в терминах псевдообратных матриц: необхо-

димым и достаточным условием оптимального выбора весов p_1^*, \dots, p_n^* в точках спектра несмещенного плана для случая некоррелированных наблюдений служит выполнение для всех $j = 1, \dots, n$ равенства

$$\varphi_j(\xi^*) = \operatorname{tr} M^+ \left. \frac{\partial \Phi [TM^+(\xi) T^T]}{\partial M^+} \right|_{M^+(\xi^*)},$$

где

$$\varphi_j(\xi) = \lambda^{-1}(x_j) f^T(x_j) M^+(\xi) \left. \frac{\partial \Phi}{\partial M^+} \right|_{M(\xi)} M^+(\xi) f(x_j).$$

Следствие 2. Для случая некоррелированных наблюдений и линейных критериев оптимальности вида $\operatorname{tr} BD^{(1)}(p)$ оптимальные веса наблюдений вычисляются по формуле

$$p_j^* = [A_j^T B A_j / \lambda(x_j)]^{1/2} / \sum_{r=1}^n [A_r^T B A_r / \lambda(x_r)]^{1/2}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Можно также показать, что в случае коррелированных наблюдений оптимальные по критерию $\operatorname{tr} BD^{(1)}(p)$ веса p_1^*, \dots, p_n^* находятся при условии $\sigma_{jr} A_j^T B A_r \geq 0$ ($j, r = 1, \dots, n$) методом простой итерации:

$$p_j^* = \lim_{t \rightarrow \infty} p_j^{(t)},$$

где

$$p_j^{(t)} = [\operatorname{tr} BD^{(1)}(p^{(t-1)})]^{-1} \sum_{r=1}^n \sigma_{jr} A_j^T B A_r \left(\sqrt{p_j^{(t-1)} p_r^{(t-1)}} \right), \\ j = 1, \dots, n.$$

Если к выбору весов наблюдений предъявляется требование дискретности, т. е. $p_j = r_j/N$, где r_j — положительные целые числа, N — общее число наблюдений, то справедливо следующее утверждение.

Теорема 5. При r_j целых положительных и некоррелированных наблюдениях справедливо следующее.

1) Решение задачи поиска Φ -оптимальных весов наблюдений p^* в $\Omega_N = \left\{ p \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{j=1}^n p_j = 1, p_j > 0, p_j N = r_j - \text{целые числа} \right\}$ существует, но не обязательно единственно.

2) Необходимым условием оптимального выбора чисел наблюдений r_1^*, \dots, r_n^* в точках дискретного несмещенного плана $\xi_N = (x_1, \dots, x_n; r_1/N, \dots, r_n/N)$ служит выполнение для всех пар (x_i, x_l) ($i, l = 1, \dots, n, i \neq l, r_i > 1$) неравенств

$$\Delta(x_i, x_l) \geq 0,$$

где

$$\Delta(x_i, x_l) = \begin{cases} \frac{R_{ii}}{r_i(r_i-1)} - \frac{R_{ll}}{r_l(r_l+1)}, & \text{если } \Phi[D^{(1)}(\xi_N^*)] = \text{tr} BD^{(1)}(\xi_N), \\ \frac{NR_{ii}}{r_i(r_i-1)} - \frac{NR_{ll}}{r_l(r_l+1)} - \frac{N^2 [R_{ii}R_{ll} - R_{il}^2]}{r_i(r_i-1)r_l(r_l+1)}, & \\ \text{если } \Phi[D^{(1)}(\xi_N)] = |D^{(1)}(\xi_N)|; \end{cases}$$

$$R_{i,l} = \sigma_{ii}^{1/2} \sigma_{ll}^{1/2} A_i^T \frac{\partial \Phi}{\partial D} \Big|_{D(\xi_N^*)} A_l,$$

$$\xi_N^* = \left(x_1, \dots, x_n, \frac{r_1^*}{N}, \dots, \frac{r_n^*}{N} \right).$$

2.3. Минимаксные критерии. Случай критериев минимаксного типа требует специального исследования. Рассмотрим задачу выбора весов наблюдений при некоррелированных наблюдениях. Пусть требуется найти план

$$\xi^* = \text{Arg inf}_{p \in \Omega} \sup_{\gamma \in \Gamma} \Phi [D^{(1)}(p), \gamma],$$

где Γ — компакт, $\Phi[D^{(1)}(p), \gamma]$ — функционал, удовлетворяющий при любом $\gamma \in \Gamma$ тем же требованиям, что и выше. Необходимым условием оптимального выбора весов p_1^*, \dots, p_n^* в точках x_1, \dots, x_n несмещенного плана служит выполнение для всех $j = 1, \dots, n$ неравенства

$$\sup_{\gamma \in \Gamma^*} \text{tr} \frac{\partial \Phi [D^{(1)}(p), \gamma]}{\partial D^{(1)}} \Big|_{D^{(1)}=D^{(1)}(p^*)} \left[D^{(1)}(p^*) - \frac{A_j A_j^T}{\lambda(x_j)(p_j^*)^2} \right] \geq 0,$$

где

$$\Gamma^* = \{ \gamma^* | \gamma^* = \text{Arg sup}_{\gamma \in \Gamma} \Phi [D^{(1)}(p^*), \gamma] \}.$$

Аналогично, необходимым и достаточным условием оптимальности вектора p^* в рассматриваемой задаче служит выполнение для любого $p \in \Omega$ неравенства

$$\sup_{\gamma \in \Gamma^*} \text{tr} \frac{\partial \Phi [D^{(1)}(p), \gamma]}{\partial D^{(1)}} \Big|_{D^{(1)}=D^{(1)}(p^*)} \left[D^{(1)}(p^*) - \sum_{j=1}^n p_j \frac{A_j A_j^T}{\lambda(x_j)(p_j^*)^2} \right] \geq 0.$$

Это условие необходимо проверять на всем множестве Ω , а не только в одной точке, что существенно снижает его практическое значение. Привлечение известных численных методов поиска минимакса приводит в таких задачах к довольно сложным и зачастую медленно сходящимся процедурам. В то же время в конкретных случаях вычисления можно значительно упростить, а решение найти за конечное число шагов. В частности, значительные упрощения возможны для дискретных минимаксных за-

дач, т. е. когда Γ — дискретное множество, и если \bar{p} принадлежит границе области Ω , то можно найти такое $\gamma \in \Gamma$, что $\Phi[D^{(1)}(\bar{p}), \gamma] = \infty$.

Наиболее употребительными критериями минимаксного типа в задаче поиска оптимальных весов наблюдений при фиксированном спектре несмещенного плана и некоррелированных наблюдениях являются следующие. Будем называть выбор весов p^* *E-оптимальным*, если $p^* = \text{Arg min}_{p \in \Omega} \max_{i=1, \dots, m_1} \alpha_i [D^{(1)}(p)]$, где

$\alpha_i [D^{(1)}(p)]$ — собственные значения ковариационной матрицы $D^{(1)}(p)$; *MV-оптимальным*, если $p^* = \text{Arg min}_{p \in \Omega} \max_{i=1, \dots, m_1} D_{ii}^{(1)}(p)$; где

$D_{ii}^{(1)}(p)$ — диагональные элементы ковариационной матрицы $D^{(1)}(p)$; *G-оптимальным*, если $p^* = \text{Arg min}_{p \in \Omega} \max_{x \in Z} (f^{(1)}(x))^T D^{(1)}(p) \times \times f^{(1)}(x)$.

Последний критерий путем введения сетки на Z можно приближенно заменить на критерий дискретного минимакса, и в такой постановке задача *G-оптимального* выбора весов не будет, по существу, отличаться от случая *MV-критерия*. Обозначим через r кратность максимального собственного числа матрицы $D^{(1)}(p^*)$

$$\alpha_1(p^*) = \max_{i=1, \dots, m_1} \alpha_i(p^*) = \max_{v \in V} v^T D^{(1)}(p^*) v,$$

где $V = \{v \in \mathbb{R}^{m_1} \mid \|v\| = 1\}$. Через r будем также обозначать кратность максимального диагонального элемента матрицы $D^{(1)}(p^*)$:

$$D_{i1}^{(1)}(p^*) = \max_{i=1, \dots, m_1} D_{ii}^{(1)}(p^*) = \max_{l_i \in L} l_i^T D^{(1)}(p^*) l_i,$$

где $L = \{l_i \in \mathbb{R}^{m_1}, \quad i = 1, \dots, m_1 \mid l_i^T = (0, \dots, 0, \underbrace{1}_{i}, 0, \dots, 0)\}$.

Теорема 6. При сделанных выше предположениях справедливо.

1) Решения задач *E-* и *MV-оптимального* выбора весов наблюдений существуют в Ω .

2) Если $r = 1$, то необходимым и достаточным условием того, что p^* — *E-оптимальный* вектор весов, служит равенство

$$[A_j^T v^*] / [(p_j^*)^2 \lambda(x_j)] = \alpha_1(p^*), \quad j = 1, \dots, n,$$

где v^* — собственный вектор, соответствующий p^* , причем

$$v^* = (1 / \sqrt{\alpha_1(p^*)}) \sum_{j=1}^n \lambda^{-1/2}(x_j) b_j^* A_j, \quad \|v^*\| = 1,$$

$$b^* = \text{Arg max}_{b \in B} b^T \sum_{i=1}^n A_i^T A_i \sum_{i=1}^n b_i,$$

$$B = \{b = (b_1, \dots, b_n)^T \mid |b_k| = 1, \quad k = 1, \dots, n\}.$$

3) Если $r=1$, то необходимым и достаточным условием того, что p^* — MV -оптимальный вектор весов, служит равенство

$$[A_j^T l_i^*]^2 / [(p_j^*)^2 \lambda(x_j)] = D_{11}(p^*), \quad j = 1, \dots, n,$$

где $l_i^* = \text{Arg max}_{l_i \in L} l_i^T D^{(1)}(p^*) l_i$, причем $p^* = p^{(i_1)}$, где $i_1 \in J = \{i \mid p^{(i)} = (p_1^{(i)}, \dots, p_n^{(i)})^T = \text{Arg min}_{p \in \Omega} l_i^T D^{(1)}(p) l_i, p^{(i)} \in \Omega\}$ и $i_1 = \text{Arg max}_{i=1, \dots, m_1} D_{ii}^{(1)}(p^{(i)})$.

Если $r > 1$, то указанные в пп. 2) и 3) условия являются только достаточными.

Следствие. Пусть система функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1}$ ортонормирована в \mathcal{X} ; $f_i(x) \equiv 1$, а несмещенный в метрике L^2 план сосредоточен в узлах кубатурной формулы из теоремы 3, причем коэффициенты этой формулы положительны: $C_j > 0$ ($j = 1, \dots, n$) и $\lambda(x_j) = \sigma^{-2} = \text{const}$. Тогда E - и MV -оптимальные веса совпадают: $p_j^* = C_j$, $j = 1, \dots, n$.

2.4. Численные методы. Если множество \mathcal{X} не имеет стандартного вида (например, гиперкуб, гипершар или гиперсимплекс), то готовыми кубатурными формулами не удастся непосредственно воспользоваться для синтеза несмещенного плана. В этих случаях естественно обратиться к численным методам поиска спектра несмещенного плана.

Отправной точкой для численной процедуры может служить, например, следующее неравенство:

$$m_1 \geq \text{tr } \tilde{T} \tilde{F}_n^+ \tilde{F}_n \tilde{T}^T \geq 0,$$

причем равенство в левой части имеет место тогда и только тогда, когда $\{x_j\}_{j=1}^n$ — точки спектра несмещенного плана ξ ($n < m_2$). Оно является простым следствием необходимых и достаточных условий несмещенности плана ξ

$$\tilde{T} \tilde{F}_n^+ \tilde{F}_n = \tilde{T},$$

записанным по отношению к μ -ортонормированной системе функций $\{\tilde{f}_i(x)\}_{i=1}^{m_2}$, для которой $\tilde{T} = (I_{m_1} \mid 0)$, $\tilde{F}_n = (\tilde{f}_1(x_j), \dots, \tilde{f}_{m_2}(x_j))_{j=1}^n$, $\tilde{F}_n^+ \tilde{F}_n$ — проектор из \mathbf{R}^{m_2} на подпространство, натянутое на векторы $\tilde{f}(x_1), \dots, \tilde{f}(x_n)$, причем сужение $\tilde{F}_n^+ \tilde{F}_n$ на \mathbf{R}^{m_1} есть единичный оператор тогда и только тогда, когда ξ — несмещенный план.

Использование этого неравенства позволяет заменить исходную задачу поиска спектров несмещенных планов из условий несмещенности на задачу максимизации функции $\text{tr } \tilde{T} \tilde{F}_n^+ \tilde{F}_n \tilde{T}^T$ в $\mathcal{X}^n = \mathcal{X} \times \mathcal{X} \times \dots \times \mathcal{X}$ (n раз).

Пусть $\text{supp } \xi^{(t)}$ — носитель плана $\xi^{(t)}$ — образуется из $\text{supp } \xi^{(t-1)} = \{x_1^{(t-1)}, \dots, x_j^{(t-1)}, \dots, x_n^{(t-1)}\}$ заменой точки $x_j^{(t-1)}$ на некоторую точку $x^{(t)}$ из \mathcal{X} . Тогда приращение целевой функции может быть вычислено по формуле

$$\begin{aligned} \Delta(x_j^{(t-1)}, x^{(t)}) &\equiv: \\ &\equiv \text{tr } \tilde{T} [\tilde{F}_n^{(t)}] + \tilde{F}_n^{(t)} \tilde{T}^T - \text{tr } \tilde{T} [\tilde{F}_n^{(t-1)}] + \tilde{F}_n^{(t-1)} \tilde{T}^T = \\ &= [T\psi(x^{(t)})]^T T\psi(x^{(t)}) / \psi^T(x^{(t)}) \psi(x^{(t)}) - \\ &\quad - [T\psi(x_j^{(t-1)})]^T T\psi(x_j^{(t-1)}) / \psi^T(x_j^{(t-1)}) \psi(x_j^{(t-1)}), \end{aligned}$$

причем в случае, когда $\psi(x) \equiv (I - [\tilde{F}_{n-1}^{(t-1)}] + \tilde{F}_{n-1}^{(t-1)}) \tilde{f}(x) = 0$, соответствующая дробь считается равной нулю, где обозначено

$$\tilde{F}_n^{(t-1)} = \begin{bmatrix} \tilde{F}_{n-1}^{(t-1)} & & \\ & \ddots & \\ & & \tilde{f}^T(x_j^{(t-1)}) \end{bmatrix}, \quad \tilde{F}_n^{(t)} = \begin{bmatrix} \tilde{F}_{n-1}^{(t-1)} & & \\ & \ddots & \\ & & \tilde{f}^T(x^{(t)}) \end{bmatrix}.$$

Приведенное выше соотношение лежит в основе следующего алгоритма численного поиска спектра несмещенного в метрике L^2 плана.

Процедура 1.

1) Полагается $n = m_1$.
 2) Выбирается с помощью некоторого случайного механизма $\text{supp } \xi^{(0)} = \{x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}\}$. Если $m_1 - \text{tr } \tilde{T} [\tilde{F}_n^{(0)}] + \tilde{F}_n^{(0)} \tilde{T}^T < \nu$, где ν — заданная точность, то $\xi^{(0)}$ — несмещенный план. Иначе переходят к п. 3.

3) Находится при $t = 1$

$\text{supp } \xi^{(t)} \equiv$

$$\equiv \{x_1^{(t)}, \dots, x_n^{(t)}\} = \{x_1^{(t-1)}, \dots, x_{j-1}^{(t-1)}, x^{(t)}, x_{j+1}^{(t-1)}, \dots, x_n^{(t-1)}\},$$

где

$$(x_j^{(t-1)}, x^{(t)}) = \text{Arg} \max_{(x_j^{(t-1)}, x) \in J_{t-1}} \Delta(x_j^{(t-1)}, x),$$

$$J_{t-1} = \{x_j^{(t-1)} \in \text{supp } \xi^{(t-1)}, x \in \mathcal{X} \mid \Delta(x_j^{(t-1)}, x) > \nu > 0\}.$$

4) Если J_{t-1} — непустое множество, то проверяется на t -ом шаге условие п. 2. При его выполнении процесс останавливается, в противном случае пп. 3, 4 повторяются при $t = t + 1$.

5) Если J_{t-1} — пустое множество, то полагается $n = m_1 + 1$ и процесс возвращается к п. 2.

6) Пункты 2—5 повторяются пока $n < m_2$.

Следует подчеркнуть, что лежащий в основе описанного алгоритма метод замены на каждом шаге одной точки не гарантирует сходимости к спектру несмещенного плана, даже если последний существует, и обычно применяемый в таких случаях

прием состоит в многократном повторении итерационной процедуры из различных начальных планов.

На связь теории несмещенного планирования с теорией двойственности (см. гл. 2) указывает следующий результат: при любом фиксированном $\bar{x} \in \mathcal{X}$ при условии $(\tilde{f}^{(1)}(\bar{x}))^T \tilde{T} \tilde{F}_n^+ \tilde{F}_n z \leq$

$$\leq (\tilde{f}^{(1)}(\bar{x}))^T \tilde{f}^{(1)}(\bar{x}) \max_{z \in \mathbb{R}^{m_2}} (\tilde{f}^{(1)}(\bar{x}))^T \tilde{T} z \text{ равен } (f^{(1)}(\bar{x}))^T f^{(1)}(\bar{x}), \text{ при-}$$

чем максимум достигается при $z^T = ((f^{(1)}(\bar{x}))^T; 0)$, а равенство в указанном условии достигается тогда и только тогда, когда $\{x_j\}_{j=1}^n$ — точки спектра несмещенного плана.

Наличие соотношений двойственности также указывает на возможность рекуррентного построения несмещенного плана.

Пусть, далее, спектр несмещенного плана найден и зафиксирован. Как следует из предыдущих результатов данного параграфа, аналитическое решение задачи выбора оптимального вектора весов удается получить лишь для некоторых частных случаев. В общем же случае приходится обращаться к численным методам решения этой задачи, в основу которых могут быть положены теоремы 4, 5 в сочетании с итерационными методами из гл. 4.

Процедура 2. Непрерывное планирование при коррелированных наблюдениях для критериев общего вида.

1) Разыгрывается с помощью некоторого случайного механизма начальный непрерывный план $\xi^{(0)} = \{x_1, \dots, x_n; p_1^{(0)}, \dots, p_n^{(0)}\}$, где $\sum_{j=1}^n p_j^{(0)} = 1, p_j^{(0)} > 0 (j = 1, \dots, n)$, x_j — точки спектра несмещенного плана.

2) Составляется при $t = 1$ план

$$\xi^{(t)} = \xi^{(t-1)} + \alpha_t \xi(x_q) - \alpha_t \xi(x_r),$$

где $\xi(x)$ — план, приписывающий точке x меру 1,

$$x_q = \text{Arg} \max_{x_j, j=1, \dots, n} \sum_{s=1}^n p_s^{(t-1)} \varphi(x_j, x_s, \xi^{(t-1)}),$$

$$x_r = \text{Arg} \min_{x_j, j=1, \dots, n} \sum_{s=1}^n p_s^{(t-1)} \varphi(x_j, x_s, \xi^{(t-1)}),$$

$$\alpha_t = 2^{-h} \cdot 0,9 p_r^{(t-1)}, \quad \varphi(x_j, x_r, \xi) = \sigma_{jr} p_j^{-3/2} p_r^{-3/2} A_j^T \frac{\partial \Phi}{\partial D^{(1)}} A_r,$$

$$h = \min \{0, 1, 2, \dots \mid \Phi [D^{(1)}(\xi^{(t)})] < \Phi [D^{(1)}(\xi^{(t-1)})]\}.$$

3) Пункт 2) повторяется при $t := t + 1$.

4) Процесс останавливается, если на t -м шаге

$$\left| \sum_{j=1}^n p_j^{(t)} \varphi(x_j, x_r, \xi^{(t)}) - \text{tr} D^{(1)} \frac{\partial \Phi}{\partial D^{(1)}} \Big|_{D^{(1)}(\xi^{(t)})} \right| < \nu,$$

где ν — заданная точность, и для выпуклых функционалов принимается $\xi^{(t)} = \xi^*$ — оптимальный план.

5) Для невыпуклых функционалов пп. 1)–4) повторяются из различных начальных непрерывных планов заданное число раз, и из полученных планов выбирается наилучший по критерию Φ .

Процедура 3. Дискретное планирование при некоррелированных наблюдениях для D -критерия и линейных критериев оптимальности.

1) Разыгрывается с помощью некоторого случайного механизма начальный дискретный план.

$$\xi_N^{(0)} = \left(x_1, \dots, x_n; \frac{r_1^{(0)}}{N}, \dots, \frac{r_n^{(0)}}{N} \right), \quad \sum_{j=1}^n r_j^{(0)} = N,$$

где $r_j^{(0)}$ — целые положительные числа, x_j — точки спектра несмещенного плана.

2) Составляется при $t = 1$ план

$$\xi^{(t)} = \xi^{(t-1)} + \frac{h_t}{N} \xi(x_q) - \frac{h_t}{N} \xi(x_s),$$

где

$$h_t = \underset{h \in H}{\text{Arg min}} \Phi[D^{(1)}(\xi^{(t)})], \quad H = \{h = 1, 2, \dots \mid r_s^{(t-1)} - h > 0\},$$

$$(s, q) = \underset{i, l \in J_{t-1}}{\text{Arg max}} |\Delta_{t-1}(x_i, x_l)|,$$

$$J_{t-1} = \{i, l = 1, \dots, n \mid \Delta_{t-1}(x_i, x_l) < 0, r_i^{(t-1)} > 1\},$$

Δ_{t-1} вычисляется на $(t-1)$ -м шаге по формуле из теоремы 5.

3) Если J_{t-1} — непустое множество, то п. 2) повторяется при $t := t + 1$, в противном случае процесс останавливается.

4) Пункты 1)–3) повторяются из различных начальных дискретных планов заданное число раз и из полученных планов выбирается наилучший по критерию Φ .

Заметим, что, в отличие от соответствующей процедуры построения оптимальных непрерывных планов, последовательность $\{\xi_N^{(t)}\}$ может сходиться в некоторых случаях к плану, отличному от оптимального, так как перераспределение наблюдений между двумя точками плана может оказаться недостаточной операцией для выхода процедуры из локального экстремума. Для повышения вероятности достижения глобального экстремума в процедуре 3, как и в процедуре 2 при коррелированных наблюдениях, используется один и тот же прием: многократное повторение итераций из различных начальных планов.

Для построения дискретных оптимальных несмещенных планов можно воспользоваться и процедурой 2. В случае, если N велико, целесообразно построить непрерывный оптимальный план, а затем его округлить до дискретного. Если же N мало, то можно положить $\alpha = 1/N$ в процедуре 2, повторяя ее несколько раз с различными начальными дискретными планами

Для критериев типа дискретного минимакса теорема 6 позволяет предложить следующие алгоритмы.

Процедура 4. Непрерывное E -оптимальное планирование при некоррелированных наблюдениях.

1) Находится вектор b^* как решение задачи

$$b^* = \text{Arg max}_{b \in B} b^T \Sigma^{1/2} A^T \bar{\Delta} \Sigma^{1/2} b,$$

например, конечным перебором по элементам множества $B = \{b \in \mathbb{R}^n \mid |b_j| = 1, j = 1, \dots, n\}$ за 2^n шагов.

2) Вычисляется вектор v^* :

$$v^* = (1/\sqrt{\alpha_1(p^*)}) \sum_{j=1}^n \lambda^{-1/2}(x_j) b_j^* A_j, \quad \|v^*\| = 1,$$

причем $\alpha_1(p^*)$ играет роль константы нормировки и находится попутно.

3) Вычисляются по формуле

$$p_j^* = (|A_j^T v^*| \lambda^{-1/2}(x_j)) / \sum_{s=1}^n |A_s^T v^*| \lambda^{-1/2}(x_s), \quad j = 1, \dots, n,$$

элементы вектора p^* .

4) Вычисляется матрица $D^{(1)}(p^*) = \sum_{j=1}^n A_j A_j^T / [\lambda(x_j) p_j^*]$.

5) Если вектор v^* , вычисленный в п. 2), является собственным вектором $D^{(1)}(p^*)$, соответствующим максимальному собственному числу, то найденный вектор p^* дает решение задачи E -оптимального несмещенного планирования. В противном случае алгоритм не приводит к решению.

Процедура 5. Непрерывное MV -оптимальное планирование при некоррелированных наблюдениях.

1) Строится множество индексов J из теоремы 6, учитывая простое правило: $i \in J$ тогда и только тогда, когда $A_j^T l_i \neq 0$ ($j = 1, \dots, n$).

2) По формуле

$$p_j^{(i)} = (|A_j^T l_i| \lambda^{-1/2}(x_j)) / \sum_{s=1}^n |A_s^T l_i| \lambda^{-1/2}(x_s), \quad j = 1, \dots, n,$$

вычисляются веса наблюдений.

3) Вычисляются дисперсии $D_{kk}^{(1)}(p^{(i)})$:

$$D_{kk}^{(1)}(p^{(i)}) = \sum_{j=1}^n (A_j^T l_k)^2 / (\lambda(x_j) p_j^{(i)}), \quad k = 1, \dots, m_1, \quad i \in J.$$

4) Если существует индекс $i_1 \in J$, для которого

$$D_{i_1 i_1}(p^{(i_1)}) \geq D_{kk}(p^{(i_1)}), \quad k = 1, \dots, m_1,$$

то $p^{(i_1)}$ — решение задачи MV -оптимального несмещенного планирования. В противном случае алгоритм не приводит к решению.

Аналогичная процедура может быть реализована для критерия G -оптимальности, если предварительно дискретизировать задачу введением сетки по непрерывному параметру x .

3. Частные виды регрессий.

3.1. Полиномиальная регрессия. Пусть $f_i(x)$ ($i = 1, \dots, m_2$) — алгебраические многочлены, ортонормированные с весом $w(x)$ в k -мерной области \mathcal{X} евклидова пространства. Обозначим через $f_i(x)$ ($i = 1, \dots, m_2$) одночлены $(x^{(1)})^{\alpha_1} (x^{(2)})^{\alpha_2} \times \dots \times (x^{(k)})^{\alpha_k}$, где α_i — неотрицательные целые числа, занумеровав их так, что одночлены меньшей степени имеют меньший номер, а одночлены одной и той же степени нумеруются в любом порядке. В частности, $f_1(x) \equiv 1$. При такой нумерации среди $f_i(x)$ ($i = 1, \dots, m_2$, $m_2 = (d+k)!/(d!k!) \equiv M(d, k)$) содержатся все одночлены степени не выше d от k переменных. Тогда ортонормированные многочлены $\{\tilde{f}_i(x)\}_{i=1}^{m_2}$ могут быть получены из одночленов $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_2}$ процессом ортогонализации и нормирования Шмидта относительно скалярного произведения $(p, q) = \int_{\mathcal{X}} w(x) p(x) q(x) dx$.

Будем считать, что истинная функция регрессии $\eta(x, \theta)$ является многочленом степени d_2 , а аппроксимирующая модель $\hat{\eta}_{m_1}(x, y, \xi, s)$ — многочлен степени $d_1 < d_2$, причем $m_i = M(d_i, k)$ ($i = 1, 2$).

Теорема 7. Для случая полиномиальной регрессии при

$$n \leq M(d_2 - 1, k)$$

условия теоремы 1 являются не только достаточными, но и необходимыми для несмещенности в метрике L^2 процедуры (ξ, s) .

Следствие 1. Пусть n^* — наименьшее число точек несмещенного в метрике L^2 плана для случая полиномиальной регрессии, \tilde{n} — наименьшее число узлов соответствующей кубатурной формулы из теоремы 3. Тогда

$$M(\lfloor (d_1 + d_2)/2 \rfloor, k) \leq n^* = \tilde{n}, \text{ если } \tilde{n} \leq M(d_2 - 1, k),$$

$$M(d_2 - 1, k) < n^* \leq \tilde{n}, \text{ если } \tilde{n} > M(d_2 - 1, k),$$

где $\lfloor \cdot \rfloor$ — целая часть.

Следствие 2. Точной нижней границей для числа точек несмещенного в метрике L^2 плана в случае полиномиальной регрессии служит $M(\lfloor (d_1 + d_2)/2 \rfloor, k)$.

Следствие 3. Если $k > 1$, $d_2 - d_1 = 1$, то для случая полиномиальной регрессии несмещенный в метрике L^2 план с числом точек, равным точной нижней границе $M(\lfloor (d_1 + d_2)/2 \rfloor, k) = M(d_2 - 1, k)$, существует тогда и только тогда, когда существует гауссова кубатурная формула алгебраической степени точности $2d_2 - 1$ с числом узлов $M(d_2 - 1, k)$.

Следствие 4. Оптимальный по числу точек несмещенный в метрике L^2 план эксперимента для полиномиальной регрессии

на отрезке $[a, b]$ сосредоточен с произвольной мерой в $n^* = [(d_1 + d_2 + 2)/2]$ точках x_j ($j = 1, \dots, n^*$), являющихся нулями многочлена

$$\omega_{n^*+1}(x) = \begin{cases} \tilde{f}_{n^*+1}(x) - \nu \tilde{f}_{n^*}(x), & d_1 + d_2 - \text{четное}, \\ \tilde{f}_{n^*+1}(x), & d_1 + d_2 - \text{нечетное}, \end{cases}$$

где ν — произвольная константа.

Заметим, что если $d_1 + d_2$ — нечетное, то точки плана $x_j \in [a, b]$ ($j = 1, \dots, n^*$) по свойству нулей ортогональных многочленов, а в случае, когда $d_1 + d_2$ четно, можно добиться того же, если ν выбрать в пределах $\tilde{f}_{n^*+1}(a)/\tilde{f}_{n^*}(a) \leq \nu \leq \tilde{f}_{n^*+1}(b)/\tilde{f}_{n^*}(b)$. Свобода в выборе параметра ν может быть использована для придания плану дополнительных оптимальных свойств.

Теорема 7 и ее следствия позволяют построить многочисленные примеры оптимальных несмещенных в метрике L^2 планов для полиномиальной регрессии, используя результаты теории интерполяционных кубатурных формул с наименьшим числом узлов для нахождения спектра плана, а описанные выше численные методы — для оптимального выбора весов наблюдений.

3.2. Тригонометрическая регрессия. Пусть $f_i(x)$ ($i = 1, \dots, m_2$) — тригонометрические многочлены на отрезке $[\alpha, \alpha + 2\pi)$, образующие исходный базис. Рассмотрим задачу построения несмещенной в метрике L^2 процедуры для случая, когда функция

регрессии $\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^{m_2} \theta_i(\eta) f_i(x)$ — произвольный тригонометрический многочлен степени d_2 (по синусам и косинусам) — приближается тригонометрическим многочленом $\hat{\eta}_{m_1}(x, y, \xi, s) = \sum_{i=1}^{m_1} \hat{\theta}_i(y, \xi, s) f_i(x)$ степени $d_1 < d_2$, где

$$f_i(x) = \begin{cases} 1, & i = 1, \\ \sin 0,5ix, & i - \text{четное}, \\ \cos 0,5(i-1)x, & i - \text{нечетное}. \end{cases}$$

Имеет место следующий результат.

1) Для случая одномерной тригонометрической регрессии необходимыми и достаточными условиями несмещенности в метрике L^2 служат условия теоремы 3.

2) Оптимальный по числу точек несмещенный в метрике L^2 план эксперимента для тригонометрической регрессии в интервале $[\alpha, \alpha + 2\pi)$ сосредоточен с произвольной мерой в $n^* = d_1 + d_2 + 1$ точках x_j ($j = 1, \dots, n^*$) этого интервала, являющихся нулями тригонометрического многочлена $\Psi_{0,5(d_1+d_2+1)}(x) =$

$$\prod_{j=1}^{d_1+d_2+1} \sin[0,5(x-x_j)], \text{ ортогонального в } [\alpha, \alpha + 2\pi) \text{ по весу } w(x)$$

ко всякому тригонометрическому многочлену целой или полуполовой степени $0,5(d_1 + d_2 - 1)$.

Отсюда, в частности, следует, что точки несмещенного в метрике L^2 плана для одномерной тригонометрической регрессии определяются с точностью до одного непрерывного параметра, так как тригонометрический многочлен $\Psi_{0,5(d_1+d_2+1)}$, корнями которого являются точки плана, задается условиями ортогональности с точностью до старшей гармоники. Последняя содержит два произвольных коэффициента. Один из них путем умножения $\Psi_{0,5(d_1+d_2+1)}$ на постоянный множитель может быть приведен к единице. Произвольным останется только второй из коэффициентов, и ему можно придавать любые значения. Как и в случае одномерной полиномиальной регрессии (параметр ν в следствии 4 из теоремы 7), здесь может быть поставлена соответствующая задача оптимизации.

4. О несмещенных в метрике C и L процедурах. В этом пункте будут рассмотрены две частные постановки общей задачи несмещенного планирования регрессионных экспериментов.

Первая из них относится к случаю, когда \mathcal{F} и $\mathcal{R} \subset \mathcal{F}$ — конечномерные подпространства $C_{[a, b]}$ непрерывных на отрезке $\mathcal{X} = [a, b]$ функций, образованные системами линейно независимых функций Чебышева $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_2}$ и $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1}$ ($m_1 < m_2$) из $C_{[a, b]}$. Требуется выбрать непрерывный план эксперимента ξ и линейный метод оценивания s , при которых обеспечивается наилучшее в метрике C приближение произвольной функции $\eta(x, \theta)$ из \mathcal{F} аппроксимирующим полиномом $\hat{\eta}_{m_1}(x, y, \xi, s)$ из \mathcal{R} , т. е.

$$B_C^{**} \equiv \sup_{x \in [a, b]} u(x) \left| \eta(x, \theta) - E \hat{\eta}_{m_1}(x, y, \xi^{**}, s^{**}) \right| = \inf_{\xi, s} \cdot$$

где $u(x)$ — положительная непрерывная весовая функция.

Вторая рассматриваемая здесь постановка будет отличаться от первой лишь тем, что требуется минимизировать расстояние между $\eta(x, \theta)$ и $E \hat{\eta}_{m_1}(x, y, \xi, s)$ не в метрике пространства $C_{[a, b]}$, а в метрике пространства $L_{[a, b]}$ интегрируемых на $\mathcal{X} = [a, b]$ функций:

$$B_L^{***} \equiv \int_a^b v(x) \left| \eta(x, \theta) - E \hat{\eta}_{m_1}(x, y, \xi^{***}, s^{***}) \right| dx = \inf_{\xi, s}$$

где $v(x)$ — положительная непрерывная весовая функция. На классе несмещенных процедур рассмотрим задачу оптимизации для некоторых критериев вида $\Phi[D^{(1)}(\xi)]$, используя остающуюся свободу в выборе весов наблюдений. При этом, поскольку спектр плана фиксирован, полностью сохраняют силу результаты п. 2.2 данного параграфа.

Пусть $m_2 - m_1 = 1$, что с учетом условия сверхнасыщенности: $n < m_2$ — означает $n = m_1$.

Теорема 8. Если $m_2 - m_1 = 1$, и функция $\eta(x, \theta) \in C_{[a, b]}$ представима в виде разложения

$$\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^{m_1+1} \theta_i \tilde{f}_i(x)$$

по ортонормированной с весом $w(x)$ на $[a, b]$ системе функций $\{\tilde{f}_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1}$, причем $\tilde{f}_{m_1+1}(x)$ наименее уклоняется от нуля в метрике $C_{u(x)}$ среди всех обобщенных полиномов вида

$$\alpha_1 \tilde{f}_1(x) + \alpha_2 \tilde{f}_2(x) + \dots + \alpha_{m_1} \tilde{f}_{m_1}(x) + \tilde{f}_{m_1+1}(x),$$

то несмещенная в метрике $L_{w(x)}^2$ процедура оказывается несмещенной и в метрике $C_{u(x)}$, и наоборот.

Следствие 1. Несмещенный в метрике $C_{u(x)}$ план при $m_2 - m_1 = 1$, $u(x) \equiv \text{const}$ сосредоточен в m_1 точках x_j ($j = 1, \dots, m_1$) с произвольной мерой, причем:

а) для полиномиальной регрессии в отрезке $[-1, 1]$ по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1} = \{x^{i-1}\}_{i=1}^{m_1+1}$

$$x_j = -\cos \frac{(2j-1)\pi}{2m_1}, \quad j = 1, \dots, m_1$$

есть нули полинома Чебышева $T_{m_1}(x)$ первого рода;

б) для тригонометрической регрессии в отрезке $[0, \pi]$ по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1} = \{\cos(i-1)x\}_{i=1}^{m_1+1}$

$$x_j = \frac{(2j-1)\pi}{2m_1}, \quad j = 1, \dots, m_1,$$

есть нули функции $\cos m_1 x$;

в) для тригонометрической регрессии в интервале $(0, \pi)$ по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1} = \{\sin ix\}_{i=1}^{m_1+1}$

$$x_j = \frac{j\pi}{m_1+1}, \quad j = 1, \dots, m_1,$$

есть нули функции $\sin(m_1+1)x$.

Коэффициенты A_{ij} ($i, j = 1, \dots, m_1$) в линейном методе оценивания вычисляются по формуле

$$A_{ij} = \Delta_{ij} / \Delta, \quad i, j = 1, \dots, m_1,$$

где Δ_{ij} — алгебраическое дополнение элемента $f_i(x_j)$ определителя

$$\Delta = \det \{f_1(x_j), f_2(x_j), \dots, f_{m_1}(x_j)\}_{j=1}^{m_1}.$$

Следствие 2. Для рассматриваемых в следствии 1 случаев выбор весов наблюдений

$$p_j^* = 1/m_1$$

в θ -точках несмещенного в метрике C плана является при $\lambda(x) \equiv 1$ оптимальным по критериям D и G .

Аналогичные результаты могут быть сформулированы и для несмещенных в метрике L процедур.

Теорема 9. Если $m_2 - m_1 = 1$ и функция $\eta(x, \theta) \in C_{[a, b]}$ представима в виде разложения

$$\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^{m_1+1} \theta_i \tilde{f}_i(x)$$

по ортонормированной с весом $w(x)$ на $[a, b]$ системе функций $\{\tilde{f}_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1}$, причем $\tilde{f}_{m_1+1}(x)$ наименее уклоняется от нуля в метрике $L_{v(x)}$ среди всех обобщенных полиномов вида

$$\alpha_1 \tilde{f}_1(x) + \alpha_2 \tilde{f}_2(x) + \dots + \alpha_{m_1} \tilde{f}_{m_1}(x) + \tilde{f}_{m_1+1}(x),$$

то несмещенная в метрике $L_{w(x)}^2$ процедура оказывается несмещенной и в метрике $L_{v(x)}$, и наоборот.

Следствие 1. Несмещенный в метрике $L_{v(x)}$ план при $m_2 - m_1 = 1$, $v(x) \equiv \text{const}$ сосредоточен в точках x_j ($j=1, \dots, m_1$) с произвольной мерой, причем:

а) для полиномиальной регрессии в интервале $(-1, 1)$ по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1} = \{x^{i-1}\}_{i=1}^{m_1+1}$

$$x_j = -\cos \frac{j\pi}{m_1+1}, \quad j=1, \dots, m_1,$$

есть нули полинома Чебышева второго рода $Q_{m_1}(x)$;

б) для тригонометрической регрессии в интервале $(0, \pi)$ по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1} = \{\cos(i-1)x\}_{i=1}^{m_1+1}$

$$x_j = \frac{(2j-1)\pi}{2m_1}, \quad j=1, \dots, m_1,$$

есть нули функции $\cos m_1 x$;

в) для тригонометрической регрессии в интервале $(0, \pi)$ по системе функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_1+1} = \{\sin ix\}_{i=1}^{m_1+1}$

$$x_j = \frac{j\pi}{m_1+1}, \quad j=1, \dots, m_1,$$

есть нули функции $\sin(m_1+1)x$.

Коэффициенты A_{ij} ($i, j=1, \dots, m_1$) в линейном методе оценивания вычисляются, как и в теореме 8.

Следствие 2. Для рассматриваемых в следствии 1 случаев оптимальной в смысле D -, G - и Q -критериев выбор весов наблюдений в точках несмещенного в метрике L плана при $\lambda(x) \equiv 1$ состоит в следующем:

а) для полиномиальной регрессии

$$p_j^{*(D,G)} = 1/m_1, \quad j=1, \dots, m_1,$$

$$p_j^{*(Q)} = \sin \frac{\pi}{2(m_1+1)} \sin \frac{j\pi}{m_1+1} \left| \sin \frac{\pi m_1}{2(m_1+1)} \right|, \quad j=1, \dots, m_1;$$

б) для тригонометрической регрессии (по системе синусов и косинусов раздельно)

$$p^{*(D, G)} = p^{*(Q)} = 1/m_1, \quad j = 1, \dots, m_1.$$

Характерным свойством рассмотренного только что случая $m_2 - m_1 = 1$ является независимость условий несмещенности в метриках пространств C и L от неизвестных параметров функции регрессии $\eta(x, \theta)$. При $m_2 - m_1 \geq 2$ это свойство, вообще говоря, не сохраняется. Как уже отмечалось в § 1, в таких ситуациях можно рассматривать локально несмещенные процедуры, когда условия несмещенности выполняются для некоторой функции $\eta(x, \tilde{\theta}) \in \mathcal{F}$, где $\tilde{\theta}$ — априори фиксированный вектор значений параметров.

Для решения задачи построения локально несмещенной в метрике C процедуры воспользуемся известным в классической теории наилучших равномерных приближений методе чебышевских интерполяций, который дает возможность, зная точки чебышевского альтернанса функции $\eta(x) \in C$

$$a \leq x_1^{**} < x_2^{**} < \dots < x_{m_1+1}^{**} \leq b$$

и значения $\eta(x)$ в них, построить обобщенный полином наилучшего равномерного приближения порядка не выше m_1 .

Теорема 10. Процедура планирования и анализа экспериментов (ξ^{**} , s^{**}) является локально несмещенной в метрике C по отношению к функции $\eta(x, \tilde{\theta})$, если:

1) в качестве плана эксперимента ξ^{**} используется любой непрерывный план, сосредоточенный с произвольной мерой в точках чебышевского альтернанса функции $\eta(x, \tilde{\theta})$;

2) в качестве метода оценивания s^{**} применяется статистический аналог метода чебышевских интерполяций

$$\hat{\theta}^{(1)} = A^{**}Y,$$

где

$$A^{**} = (A_{ij}^{**})_{i=1, \dots, m_1, j=1, \dots, m_1+1},$$

$$A_{ij}^{**} = (-1)^{j+1} \left[\sum_{r=1, r \neq j}^{m_1+1} (-1)^r \Delta_{jr}^{(i)} / u(x_r^{**}) \right] \left[\sum_{l=1}^{m_1+1} \Delta_{il} / u(x_l^{**}) \right]^{-1},$$

$$\Delta_i = \det [f_1(x_j^{**}), \dots, f_{m_1}(x_j^{**})]_{j=1, j \neq i}^{m_1+1},$$

$\Delta_{lr}^{(i)}$ — алгебраическое дополнение элемента $f_i(x_r)$ определителя Δ_i .

Предложенная в теореме 10 процедура (ξ^{**} , s^{**}) обладает двумя основными недостатками.

1) Для получения точек плана ξ^{**} требуется найти точки чебышевского альтернанса функции $\eta(x, \tilde{\theta})$, что само по себе может представлять достаточно сложную вычислительную задачу.

2) При $m_2 - m_1 \geq 2$ точки чебышевского альтернанса зависят от неизвестных параметров функции $\eta(x, \tilde{\theta})$, с чем и связан локальный характер процедуры (ξ^{**}, s^{**}).

Правда, в задаче наилучшей равномерной аппроксимации непрерывной функции $\eta(x, \theta) \in \mathcal{F}$ обобщенными полиномами из $\mathcal{R} \subset \mathcal{F}$ точки чебышевского альтернанса не зависят от коэффициентов $\theta_1, \dots, \theta_{m_1}$, и поэтому спектр локально несмещенного в метрике плана зависит лишь от отношений

$$\tilde{\theta}_{m_1+1}/\tilde{\theta}_{m_2}, \tilde{\theta}_{m_1+2}/\tilde{\theta}_{m_2}, \dots, \tilde{\theta}_{m_2-1}/\tilde{\theta}_{m_2}.$$

Таким образом, практическое применение локально несмещенных в метрике C процедур (ξ^{**}, s^{**}) ограничивается теми случаями, когда точки чебышевского альтернанса слабо зависят от приведенных выше отношений в той области Θ , которой заведомо или с большой вероятностью принадлежат по априорному предположению истинные значения параметров $\theta_{m_1+1}, \dots, \theta_{m_2}$.

Переходя к задаче локально несмещенного в метрике L планирования, сделаем предположение, что базисная система функций $\{f_i(x)\}_{i=1}^{m_2}$ является *системой Маркова*, т. е. что при любом $k \leq m_2$ функции $f_1(x), \dots, f_k(x)$ образуют систему Чебышева относительно интервала (a, b) .

В теории наилучших интегральных приближений непрерывной функции в конечном отрезке $[a, b]$ разработан метод, который позволяет, зная определенную для $\eta(x) \in C$ систему точек $a < x_1^{***} < \dots < x_{m_1}^{***} < b$ и значения $\eta(x)$ в них, построить методом интерполяции обобщенный полином $\eta_{m_1}^{***}(x, \eta)$ наилучшего интегрального приближения порядка не выше m_1 к функции $\eta(x)$. В качестве системы точек $\{x_j^{***}\}_{j=1}^{m_1}$ могут быть взяты нули обобщенного полинома, наименее уклоняющегося от нуля в метрике L с весом $v(x)$ среди всех полиномов вида

$$\alpha_1 f_1(x) + \dots + \alpha_{m_1} f_{m_1}(x) + f_{m_1+1}(x),$$

если только все эти нули — точки перемены знака функции $\eta(x) - \eta_{m_1}^{***}(x)$ на (a, b) .

Имеет место аналог теоремы 10.

Теорема 11. Процедура планирования и анализа экспериментов (ξ^{***}, s^{***}) является локально несмещенной в метрике L по отношению к функции $\eta(x, \tilde{\theta})$, если:

1) в качестве плана эксперимента ξ^{***} используется любой непрерывный план, сосредоточенный с произвольной мерой в точках $\{x_j^{***}\}_{j=1}^{m_1}$, соответствующих функции $\eta(x, \tilde{\theta})$;

2) в качестве метода оценивания s^{***} применяется статистический аналог метода интерполяции

$$\tilde{\theta}^{(1)} = A^{***}Y,$$

где

$$A^{***} = (A_{ij}^{***})_{i,j=1,\dots,m_1}, \quad A_{ij}^{***} = \delta_{ij}/\delta, \quad i, j = 1, \dots, m_1,$$
$$\delta = \det [f_1(x_j^{***}), \dots, f_{m_1}(x_j^{***})]_{j=1}^{m_1},$$

δ_{ij} — алгебраическое дополнение элемента $f_i(x_j^{***})$ определителя δ .

Для процедуры (ξ^{***}, s^{***}) характерны те же самые недостатки, что и указанные выше по отношению к процедуре (ξ^{**}, s^{**}) . Можно также утверждать, что спектр плана ξ^{***} не зависит от коэффициентов $\theta_1, \dots, \theta_{m_1}$.

Предложенные в теоремах 10, 11 локально несмещенные процедуры оставляют свободу в выборе весов наблюдений, которая может быть использована с тем, чтобы уменьшить случайную ошибку приближения истинной функции регрессии постулируемой моделью, как это описано в п. 2.2.

Литература к § 3: [11*, 24, 27, 29, 32, 62*, 85*, 119, 120, 129, 160].

§ 4. Имитационные модели и планирование эксперимента

Значительный прикладной интерес представляет следующая задача. Имеется сложная математическая модель реального устройства (системы, явления). Требуется с помощью ЭВМ построить более простую модель, описываемую небольшим числом параметров. Если модель вероятностная, например описываемая некоторым случайным процессом, то этот процесс может быть воспроизведен на ЭВМ с помощью метода Монте-Карло, и могут быть оценены его характеристики, представляющие собой математические ожидания некоторой случайной величины. Общие методы планирования эксперимента, описанные ранее, полностью применимы к данному случаю. Так, если характеристики модели зависят от параметра x , нас интересует некоторая характеристика $\eta(x)$ как функция x , и ЭВМ может вычислять значения η при некоторых фиксированных x точно или со случайной ошибкой (при статистическом моделировании), то исследователь, очевидным образом, находится в условиях регрессионного эксперимента. Особенность, которая здесь имеет место, заключается в том, что систематическая ошибка, как правило, присутствует.

Существуют, тем не менее, специальные методы планирования имитационного эксперимента. Примером таких методов могут служить методы, связанные с возможностью распоряжаться выбором распределений при использовании метода Монте-Карло и с применением теории возмущений при изучении сложных моделей. Этими двумя наиболее развитыми подходами к задачам планирования имитационных экспериментов и будет ограничено изложение.

1. Моделирование распределений и задачи планирования. Простейшая задача планирования эксперимента при оценивании

математического ожидания состоит в выборе распределения, которое необходимо моделировать.

Если ζ — случайная величина, распределенная по закону $F(dx)$, и требуется оценить $Ef(\zeta) = J$, где f — заданная функция,

то оценку осуществляют с помощью среднего $\hat{J} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(y_j)$,

где y_j — независимые реализации случайной величины, распределенной по закону $F(dx)$. При моделировании оценивание можно производить также с помощью любого среднего арифметического

$\hat{J}_{\mathcal{G}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(z_j) \frac{dF}{d\mathcal{G}}(z_j)$, где \mathcal{G} — вероятностная мера, абсолютно

непрерывная по отношению к F . Здесь необходимо моделировать случайную величину с распределением $\mathcal{G}(dx)$. В качестве критерия оптимальности обычно выбирается $D\hat{J}_{\mathcal{G}}$, достигающий своего минимального значения при

$$\mathcal{G}(dx) = |f(x)| \frac{F(dx)}{E|f(\zeta)|};$$

$\mathcal{G}(dx)$ можно рассматривать как непрерывный оптимальный план эксперимента при оценивании $Ef(\zeta)$.

Если требуется оценивать одновременно несколько математических описаний $Ef_i(\zeta)$ ($i = 1, \dots, m$) и критерием оптимальности является

$\Phi(\mathcal{G}) = \sum_{i=1}^m a_i^2 D\hat{J}_{\mathcal{G}}^{(i)}$, где $\hat{J}_{\mathcal{G}}^{(i)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f_i(z_j) \frac{dF(z_j)}{d\mathcal{G}}$

и $E\hat{J}_{\mathcal{G}}^{(i)} = Ef_i(\zeta)$, то оптимальный план эксперимента дается равенством

$$\mathcal{G}(dx) = C \left(\sum_{i=1}^m a_i^2 f_i^2(x) \right)^{1/2} F(dx),$$

где $C = \left[\int_{\mathcal{X}} \left(\sum_{i=1}^m a_i^2 f_i^2(x) \right)^{1/2} F(dx) \right]^{-1}$ — константа нормировки. Ис-

пользование в эксперименте распределения, близкого к оптимальному, часто называют *методом существенной выборки* или *выборкой по важности*. Оптимальное распределение очевидным образом использовано быть не может, ибо требует знания $Ef(\zeta)$.

Другими наиболее употребительными методами при планировании имитационного эксперимента являются метод расслоенной выборки и антисимметричной выборки.

Метод расслоенной выборки состоит в том, что носитель \mathcal{X} меры $F(dx)$ разбивается на m непересекающихся подмножеств \mathcal{X}_j , так что $\bigcup_{j=1}^m \mathcal{X}_j = \mathcal{X}$, $F(\mathcal{X}_j) > 0$, и полагают

$$f_j(y) = \begin{cases} 0, & y \notin \mathcal{X}_j, \\ f(y), & y \in \mathcal{X}_j. \end{cases}$$

Показано, что $Ef = \sum_{i=1}^m Ef_i$, и для оценивания Ef строится оценка

$$\hat{J}_{(n_1, \dots, n_m)} = \sum_{j=1}^m \frac{F(\mathcal{X}_j)}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} f_i(y_{ij}),$$

где y_{ij} ($i = 1, \dots, n_j$) — независимые в совокупности случайные величины, имеющие распределение $F_j(dx) = F(dx)/F(\mathcal{X}_j)$, сосредоточенное на \mathcal{X}_j . Итак, в каждом из \mathcal{X}_j вычисляется (измеряется) n_j значений f , так что совокупность целых чисел (n_1, \dots, \dots, n_m) является в данном случае планом эксперимента.

Если ввести, как обычно, непрерывный план p_1, \dots, p_m так, что $n_i \approx p_i N$, где N — общее число измерений, то оптимальный в смысле дисперсии непрерывный план определяется равенством

$$p_j = F(\mathcal{X}_j) \sqrt{Df_j} \left(\sum_{i=1}^m F(\mathcal{X}_i) \sqrt{Df_i} \right)^{-1}$$

Если область планирования имеет центр симметрии, то можно применить метод антисимметричной выборки, состоящий в том, что эксперименты производятся попарно в двух точках симметричных относительно этого центра. Пусть, в частности, $\alpha_1^{(i)}, \alpha_2^{(i)}, \dots$ — независимые в совокупности реализации равномерно распределенной на $[0, 1]$ случайной величины, получаемые с помощью датчика случайных (псевдослучайных) чисел и используемые для получения результата i -го имитационного эксперимента $i = 1, 2, \dots$. Если $\zeta_i = \zeta(\alpha_1^{(i)}, \dots, \alpha_{N_i}^{(i)})$ есть результат такого эксперимента, то при использовании метода антисимметричной выборки для $(i+1)$ -го эксперимента вместо $\alpha_1^{(i+1)}, \dots, \alpha_{N_{i+1}}^{(i+1)}$ (при каждом нечетном i) выбирается $1 - \alpha_1^{(i)}, 1 - \alpha_2^{(i)}, \dots, 1 - \alpha_{N_i}^{(i)}$ при $N_i \geq N_{i+1}$ и $1 - \alpha_1^{(i)}, \dots, 1 - \alpha_{N_i}^{(i)}, \alpha_{N_i+1}^{(i+1)}, \dots, \alpha_{N_{i+1}}^{(i+1)}$ при $N_i < N_{i+1}$. Исследование этого метода имеется в специальной литературе по методу Монте-Карло. Его обобщения связаны с рассмотрением квадратурных формул со случайными узлами.

Если изучаемая модель зависит от параметров, то важную роль играет метод зависимых испытаний, который состоит в том, что при различных значениях параметров имитационный эксперимент проводится по одной и той же последовательности случайных чисел.

Если изучаемые характеристики модели гладко зависят от параметров, то метод зависимых испытаний приводит к значительному выигрышу, который особенно существует при оценивании производных характеристик модели по параметрам и, следовательно, при проведении экстремальных имитационных экспериментов.

Результаты, связанные с существенной выборкой, важны, в частности, в тех случаях, когда исходная модель описывается цепью Маркова. Пусть цепь определена начальным распределением $p^0(x)$ и переходной плотностью $p(x, x')$ ($x, x' \in \mathcal{X}$), причем $\int_{\mathcal{X}} p(x, x') dx' = 1 - g(x)$ ($0 < g(x) < 1$). Тогда математи-

ческое ожидание J функционала на траекториях цепи Маркова, сужение которого на траекторию длины k : $x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots \rightarrow x_k$ есть $\xi_k = h(x_k)/g(x_k)$, может также оцениваться на траекториях другой («фиктивной») цепи $x'_1 \rightarrow x'_2 \rightarrow \dots \rightarrow x'_k$, определяемой начальным распределением $p_1^0(x)$ и переходной плотностью $p_1(x, x')$ с помощью оценки

$$\xi_k^{(1)} = \frac{p^0(x'_1) p(x'_1, x'_2) \times \dots \times p(x'_{k-1}, x'_k) h(x'_k)}{p_1^0(x'_1) p_1(x'_1, x'_2) \times \dots \times p_1(x'_{k-1}, x'_k) g(x'_k)}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Здесь p_1^0, p_1 должны быть выбраны так, чтобы оценка $\xi_k^{(1)}$ была определена для всех наборов x_1, \dots, x_k , при которых отлично от нуля произведение $p^0(x_1) p(x_1, x_2) \dots p(x_{k-1}, x_k) h(x_k)$, h — заданная функция ($h(x) \geq 0$).

Если в качестве критерия оптимальности плана эксперимента (пары p_1^0, p_1) выбрана величина дисперсии оценки $\xi_k^{(1)}$, то оптимальный план будет определяться соотношениями

$$p_1^0(x) = \frac{1}{J} p^0(x) p^*(x), \quad p_1(x, x') = \frac{p(x, x') p^*(x)}{p^*(x')},$$

где $p^*(x)$ является решением интегрального уравнения

$$p^*(x) = \int_{\mathcal{X}} p(x', x) p^*(x') dx' + h(x).$$

Функцию $p^*(x)$ называют также *функцией ценности* (см. п. 2) по отношению к оцениваемому функционалу.

Другие результаты такого рода относительно выбора оптимальных планов эксперимента можно найти в обширной литературе по методу Монте-Карло, где рассматриваются также оценки, отличные от оценки $\xi_k^{(1)}$. Эти результаты специфичны для имитационных экспериментов. Они содержательны, поскольку при имитационном эксперименте экспериментатор сам выбирает распределения.

2. Линейная теория возмущений и планирования эксперимента. Как в имитационном эксперименте, так и в эксперименте физическом, успешно используется линейная теория возмущений, получившая развитие в этой области благодаря работам Г. И. Марчука [59]—[61]. Полученные им в этой области результаты сыграли также важную роль при разработке методов оптимизации имитационного эксперимента, описанных в п. 1. Предположим далее, что интересующая нас зависимость $\varphi(x)$

измеряется в некотором эксперименте или вычисляется путем решения на ЭВМ некоторой системы уравнений.

Более точно, будем предполагать, что $\varphi(x)$ — вещественная функция, где $x \in \mathcal{X}$, \mathcal{X} — множество с определенной на заданной σ -алгебре его подмножеств σ -конечной мерой μ . При изучении сложных физических, биологических и других процессов априорная информация о функции $\varphi(x)$ часто может состоять в том, что $\varphi(x)$ удовлетворяет уравнению

$$L\varphi = q,$$

где L — линейный оператор. Линейность L — это физически сравнительно просто проверяемое свойство. Относительно оператора L не предполагается, что он известен, но часто можно указать (возможно, с точностью до набора неизвестных параметров) близкий к нему оператор L_0 (модель). Наложим лишь следующее достаточно слабое ограничение: будем считать, что $q, \varphi \in L^2_\mu$, как L , так и L_0 являются операторами из \mathcal{F}_1 в \mathcal{F}_2 , где $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2 \subseteq L^2_\mu$.

Если эксперимент состоит в измерении величины $J_p(\varphi) = (p, \varphi) = \int \varphi(x) p(x) \mu(dx)$, то наряду с оператором L полезно ввести в рассмотрение оператор L^* , сопряженный к L , и рассмотреть сопряженное уравнение

$$L^*\varphi_p^* = p.$$

Будем предполагать, что $p \geq 0, q \geq 0, \varphi \geq 0, \varphi_p^* \geq 0 \pmod{\mu}$. Поскольку $(p, \varphi) = (\varphi_p^*, q)$, то функция φ_p^* очевидным образом описывает «отклик» функционала $J_p(\varphi)$ на изменения функции q — правой части основного операторного уравнения.

Легко видеть, что изменение $\pmod{\mu}$ функции q на множестве x , где φ_p^* мало, внесет малый вклад в J_p сравнительно с вкладом, который даст аналогичное изменение q , но на множестве x , для которых φ_p^* велико. Это объясняет термин для φ_p^* — «функция ценности» по отношению к функционалу J_p , введенный в связи с изучением процессов переноса излучения. Функция ценности играет важную роль и при изучении других процессов (по крайней мере в тех случаях, когда q неотрицательно $\pmod{\mu}$) и оператор L положительно определен). Чтобы уточнить сказанное, следует ввести формальное понятие функции «плотности измерений» и описать процесс измерений. Для простоты будем считать μ мерой Лебега в области \mathcal{X} конечномерного евклидова пространства. Предположим измеряющее устройство таким, что в результате измерения получается значение функционала $J_p = (p, \varphi)$ с некоторой погрешностью (p — заданная функция). Сам процесс измерения физически может осуществляться различными способами. Будем считать, что в действительности измеряющее

устройство вычисляет сумму

$$S = \sum_{k=1}^m \frac{1}{n_k} \text{mes } \mathcal{X}_k \sum_{i_k=1}^{n_k} p(x_{i_k}) \varphi(x_{i_k}),$$

приближенно равную сумме

$$S' = \sum_{k=1}^m \frac{1}{n_k} \text{mes } \mathcal{X}_k \sum_{i_k=1}^{n_k} \varphi_p^*(x_{i_k}) q(x_{i_k}).$$

Здесь предполагается, что область \mathcal{X} разбита на сумму непесекающихся подобластей \mathcal{X}_k ($\mathcal{X} = \bigcup_{k=1}^m \mathcal{X}_k$), в каждой из \mathcal{X}_k выбирается n_k точек x_{i_k} и составляется сумма. Точки x_{i_k} считаются равномерно распределенными в \mathcal{X}_k . Равномерность здесь понимается в том смысле, что доля точек в любом подмножестве $\Delta \subset \mathcal{X}_k$ равна примерно $\mu(\Delta)/\mu(\mathcal{X}_k)$. При имитации измерений с помощью метода Монте-Карло это означает, что x_{i_k} распределены по закону $\mu(dx)/\mu(\mathcal{X}_k)$. В других случаях понятие равномерности можно придать точный смысл, устремляя каждое из n_k к бесконечности (равномерность в теоретико-числовом смысле).

Положим $\dot{N} = \sum_{k=1}^m n_k$, $g_m(x) = n_k/N$ при $x \in \mathcal{X}_k$ ($k = 1, \dots, m$).

Относительно построенной таким образом ступенчатой функции будем предполагать, что когда $N \rightarrow \infty$, $m \rightarrow \infty$ таким образом, что диаметр каждого \mathcal{X}_k стремится к нулю, она сходится к некоторой измеримой функции $g(x)$, которую будем называть *плотностью измерений*. Заметим, что при таком переходе к пределу $\lim S = \lim S' = J_p$ функция плотности измерений по отношению к произвольной конечной мере μ строится очевидным обобщением описанной процедуры. Функцию $g(x)$ можно трактовать также как план (непрерывный) эксперимента. Чтобы решить задачу об оптимальном его выборе, заметим, что при нашей трактовке процесса измерения оптимальный план, минимизирующий систематическую ошибку будет совпадать с $c \varphi_p^*(x) q(x)$, где c — константа нормировки, равная $1/J_p$. Это легко проверяется, если рассмотреть квадрат разности $(J_p - S)^2$ и трактовать $g(x)$ как плотность распределения точек наблюдения. Для широкого класса задач, где $q(x)$ есть мало меняющаяся функция, нормированная функция $\varphi_p^*(x)$ является планом эксперимента, близким к оптимальному в смысле минимума систематической погрешности.

С другой стороны, если $q(x)$ задано с ошибкой, то при стандартных предположениях относительно этой случайной ошибки φ_p^* будет также оптимальным ненормированным планом эксперимента.

Действительно, предположим, что вместо $q(x)$ в измерении участвует $\xi(x) = q(x) + \varepsilon(x)$, где $\varepsilon(x)$ — случайная ошибка с ну-

левым средним. Случайная составляющая погрешности $\delta S'$, соответствующая сумме S' , равна

$$\delta S' = \sum_{k=1}^m \frac{1}{n_k} \sum_{i_k=1}^{n_k} \varphi_p(x_{i_k}) \varepsilon_{i_k} \text{mes } \mathcal{X}_k.$$

Для случая, когда $D\varepsilon(x) = \sigma^2$ не зависит от x , а $E\varepsilon(x_i)\varepsilon(x_j) = 0$ при $x_i \neq x_j$, легко получить, что плотность измерений, при которой минимальна $D(\delta S')$, равна с точностью до константы функции $\varphi_p^*(x)$. Это известный в математической статистике результат относительно оптимального расщепления выборки. Следует отметить, что в общем случае, когда $\varepsilon(x_i)$ и $\varepsilon(x_j)$ зависимы при различных x_i и x_j , оптимальная плотность измерений не будет, вообще говоря, пропорциональной φ_p^* .

Перейдем к случаю, когда наряду с исходным оператором L рассматривается возмущенный оператор \widehat{L} , причем $\widehat{L} = L + \delta L$, где δL — малое (в смысле введенной метрики) возмущение. Задача L на \widehat{L} влечет изменение решения

$$\widehat{L}\widehat{\varphi} = (L + \delta L)\widehat{\varphi} = q.$$

Используя сопряженную функцию невозмущенного оператора, соответствующую J_p , легко получить для возмущения $\delta J_p = J_p(\widehat{\varphi}) - J_p(\varphi)$ выражение

$$\delta J_p = -(\varphi_p^*, \delta L\widehat{\varphi})$$

или двойственное к нему

$$\delta J_p = -(\varphi, \delta L\widehat{\varphi}),$$

если использовать возмущенное сопряженное уравнение

$$(L^* + \delta L^*)\widehat{\varphi}_p^* = p$$

и невозмущенное основное.

Формулы для возмущения находят разнообразные применения при построении математической модели и вычислении значений входящих в эту модель параметров. Особое значение эти формулы имеют при построении моделей, сохраняющих некоторые средние характеристики изучаемого явления. Предположим, что нас интересует некоторый набор функционалов $J_{p_i} = (\varphi, p_i)$ ($i = 1, \dots, r$), и необходимо построить модель — оператор \widehat{L}_0 . Естественные требования, предъявляемые к \widehat{L}_0 , состоят в том, чтобы оператор \widehat{L}_0 был достаточно близок к L и был существенно проще L . Если в первую очередь нас интересуют функционалы J_{p_i} , то близость \widehat{L}_0 к L , естественно, должна быть определена так, чтобы значения $\widehat{J}_{p_i}^0(\widehat{\varphi}^0, p_i)$ были близки к $J_{p_i} = (\varphi, p_i)$ для $i = 1, 2, \dots, r$ или совпадали с ними. Последнее означает,

что должны точно или приближенно выполняться равенства $\delta J_{p_i} = 0$ или, с учетом формулы для возмущения, равенства

$$(\varphi_{p_i}^*, L_0 \hat{\varphi}) = (\varphi_{p_i}^*, L \hat{\varphi}), \quad i = 1, \dots, r,$$

которые часто используются наряду с другими априорными сведениями при конструировании упрощенных моделей.

Легко привести примеры упрощения моделей с использованием этих равенств. Часто априори известно, что изучаемая система описывается уравнением вида $L\varphi = q$, где оператор L зависит от очень большого числа параметров, подлежащих определению. Для наших целей нужно построить оператор \hat{L}_0 , который зависит от небольшого числа параметров, но дает удовлетворительные значения для функционалов \hat{J}_{p_i} ($i = 1, \dots, r$). В этом случае наряду с другими соображениями (о сходстве структуры операторов L и \hat{L}_0 и т. п.) очень важную роль играет требование точного или приближенного выполнения приведенных выше равенств. Практически эти соображения используются, например, при создании упрощенных моделей ядерных реакторов, а также в различных задачах при приближенной замене переменных коэффициентов дифференциального оператора постоянными, упрощении граничных условий и др. Они играют важную роль при решении «обратных» задач математической физики, решении проблемы оптимизации размещения предприятий в задачах охраны окружающей среды.

Все сказанное, разумеется, относится к случаю, когда известны функции $\varphi_{p_i}^*$, определение которых может быть также сложной задачей. Но при проведении эксперимента и конструировании упрощенной модели можно использовать приближенные значения этих функций, полученные на основе упрощенной модели для двойственной задачи. Двойственность играет важную роль при планировании эксперимента. Экспериментальные исследования благодаря использованию двойственности могут быть естественным образом развиты последовательно на этапы, в каждом из которых происходит уточнение модели и плана эксперимента.

Имеются многочисленные обобщения рассмотренной задачи. Наиболее важными из них являются обобщения на случай нелинейного оператора, а также — на модели описываемые случайными процессами более общего вида, чем в п. 1.

Литература к § 4: [23, 28, 58—61, 72].

ГЛАВА 7

ЗАДАЧИ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА С ОБЛАСТЬЮ ДЕЙСТВИЯ В ФУНКЦИОНАЛЬНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

§ 1. Модель регрессии, область планирования и план в функциональном пространстве

1. Предварительные замечания. Классическая теория планирования регрессионного эксперимента (см. гл. 2—5) развита в рамках следующей схемы регрессии:

$$Ey(x) = \eta(x, \theta), \quad x \in \mathcal{X}, \quad (1)$$

где x — аргумент функции регрессии $\eta(x, \theta)$, «нумерующий» наблюдения (случайные величины) $y(x)$, выбирается из некоторой области \mathcal{X} пространства планирования, $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_n)$ — набор конечного числа неизвестных параметров. Формально пространство планирования \mathcal{X} не обязано быть конечномерным, однако большинство конкретных результатов классической теории (включая численные методы построения планов и практические приложения) относятся к конечномерному пространству планирования.

Для широкого круга задач планирования, связанных с постановкой физических экспериментов, типичной является ситуация, когда единичное наблюдение реализуется с помощью функционала $X: \{\varphi\} \rightarrow \mathbf{R}^1$, сопоставляющего состоянию наблюдаемого объекта значение некоторой вещественной переменной, т. е. отображающего множество состояний $\{\varphi\}$ в стандартное множество ответов — вещественную прямую. В тех случаях, когда состояние объекта наблюдения описывается некоторой функцией $\varphi(r, t, \dots)$ пространственных, временных и т. д. координат, и функция φ принадлежит определенному функциональному классу Φ , указанное отображение задает соответствующий функционал над Φ . Следовательно, в описанной ситуации пространство планирования Φ реализуется в виде некоторого множества функционалов на функциональном классе Φ .

Метрика пространства планирования естественным образом индуцируется метрикой исходного функционального класса, согласованной с физической природой задачи. В частности, если

Φ есть полное нормированное пространство (банахово или B -пространство), то, ограничиваясь линейными функционалами, получаем в качестве пространства планирования сопряженное B -пространство Φ^* (пространство ограниченных (непрерывных) линейных функционалов).

2. Постановка задачи планирования с областью действия в функциональном пространстве. Областью определения функции регрессии в модели (1) является подмножество \mathcal{X} некоторого сопряженного B -пространства Φ^* , тогда как параметризацию задачи, связанную с состоянием наблюдаемого объекта, естественно относить к элементам основного пространства Φ . Формулировка теории планирования эксперимента на языке пары сопряженных функциональных пространств (Φ , Φ^*) дает наиболее прямой подход для изучения бесконечномерных задач планирования эксперимента средствами функционального анализа. Далее, именно на этом языке (см. гл. 9) естественным образом формулируются задачи планирования эксперимента, связанные с так называемыми обратными задачами математической физики.

В терминах сопряженных функциональных пространств (Φ , Φ^*) задача планирования регрессионного эксперимента, соответствующая классической схеме линейной по параметрам регрессии, формулируется следующим образом. Пусть Φ — полное нормированное пространство и $L \subset \Phi$ его n -мерное линейное подпространство. Выбирая в L базис — набор линейно независимых элементов (e_1, \dots, e_n) , каждый элемент $\varphi \in L$ можно представить в виде линейной комбинации

$$\varphi = \sum_{i=1}^n \theta_i e_i. \quad (2)$$

Эксперимент для оценивания параметров $\theta_1, \dots, \theta_n$ состоит в наблюдении значений случайных величин y_1, \dots, y_N :

$$y_j = X_j(\varphi) + \varepsilon_j, \quad j = 1, \dots, N, \quad (3)$$

где $X_j(\cdot)$ — линейные ограниченные функционалы на Φ , т. е. элементы сопряженного B -пространства Φ^* , а случайные ошибки ε_j , как обычно, центрированы, некоррелированы и имеют конечные дисперсии. С точки зрения оценивания параметров $\theta_1, \dots, \theta_n$ задача (2), (3) эквивалентна обычной (конечномерной) линейной регрессии

$$y_j = \sum_{i=1}^n \theta_i X_j(e_i) + \varepsilon_j, \quad j = 1, \dots, N,$$

с МНК-оценками в качестве наилучших линейных несмещенных оценок параметров.

Планом ξ эксперимента (2), (3) назовем набор

$$\xi = (X_1, \dots, X_N; \lambda_1, \dots, \lambda_N)$$

функционалов $\{X_j\}$ и положительных весов $\{\lambda_j\}$:

$$\sum \lambda_j = 1, \quad \lambda_j > 0, \quad j = 1, \dots, N.$$

Областью (множеством) планирования будем называть подмножество $\mathcal{X} \subset \Phi^*$, которому по условию принадлежат функционалы плана ξ . План эксперимента можно рассматривать как некоторую меру, сосредоточенную в конечном множестве точек и, вообще говоря, для эксперимента (2), (3) нет необходимости рассматривать какие-либо другие меры на множестве \mathcal{X} (более общая ситуация обсуждается в гл. 9).

Информационной матрицей плана ξ является матрица $M(\xi)$ с элементами

$$M_{ik}(\xi) = \sum_{j=1}^N \lambda_j X_j(e_i) X_j(e_k), \quad i, k = 1, \dots, n. \quad (4)$$

Если область планирования \mathcal{X} ограничена и замкнута в норме сопряженного пространства Φ^* , то семейство матриц $M(\xi)$ образует выпуклое компактное множество и справедливы остальные утверждения гл. 2 относительно информационных матриц, в частности, для любого плана ξ матрица $M(\xi)$ может быть представлена в форме (4) с $N \leq n(n+1)/2 + 1$.

Оптимизация плана ξ может проводиться как на основе точностных характеристик НЛН-оценок для параметров $\theta_1, \dots, \theta_n$, определяющих элемент $\varphi \in L$ (состояние объекта измерения), так и с точки зрения точности оценивания функционалов из некоторого множества $\{X\} \subset \Phi^*$ (указанное множество не обязательно, вообще говоря, совпадает с \mathcal{X}). В соответствии с этим получаем следующие аналоги основных определений (ср. гл. 2). Определение D -оптимального плана буквально совпадает с обычным — план ξ^* D -оптимален, если

$$\det M(\xi^*) = \sup_{\xi} \det M(\xi).$$

Для любого функционала $X \in \Phi^*$ числовая функция

$$d(X, \xi) = \sum_{i,k=1}^n [M^{-1}(\xi)]_{ik} X(e_i) X(e_k) \quad (5)$$

определяет дисперсию НЛН-оценки функционала X по результатам эксперимента (3). План ξ^* называется G -оптимальным относительно множества функционалов $\mathcal{X}_1 \subset \Phi^*$ (или $G_{\mathcal{X}_1}$ -оптимальным), если

$$\sup_{X \in \mathcal{X}_1} d(X, \xi^*) = \inf_{\xi} \sup_{X \in \mathcal{X}_1} d(X, \xi).$$

Аналогичным образом переформулируются и другие критерии оптимальности планов, указанные в гл. 2.

В определенном смысле описанная формулировка задачи планирования экспериментов шире классической, так как для получения последней требуется в качестве пространства Φ выбрать пространство C_X функций $\varphi(x)$, непрерывных на некотором компакте X , а в качестве «функциональной» области планирования

$\mathcal{X} \subset C_X^*$ — множество функционалов вида $X_x(\varphi) = \varphi(x)$ ($x \in X$), где X — «обычная» область планирования (например, ограниченное множество в пространстве \mathbf{R}^m).

В различных приложениях оказывается естественным различный выбор пары сопряженных пространств (Φ, Φ^*) . Так, при описании спектрофотометрических экспериментов основное пространство Φ — это пространство, содержащее все непрерывные положительные распределения энергии в пределах освещенной поверхности S , и его естественно отождествить с пространством $L_1(S)$ (подробнее см. § 3). В этом случае сопряженным оказывается пространство ограниченных функций $L_\infty(S)$, содержащее множество положительных функций, ограниченных в совокупности константой, — естественную область планирования для спектрофотометрического эксперимента, отвечающую физической природе детекторов радиации.

В задачах синтеза гестлирующих сигналов естественными оказываются квадратичные ограничения типа нормы в пространстве L_2 — в этом случае основное и сопряженное пространство совпадают с одной из реализаций гильбертова пространства функций, определенных на подходящем носителе.

§ 2. Восстановление функционалов плана

С точки зрения оценивания конечного набора параметров в модели (2) «расширение» области планирования \mathcal{X} до подмножества сопряженного функционального пространства не дает ничего нового — каждая «точка» — функционал $X \in \mathcal{X}$, «представлен» в модели наблюдений и в информационной матрице плана $M(\xi)$ только своими значениями на элементах базиса (e_1, \dots, e_n) . В определенном смысле задача планирования также эквивалентна конечномерной.

Фиксируем базис подпространства $L \subset \Phi$ в разложении (2) и рассмотрим отображение сопряженного пространства Φ^* в n -мерное евклидово пространство \mathbf{R}^n :

$$\Phi^* \rightarrow \mathbf{R}^n: X \rightarrow z = (z_1, \dots, z_n), \quad z_i = X(e_i), \quad i = 1, \dots, n. \quad (6)$$

Отображение (6) сопоставляет каждому функционалу $X \in \Phi^*$ вектор $z(X)$, составленный из значений этого функционала на элементах базиса (e_1, \dots, e_n) . Отображение (6) непрерывно и переводит каждое ограниченное множество в компактное, в частности, область планирования \mathcal{X} отображается в компакт $Z = z(\mathcal{X})$.

Информационные матрицы D - и $G_{\mathcal{X}_1}$ -оптимальных планов для области планирования $\mathcal{X} \subset \Phi^*$ и множества $\mathcal{X}_1 \subset \Phi^*$ в функциональном пространстве совпадают с информационными матрицами соответствующих планов линейной регрессии вида

$$E y(z) = \sum_{i=1}^n \theta_i z_i, \quad z \in \mathbf{R}^n,$$

для области планирования $Z = z(\mathcal{R})$ и множества $Z_1 = z(\mathcal{R}_1)$, лежащих в конечномерном пространстве \mathbf{R}^n и получающихся с помощью отображения (6).

Планы эксперимента называют M -эквивалентными, если совпадают соответствующие им информационные матрицы. На основании классической теоремы Кифера — Вольфовица, верной для задачи планирования в компактной области $Z \subset \mathbf{R}^n$, формулируются следующие утверждения относительно «функциональной» области $\mathcal{R} \subset \Phi^*$.

Если область (множество) планирования \mathcal{R} , принадлежащая сопряженному B -пространству Φ^* , замкнута и ограничена по норме пространства Φ^* , то эквивалентны следующие утверждения относительно плана ξ^* :

- 1) план ξ^* D -оптимален,
- 2) план ξ^* $G_{\mathcal{R}}$ -оптимален,
- 3) $\sup_{X \in \mathcal{R}} d(X, \xi^*) = n$.

Кроме того, для любого функционала X_j^* , входящего в план ξ^* с ненулевым весом, $d(X_j^*, \xi^*) = n$.

За исключением простейших случаев, отображение (6) не решает полностью задачу планирования. Действительно, с помощью указанного отображения бесконечномерная задача планирования «сводится» к конечномерной в том смысле, что решение последней позволяет найти сразу информационную матрицу оптимального «бесконечномерного» плана. Однако в конкретных задачах этого мало. Обычно нужно реализовать оптимальный план с помощью функционалов X , как элементов функционального пространства Φ^* . Оказывается, это также можно сделать с помощью решения конечномерной задачи.

Пусть в результате решения конечномерной задачи для области $Z = z(\mathcal{R}) \subset \mathbf{R}^n$ получен оптимальный план ξ_Z^* . Как известно (см. гл. 2), этот план всегда можно считать сосредоточенным на конечном множестве точек, число которых не превышает $n(n+1)/2$. Пусть $z^* \in Z$ — одна из таких точек с весом $\lambda^* > 0$; тогда для восстановления соответствующего «функционального» плана необходимо найти функционал, удовлетворяющий системе уравнений

$$X^*(e_i) = z_i^*, \quad i = 1, \dots, n, \quad (7)$$

и принадлежащий исходной области $\mathcal{R} \subset \Phi^*$. Приписав такому функционалу X^* вес λ^* и повторив эту операцию для каждой точки, входящей в план ξ_Z^* с ненулевым весом, получаем функциональный план с той же информационной матрицей, т. е. оптимальный в смысле того же критерия, что и план ξ_Z^* .

Всегда существует решение уравнений (7), принадлежащее области $\mathcal{R} \subset \Phi^*$. В общем случае такое решение не единственно — оно определено с точностью до L -эквивалентности, т. е. если X_1^* и X_2^* — два решения уравнения (7) для одной и той же точ-

ки z^* , то функционал $X_1^* - X_2^*$ обращается в нуль на всех элементах из подпространства L . Если имеется несколько решений уравнения (7) для одной и той же точки z^* и все они принадлежат множеству планирования \mathcal{Z} , то при восстановлении плана ξ^* вес λ^* этой точки может быть распределен между всеми функционалами произвольно. Ниже будет указан способ фактического построения функционала X^* по заданной точке $z^* \in \text{supp } \xi_Z^*$ в том случае, когда план $\xi_Z^* - D$ -оптимален.

Без ограничения общности область планирования \mathcal{Z} в сопряженном B -пространстве можно считать выпуклой, поскольку D -оптимальные планы, соответствующие некоторому множеству планирования \mathcal{Z} и его выпуклому замыканию $\bar{\mathcal{Z}}$, M -эквивалентны. Поэтому D -оптимальный план можно считать сосредоточенным в крайних (экстремальных) точках выпуклой области планирования.

Пусть $h(\varphi)$ — опорный функционал множества $\mathcal{Z} \subset \Phi^*$:

$$h(\varphi) = \sup_{X \in \mathcal{Z}} X(\varphi), \quad \varphi \in \Phi.$$

Функционал $h(\varphi)$ для любого множества $\mathcal{Z} \subset \Phi^*$ — выпуклый функционал на пространстве Φ :

$$\begin{aligned} h(\alpha\varphi) &= \alpha h(\varphi), \quad \alpha > 0, \\ h(\varphi_1 + \varphi_2) &\leq h(\varphi_1) + h(\varphi_2). \end{aligned}$$

Собственно, функционал $h(\varphi)$, определенный выше, представляет только «часть» полного опорного функционала множества \mathcal{Z} как множества в сопряженном B -пространстве Φ^* . Этот полный опорный функционал H определен на элементах второго сопряженного пространства Φ^{**} :

$$H(\varphi') = \sup_{X \in \mathcal{Z}} \varphi'(X), \quad \varphi' \in \Phi^{**},$$

и совпадает с функционалом h на элементах вида $\varphi'_\varphi(X) = X(\varphi)$ ($\varphi \in \Phi$). Полный опорный функционал — выпуклый на пространстве Φ^{**} . Различать функционалы h и H необходимо только в том случае, когда исходное пространство Φ не рефлексивно, т. е. пространство Φ^{**} не исчерпывается элементами указанного выше вида, однозначно определяемыми элементами исходного пространства Φ . Именно такова ситуация в практически важном случае $\Phi = L_1$ (см. § 3).

Критерий принадлежности элемента X_0 выпуклому замкнутому множеству $\mathcal{Z} \subset \Phi^*$ в сопряженном банаховом пространстве может быть сформулирован в терминах полного опорного функционала H , а именно, $X_0 \in \mathcal{Z}$ тогда и только тогда, когда условие $\varphi'(X_0) \leq H(\varphi')$ выполнено для всех элементов φ' из второго сопряженного пространства Φ^{**} .

Способ восстановления функционала X , удовлетворяющего условиям (7), связан с решением некоторых экстремальных задач. Пусть $\mathcal{Z} \subset \Phi^*$ — выпуклое замкнутое множество в сопря-

жепном банаховом пространстве и $h(\varphi)$ — опорный функционал множества \mathcal{Z} . Тогда для любого элемента $\varphi_0 \in \Phi$ существует такой линейный функционал $X^* \in \Phi^*$, что $X^*(\varphi_0) = h(\varphi_0)$, и этот функционал принадлежит границе множества \mathcal{Z} . Это вытекает из теоремы Хаана — Банаха о продолжении линейных функционалов. Утверждение верно без предположения о рефлексивности пространства Φ , хотя в формулировку входит только функционал $h(\cdot)$ (а не полный опорный функционал $H(\cdot)$).

Пусть z^* — граничная точка множества $Z = z(\mathcal{Z}) \subset \mathbb{R}^n$ — образа выпуклого замкнутого множества $\mathcal{Z} \subset \Phi^*$ при отображении (6). Тогда:

1) существует линейный функционал $X^* \in \mathcal{Z}$, удовлетворяющий условиям (7);

2) этот функционал принадлежит границе множества \mathcal{Z} .

Основное утверждение, устанавливающее структуру функционалов X^* , на которых сосредоточен D -оптимальный план ξ^* , и указывающее способ их построения, состоит в следующем.

Пусть точка $z^* \in Z = z(\mathcal{Z})$ принадлежит спектру D -оптимального для области Z плана ξ_z^* . Тогда существует такой линейный функционал $X^* \in \mathcal{Z}$, что:

1) X^* удовлетворяет условиям (7),

2) X^* есть граничная точка множества \mathcal{Z} .

Этот функционал X^* может быть найден из решения экстремальной задачи

$$X^*(\varphi^*) = \sup_{X \in \mathcal{Z}} X(\varphi^*) = h(\varphi^*) = n, \quad (8)$$

где элемент $\varphi^* \in L$ однозначно определяется точкой z^* :

$$\varphi^* = \sum_{i=1}^n e_i \sum_{h=1}^n [M^{-1}(\xi^*)]_{ih} z_h^*, \quad (9)$$

и $h(\varphi)$ — опорный функционал множества \mathcal{Z} .

Утверждение полностью решает задачу продолжения «конечномерного» D -оптимального плана ξ_z^* для области $Z \subset \mathbb{R}^n$ до «функционального» D -оптимального плана ξ^* для множества планирования \mathcal{Z} , лежащего в сопряженном B -пространстве. Для такого продолжения достаточно восстановить все функционалы X_j^* , отвечающие точкам, входящим в спектр конечномерного плана ξ_z^* , и приписать этим функционалам соответствующие веса из конечномерного плана ξ_z^* .

Таким образом, решение задачи D -оптимального планирования линейного регрессионного эксперимента для бесконечномерной области действий, лежащей в сопряженном банаховом пространстве, может быть найдено в результате:

1) решения задачи D -оптимального планирования для конечномерной области $Z = z(\mathcal{Z})$;

2) продолжения конечномерного D -оптимального плана указанным выше способом на бесконечномерную область действия.

Основную трудность при этом представляет решение конечномерной задачи, так как явный вид области $Z = z(\mathcal{Z})$ определяется базисом (e_1, \dots, e_n) подпространства L и может оказаться достаточно сложным. Следует отметить, что D -оптимальный план не зависит от базиса подпространства L , а определяется самим этим подпространством. Иногда этим можно воспользоваться для упрощения вида конечномерной области. Решение экстремальной задачи (8) часто вообще не представляет затруднений, если только множество планирования \mathcal{Z} в сопряженном пространстве имеет достаточно простую структуру. В ряде случаев может оказаться целесообразным прямой численный поиск крайних точек множества \mathcal{Z} в пространстве функционалов, максимизирующих $\det M(\xi)$, но и в этом случае существенно помогает тот факт, что искомым функционал должен быть решением экстремальной задачи (8).

Пример 1. Пусть $\Phi = L_2(T)$ — гильбертово пространство функций, интегрируемых с квадратом относительно меры λ на компакте T :

$$\|\varphi\|^2 = \int_T |\varphi(t)|^2 d\lambda(t).$$

Тогда по теореме Рисса Φ^* есть тоже пространство $L_2(T)$:

$$X(\varphi) = \int_T x(t)\varphi(t) d\lambda, \quad \|X\|^2 = \int_T |x(t)|^2 d\lambda.$$

Возьмем в качестве области планирования в сопряженном пространстве $\Phi^* = L_2(T)$ единичный шар $\mathcal{Z} = \{X: \|X\| = 1\}$. Считая базис модели (2) ортонормированным в $L_2(T)$:

$$\int_T e_i(t) e_k(t) d\lambda = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k, \end{cases}$$

получаем в качестве канонической конечномерной области

$$Z = \{z = (z_1, \dots, z_n): z_1^2 + \dots + z_n^2 \leq 1\}$$

единичный шар пространства \mathbf{R}^n . Как известно, оптимальный план линейной регрессии на шаре сосредоточен с равными весами в $n+1$ точках, лежащих на поверхности шара в вершинах произвольно ориентированного правильного симплекса. Пусть $z^* = (z_1^*, \dots, z_n^*)$ — одна из таких точек. Так как информационная матрица $M(\xi_{z^*})$ оптимального плана в этом случае кратна единичной, в качестве элемента φ^* в (9) можно взять функцию $\varphi^*(t) = \sum_{i=1}^n z_i^* e_i(t)$. Тогда, как следует из неравенства Шварца, решением экстремальной задачи (8) будет функционал X^* , определяемый функцией

$$x^*(t) = \sum_{i=1}^n z_i^* e_i(t).$$

Построив таким образом $n + 1$ функций $x_j^*(t)$, соответствующих всем вершинам правильного симплекса и приписав им равные веса $(n + 1)^{-1}$, получим D -оптимальный план для модели (2) в пространстве $L_2(T)$.

§ 3. Регрессионный эксперимент в пространстве обобщенных мер

В этом параграфе общая теория § 2 применяется к пространству обобщенных мер. *Обобщенная мера* (называемая далее для краткости просто *мерой*) — это счетно-аддитивная функция множеств с множеством значений $(-\infty, \infty)$.

Задачи оценивания параметров тех или иных мер возникают в различных областях математики и физики. Это могут быть меры, порожденные случайными величинами и процессами распределения аддитивных физических величин в разнообразных координатных пространствах, спектральные меры случайных процессов и т. д. Имея в виду главным образом физические приложения, будем рассматривать пространства мер, заданных на компактных подмножествах конечномерного пространства \mathbb{R}^m .

1. Пространство мер. Пусть $T \subset \mathbb{R}^m$ — компакт в m -мерном евклидовом пространстве и λ — мера Лебега на \mathbb{R}^m . Рассмотрим пространство M_T мер на компакте T , абсолютно непрерывных относительно меры λ , с нормой $\|\varphi\| = \int_T |d\varphi| = \int_I \left| \frac{d\varphi}{d\lambda} \right| d\lambda$. Пространство с этой нормой изометрично

$$L_1(T) = \left\{ f: \int_T |f(t)| d\lambda < \infty \right\}$$

— полному нормированному пространству. Линейный функционал на M_T задается формулой

$$l(\varphi) = \int a(t) d\varphi, \quad (10)$$

где $a(t)$ — весовая функция функционала l . Вводя норму функционала

$$\|l\| = \sup_{\|\varphi\|=1} |l(\varphi)| = \sup_{t \in T} \text{ess} |a(t)|,$$

приходим к полному нормированному пространству $M_T^* = L_\infty(T)$ ограниченных почти всюду на компакте измеримых функций. Обозначим через $A_T \subset M_T^*$ множество линейных функционалов, весовые функции которых $a(t)$ почти всюду ограничены константой и почти всюду неотрицательны на T :

$$A_T = \{l: 0 \leq a(t) \leq 1 \pmod{\lambda}\}.$$

Множество A_T выпукло и замкнуто в пространстве M_T^* .

Задача оптимального планирования эксперимента для модели (2), выделяющей n -мерное подпространство L пространства мер, с областью планирования A_T имеет важное значение для ряда физических приложений. D -оптимальный (он же G_{A_T} -оптимальный) план эксперимента определяется в этом случае согласно процедуре, описанной в § 2.

2. Структура функционалов D -оптимального плана. Пусть функционал $l^* \in A_T$ принадлежит спектру D -оптимального плана ξ^* . Тогда существует такая мера $\varphi^* \in L$, что весовая функция $a^*(t)$ функционала l^* есть индикатор множества положительности меры φ^* . Множеством положительности меры φ называется наибольшее множество $T^+ \subset T$ такое, что для любого измеримого подмножества $T' \in T^+$ справедливо неравенство $\varphi(T') > 0$. Очевидно, $\varphi(T^+) = \sup \varphi(T'')$, где верхняя грань берется по всем измеримым подмножествам основного компакта T (носителя φ). Вводя плотность $f^*(t)$ меры φ^* относительно меры Лебега λ , можно записать

$$a^*(t) = \begin{cases} 1, & f^*(t) > 0, \\ 0, & f^*(t) \leq 0. \end{cases}$$

3. Градиентный и экстремальный функционал, градиентный и экстремальный план. Пусть l — произвольный функционал, лежащий внутри множества A_T . Фиксируем некоторый невырожденный план эксперимента ξ ($\det M(\xi) > 0$) и рассмотрим поведение дисперсии $d(l, \xi)$ как функции от l на множестве A_T . Выберем произвольную точку $l^0 \in A_T$ и рассмотрим семейство функционалов $l'(\beta)$ («отрезок» $[l, l^0]$):

$$l'(\beta) = \beta l^0 + (1 - \beta)l, \quad 0 \leq \beta \leq 1.$$

Производная от функции $d(l, \xi)$ по направлению l^0 определяется формулой

$$\frac{d}{d\beta} d(l'(\beta), \xi) \Big|_{\beta=0} = 2[l^0(\varphi_l) - d(l, \xi)],$$

где φ_l — направляющая мера функционала l относительно плана ξ :

$$\varphi_l = \sum_{i=1}^n e_i \sum_{k=1}^n [M^{-1}(\xi)]_{ik} l(e_k).$$

Справедливо очевидное тождество $l(\varphi_l) = d(l, \xi)$.

Градиентным функционалом для l относительно плана ξ называется функционал $l^+ \in A_T$, определяющий направление наискорейшего возрастания функции $d(l, \xi)$, т. е.

$$l^+(\varphi_l) = \sup_{l^0 \in A_T} l^0(\varphi_l) = \int_T \chi_l^+(t) d\varphi_l,$$

где $\chi_l^+(t)$ — индикатор множества положительности φ_l . Функционал l^+ является крайней точкой множества A_T .

Функционал $l \in A_T$ называется *экстремальным относительно плана* ξ , если он совпадает со своим градиентным функционалом. Экстремальный функционал l есть точка локального максимума функции $d(l, \xi)$.

Рассмотрим теперь поведение определителя $\det M(\xi)$, когда все функционалы плана смещаются внутри множества A_T без изменения нагрузок. Пусть $\xi = (l_1, \dots, l_N; \lambda_1, \dots, \lambda_N)$ — невырожденный N -точечный план и (l_1^0, \dots, l_N^0) — произвольная система N линейных функционалов, выбранных из множества A_T по одному на каждый функционал исходного плана. Рассмотрим план $\xi'(\beta) = (l_1', \dots, l_N'; \lambda_1, \dots, \lambda_N)$, получаемый смещением исходных функционалов вдоль отрезков $[l_j, l_j^0]$ без изменения весов:

$$l_j'(\beta) = \beta l_j^0 + (1 - \beta) l_j, \quad 0 \leq \beta \leq 1, \quad j = 1, \dots, N.$$

Производная определителя выражается формулой

$$\frac{1}{2} \frac{d \log \det M(\xi')}{d\beta} \Big|_{\beta=0} = \sum_{j=1}^N \lambda_j l_j^0(\varphi^{(j)}) - n,$$

где $\varphi^{(j)}$ — направляющая мера функционала $l_j \in \text{supp } \xi$ относительно плана ξ , она зависит только от исходного плана. Если все $\lambda_j > 0$, то набор функционалов (l_1^+, \dots, l_N^+) , где l_j^+ есть градиентный функционал для l_j , определяет направление наискорейшего возрастания $\det M(\xi')$. План $\xi^+ = (l_1^+, \dots, l_N^+; \lambda_1, \dots, \lambda_N)$, получаемый заменой всех функционалов некоторого невырожденного плана на соответствующие градиентные функционалы, называется *градиентным планом* для плана ξ . План ξ называется *экстремальным*, если он совпадает со своим градиентным планом, т. е. сосредоточен на экстремальных функционалах. Очевидно, экстремальный план не может быть улучшен непрерывным изменением своих функционалов.

4. Алгоритм поиска D -оптимального плана в пространстве мер. Укажем сначала итерационный процесс, переводящий любой невырожденный ($\det M(\xi^0) > 0$) план $\xi^0 = (l_1^0, \dots, l_N^0; \lambda_1, \dots, \lambda_N)$ в некоторый экстремальный план без изменения нагрузок. На каждом шаге процесса следует пересчитывать функционалы плана (т. е. фактически их весовые функции) по формулам

$$l_j^{h+1} = \beta_k l_j^{h+} + (1 - \beta_k) l_j^h, \quad j = 1, \dots, N, \quad (11)$$

где l_j^{h+} — градиентный функционал для функционала l_j^h плана ξ^h , полученного на предыдущем k -м шаге процесса, а параметр $0 < \beta_k \leq 1$ выбирается на каждом шаге из условия максимизации отношения определителей

$$\Phi^h(\beta) = \frac{\det M(\xi^{h+1})}{\det M(\xi^h)}.$$

На каждом шаге итерационного процесса (11) определитель информационной матрицы $\det M(\xi^k)$ строго возрастает и план ξ^k при $k \rightarrow \infty$ сходится к некоторому экстремальному плану. Процесс (11) может сходиться к некоторому экстремальному плану и при ином выборе параметра β_k , если только $\Phi^k(\beta_k) > 1$ и последовательность β_k не слишком быстро стремится к нулю.

Описанный итерационный процесс не изменяет числа пробных функционалов и их веса, поэтому он должен быть дополнен некоторой процедурой пересмотра и тех, и других. В принципе такая процедура может быть основана на идее переноса части нагрузки в точку максимума функции $d(l, \xi)$ ($l \in A_T$) (см. гл. 4). Однако применение этой идеи непосредственно к области A_T и даже к ее конечномерному образу $Z = z(A_T)$ затруднительно, так как область $A_T \subset M_T^*$ бесконечномерна, а ее конечномерный образ задается отображением (6) неконструктивно. Тем не менее поиск максимума функции $d(l, \xi)$ на множестве функционалов A_T может быть сведен к задаче максимизации некоторой числовой функции на поверхности единичной сферы в n -мерном пространстве.

Фиксируем план эксперимента ξ и рассмотрим множество $S_1 \subset L$ элементов вида

$$\varphi_a = \sum_{i=1}^n a_i e_i, \quad a = (a_1, \dots, a_n),$$

где коэффициенты a_1, \dots, a_n удовлетворяют условию $\sum_{i,k=1}^n a_i a_k \cdot M(\xi)_{ik} = 1$. Функция $d(l, \xi)$ для линейного функционала $l \in A_T$ допускает представление $d(l, \xi) = \left[\max_{\varphi \in \tilde{S}_1} l(\varphi) \right]^2$.

Рассмотрим теперь опорный функционал множества A_T

$$h(\varphi) = \sup_{l \in A_T} l(\varphi), \quad \varphi \in M_T.$$

Функционал h^* , являющийся решением экстремальной задачи $h^*(\varphi) = h(\varphi)$; имеет своей весовой функцией индикатор множества T_φ^+ — множества положительности меры φ , а значение опорного функционала выражается в виде

$$h(\varphi) = \varphi(T_\varphi^+) = \int_T [f(t)]_+ d\lambda,$$

где $[f(t)]_+ = \max\{0, f(t)\}$, $f(t)$ — плотность меры φ по мере Лебега λ . Вычисляя значения опорного функционала на элементах $\varphi_a \in S_1$, получаем числовую функцию переменных $(a_1, \dots, a_n) = a$

$$F(a) = h(\varphi_a), \quad \varphi_a \in S_1, \quad a \in S_1,$$

$$S_1 = \left\{ a = (a_1, \dots, a_n) : \sum_{i,k=1}^n a_i a_k M(\xi)_{ik} = 1 \right\}.$$

Проблема отыскания максимума функции $d(l, \xi)$ на множестве A_T может быть теперь решена следующим образом: справедливо представление

$$\sup_{l \in A_T} d(l, \xi) = \left[\max_{a \in S_1} F(a) \right]^2, \quad (12)$$

и экстремальный функционал l^* , на котором реализуется верхняя грань в левой части (12), имеет своей весовой функцией индикатор положительности меры $\varphi_{a^*} \in \tilde{S}_1$, где $a^* = \underset{a \in S_1}{\text{Arg max}} F(a)$.

Не всякое решение последней конечномерной задачи годится для восстановления функционала l^* : нужно, чтобы получающийся функционал оказался экстремальным относительно плана ξ . Эквивалентным условием является пропорциональность коэффициентов

$$a_i^* = c \sum_{k=1}^n [M^{-1}(\xi)]_{ik} \int_{T_{\varphi^*}^+} dl_k,$$

где $T_{\varphi^*}^+$ — множество положительности $\varphi^* = \varphi_{a^*}$.

Использование представления (12) позволяет полностью провести численную процедуру, описанную в гл. 4, для определения информационной матрицы D -оптимального плана и получения некоторой реализации самого оптимального плана ξ^* . Как известно, неприятной особенностью этой процедуры является сохранение в спектре плана точек, полученных на начальных стадиях итерационного процесса, что особенно осложняет задачу их последующего группирования в рассматриваемой «функциональной» ситуации. Поэтому можно рекомендовать начинать поиск с применения процесса (11) к насыщенному плану ($N = n$, $\lambda_j = n^{-1}$). В процессе (11) веса не изменяются. После того как возможности улучшения насыщенного плана с помощью процесса (11) будут исчерпаны, следует с помощью представления (12) проверить выполнение условия оптимальности $\sup_{l \in A_T} d(l, \xi) = n$,

и если оно не выполняется, применить перенос нагрузки в точку максимума функции $d(l, \xi)$. В дальнейшем рекомендуется чередовать этапы процедуры перераспределения нагрузки и процесса (11). В ходе вычислений можно контролировать близость плана к оптимальному с помощью известного неравенства Кифера

$$e^{n-d(l^*, \xi)} \leq \det M(\xi) / \det M(\xi^*),$$

которое очевидным образом сохраняет силу в рассматриваемом случае.

§ 4. Примеры оптимальных планов для оценивания параметров распределений

1. Полиномиальная плотность на отрезке. Пусть базисные меры в модели (2) имеют полиномиальные плотности относительно меры Лебега:

$$f_k(t) = \frac{d e_k}{d \lambda} = P_{k-1}(t), \quad k = 1, \dots, n,$$

где $P_k(t)$ — полином степени k переменной t на отрезке $[-1, +1]$. Как следует из результатов § 3, функционалам оптимального плана соответствуют индикаторы некоторых измеримых подмножеств основного отрезка $[-1, +1]$. Поэтому весовые функции $a(t)$ оптимального плана представляют граничные точки моментного пространства, порожденного ограниченными мерами, т. е. пространства

$$\Phi_n = \left\{ c = (c_1, \dots, c_n) : c_k = \int f_k(t) a(t) d\lambda(t), \quad k = 1, \dots, n \right\},$$

где $a(t)$ пробегает множество Φ всех борелевских измеримых функций, подчиненных условию $0 \leq a(t) \leq 1, t \in [-1, +1]$.

Пусть $a \in \Phi$ — функция, принимающая значение 1 на конечном числе интервалов и 0 в остальных точках. Точки, в которых функция $a(t)$ изменяет свое значение (т. е. концы интервалов постоянства), называются *узлами* функции $a(t)$. *Индексом* функции $a(t)$ называется число отдельных невырожденных интервалов, на которых $a(t) = 1$, при условии, что интервал, замыкание которого содержит концевую точку основного интервала, считается за $1/2$. Индекс $I(c)$ произвольной точки $c \in \Phi_n$ определяется как минимальное значение индекса, соответствующее тем функциям $a(t)$, которые принимают значения 0 и 1 и представляют точку c .

Известна следующая характеристика границы моментного пространства Φ_n и соответствующих функций $a(t)$, т. е. фактически весовых функций оптимального плана, для чебышевского базиса $\{f_k(t)\}$: необходимым и достаточным условием для того, чтобы точка $\bar{c} = (\bar{c}_1, \dots, \bar{c}_n)$ принадлежала границе пространства Φ_n , является условие $I(\bar{c}) \leq (n-1)/2$. Более того, каждая граничная точка соответствует единственной функции $a \in \Phi$ (с точностью до эквивалентности относительно меры Лебега).

Указанная характеристика сводит задачу планирования к конечномерной задаче максимизации в пространстве размерности $2I(\bar{c}) \times n = n(n-1)$, считая за параметры свободные концы интервалов.

Пример 2. Линейная плотность на отрезке. Выберем базисные плотности на отрезке $[-1, +1]$ в виде

$$f_0(t) \equiv 1, \quad f_1(t) = t.$$

Граничные точки моментного пространства характеризуются условием $I(\bar{c}) \leq 1/2$, т. е. весовая функция граничного функционала

может быть либо индикатором простого интервала, примыкающего к концу основного отрезка, либо индикатором всего отрезка $[-1, +1]$ (по соглашению в этом случае индекс принимается за нуль). Фактически необходимо рассмотреть два семейства весовых функций:

$$a_{x_1}(t) = \begin{cases} 1, & -1 \leq t \leq x_1, \\ 0, & x_1 \leq t \leq 1, \end{cases} \quad -1 \leq x_1 \leq 1,$$

$$a_{x_2}(t) = \begin{cases} 1, & x_2 \leq t \leq 1, \\ 0, & -1 \leq t \leq x_2, \end{cases} \quad -1 \leq x_2 \leq 1.$$

Оба семейства содержат индикатор отрезка $[-1, +1]$. Применяя отображение (6) к функционалам с указанными весовыми функциями, в силу приведенной выше характеристики получим границы области $Z = z(A_T) \subset \mathbb{R}^2$. Эта область в координатах (z_0, z_1) ограничена ветвями двух симметричных относительно оси z_0 парабол:

$$z_1 = \pm \left(\frac{z_0^2}{2} - z_0 \right), \quad 0 \leq z_0 \leq 2.$$

Из соображений симметрии оптимальный план ξ_Z^* может состоять только из следующих трех точек: точки $z^0 : z_0^0 = 2, z_1^0 = 0$ с весом λ_0 ; и двух точек $z^\pm : z_0^\pm = z, z_1^\pm = \pm(z - z^2/2)$ с весом $\lambda_\pm = (1 - \lambda_0)/2$ каждая. Максимизируя определитель $\det M(\xi)$ относительно параметров z и λ_0 , получаем, что координата z должна быть положительным корнем уравнения $z^2 + 2z - 4 = 0$, т. е. $z = \sqrt{5} - 1 = 1,236067$, при этом

$$\lambda_0 = (2 - z^2)/(4 - z^2) = (\sqrt{5} - 2)/(\sqrt{5} - 1) = 0,190983,$$

$$\lambda_\pm = 0,404508.$$

Переходя от точек области Z к функционалам, получаем, что точке z^0 соответствует весовая функция $a_0(t) \equiv 1$ ($t \in [-1, +1]$), точке z^+ — весовая функция $a_{x_1}(t)$ с $x_1 = z - 1 = 0,23607$, точке z^- — функция $a_{x_2}(t)$ с $x_2 = 1 - z = -0,23607$.

2. Линейная плотность на круге. Рассмотрим в качестве поставителя распределения T круг радиуса 1:

$$t_1^2 + t_2^2 \leq 1,$$

а модель (2) для неизвестной плотности распределения запишем в виде

$$f(t) = \theta_0 + \theta_1 t_1 + \theta_2 t_2.$$

Поскольку функционал оптимального плана должен иметь в качестве весовой функции индикатор множества положительности некоторой меры с линейной плотностью, ясно, что указанное множество должно иметь вид кругового сегмента. Каноническая

область планирования $Z \subset \mathbb{R}^3$ в силу симметрии задачи имеет форму тела вращения с осью z_0 и образующей, описываемой кривой в параметрическом представлении:

$$z_1 = \frac{2}{3} (1 - p^2) \sqrt{1 - p^2},$$

$$z_0 = \frac{\pi}{2} - \text{Arcsin } p - p \sqrt{1 - p^2}, \quad z_0 \in [0, \pi], \quad -1 \leq p \leq 1,$$

при этом координата z_0 равна площади кругового сегмента, представляющего граничную точку множества Z , а параметр p определяет высоту сегмента: $h = 1 - p$. Вся масса оптимального плана должна быть симметрично распределена на окружности, получаемой в результате сечения указанного тела вращения плоскостью, перпендикулярной к оси z_0 на расстоянии $z_0^* > \pi/2$ от начала. Более точно, параметр p^* для соответствующего сегмента должен быть корнем уравнения

$$p^* = -\frac{1}{2} \frac{z_1(p^*)}{z_0(p^*)},$$

что дает $p^* = -0,167686$, а площадь «оптимального» сегмента по отношению к площади круга составляет величину $z_0^*/\pi = 0,60625$. D -оптимальный план с минимальным числом точек состоит из трех функционалов указанного вида, сегменты которых повернуты под углом 120° друг относительно друга, и веса указанных функционалов все равны $1/3$.

3. Оптимальные планы взвешивания. Пусть распределения в модели (2) определены на некотором компакте T . Фиксируем разбиение этого компакта на непересекающиеся множества $\{T_k\}_{k=1}^n$ и рассмотрим базис из ступенчатых функций:

$$\frac{de_k}{d\lambda} = f_k(t) = \frac{1}{\lambda(T_k)} \chi_k(t), \quad k = 1, \dots, n,$$

где $\chi_k(t)$ — индикатор множества T_k , λ — мера Лебега. D -оптимальный план для указанной модели состоит из функционалов, весовые функции которых являются индикаторами множества положительности некоторых линейных комбинаций базисных функций, т. е. фактически индикаторами некоторых объединений подмножеств исходного разбиения. Ограничиваясь функционалами указанного вида, получаем, что задача оценивания параметров модели (2) эквивалентна задаче взвешивания n предметов с весами $(\theta_1, \dots, \theta_n)$ на одночашечных весах. Каноническая область представляет собой куб

$$Z = \{z = (z_1, \dots, z_n): 0 \leq z_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, n\},$$

где z_i — «доля» i -го предмета, взятая для взвешивания. Так как куб является выпуклой оболочкой своих вершин, оптимальный план ξ_Z^* можно считать сосредоточенным в вершинах куба. Из-

вестно, что оптимальный план взвешивания имеет информационную матрицу вида

$$M(\xi^*) = \begin{cases} \frac{n+1}{n} (I_n + E_n), & n = 2v - 1, \\ \frac{n+2}{4(n+1)} (I_n + E_n), & n = 2v, \end{cases}$$

где I_n — единичная матрица порядка n , E_n — матрица $n \times n$, состоящая из одних единиц, v — целое число. Точками оптимального плана могут служить вершины куба, координаты которых содержат l^* единиц и $n - l^*$ нулей, где

$$l^* = \begin{cases} \frac{n+1}{2}, & n = 2v - 1, \\ \frac{n+2}{2} \text{ или } \frac{n}{2}, & n = 2v, \end{cases}$$

причем нагрузка должна быть равномерно распределена между всеми указанными точками. Если существует матрица Адамара порядка $n+1$, то может быть построен оптимальный план взвешивания n предметов, включающий ровно n наблюдений. Пусть H_{n+1} — матрица Адамара порядка $n+1$ в стандартной форме (1-й столбец и 1-я строка содержат только +1), определим матрицу

$$A = -\frac{1}{2} H_{n+1} + \frac{1}{2} E_{n+1}.$$

Матрица A в первой строке и первом столбце содержит одни нули, остальные элементы могут иметь значения 0 и 1. Нижний правый блок $n \times n$ -матрицы A является матрицей D -оптимального плана взвешивания, причем строки соответствуют наблюдениям ($A_{ji} = 1 - i$ -й предмет кладется на весы при j -м взвешивании). Нагрузки всех наблюдений одинаковы. Возвращаясь к функционалам D -оптимального плана ξ^* , получаем, что весовая функция j -го функционала есть

$$a_j^*(t) = \sum_{i=1}^n A_{j+1, i+1} x_i(t), \quad j = 1, \dots, n.$$

§ 5. Планы для оценивания одного из параметров регрессии, связь с теорией наилучших приближений

1. Постановка задачи планирования эксперимента. Пусть в модели (2) выделен один параметр

$$\varphi = \theta_0 e_0 + \sum_{i=1}^n \theta_i e_i, \quad (13)$$

где e_0, e_1, \dots, e_n — линейно независимые элементы полного нормированного пространства Φ . Пусть $\mathcal{E} \subset \Phi^*$ — область планирования в сопряженном пространстве. Требуется найти план экспе-

римента из условия минимальности дисперсии НЛН-оценки для параметра θ_0 . Пусть $Z \subset \mathbb{R}^{n+1}$ — множество векторов, получаемое аналогично (6):

$$Z = \{z = (z_0, z_1, \dots, z_n): z_i = X(e_i), i = 0, 1, \dots, n, X \in \mathcal{X}\}.$$

Если множество планирования \mathcal{X} ограничено по норме пространства Φ^* и замкнуто, то множество Z компактно. Информационная матрица любого плана ξ может быть получена как информационная матрица некоторого плана ξ_Z на области Z : $M(\xi) = \int_Z z z^T \xi_Z(dz)$. Условие минимальности дисперсии оценки параметра θ_0 эквивалентно следующей задаче минимакса для области Z :

$$\inf_{\xi} D(\hat{\theta}_0) = \left[\sup_{\xi} \min_c \int_Z \left| z_0 - \sum_{i=1}^n c_i z_i \right|^2 \xi_Z(dz) \right]^{-1}$$

2. Эквивалентность задаче аппроксимации. Рассмотрим задачу о наилучшем приближении элемента e_0 в модели (13) линейными комбинациями остальных n элементов (e_1, \dots, e_n) :

$$\sup_{X \in \mathcal{X}} \left| X(e_0) - \sum_{i=1}^n c_i^* X(e_i) \right| = \min_c \sup_{X \in \mathcal{X}} \left| X(e_0) - \sum_{i=1}^n c_i X(e_i) \right|.$$

Положим

$$\|\varphi\|_{\mathcal{X}} = \sup_{X \in \mathcal{X}} |X(\varphi)|, \quad \varphi \in \Phi.$$

Условие наилучшего приближения может быть записано теперь в стандартном виде

$$\left\| e_0 - \sum_{i=1}^n c_i^* e_i \right\|_{\mathcal{X}} = \min_c \left\| e_0 - \sum_{i=1}^n c_i e_i \right\|_{\mathcal{X}}. \quad (14)$$

Пусть $c^* = (c_1^*, \dots, c_n^*)$ — вектор коэффициентов в задаче наилучшего приближения (14) и $B = \{X^*\} \subset \mathcal{X}$ — множество функционалов, на которых достигается максимальное отклонение для элемента наилучшего приближения, т. е. функционалов вида

$$* \quad X^*: \left| X^* \left(e_0 - \sum_{i=1}^n c_i^* e_i \right) \right| = \left\| e_0 - \sum_{i=1}^n c_i^* e_i \right\|_{\mathcal{X}}.$$

Тогда существует точечная мера $\xi^* = (X_1^*, \dots, X_r^*; \lambda_1, \dots, \lambda_r)$, сосредоточенная на множестве B , удовлетворяющая условиям ортогональности

$$\sum_{j=1}^r \left[X_j^*(e_0) - \sum_{i=1}^n c_i^* X_j^*(e_i) \right] X_j^*(e_k) \lambda_j = 0, \quad k = 1, \dots, n. \quad (15)$$

Мера ξ^* с указанными свойствами и дает оптимальный план для оценивания параметра θ_0 в модели (13).

Таким образом, задача планирования эксперимента для оценивания одного параметра регрессии полностью сводится к задаче наилучшей аппроксимации в специальной метрике, согласованной с областью планирования \mathcal{X} в сопряженном функциональном пространстве Φ^* . Дальнейшие результаты связаны с конкретным выбором пространств (Φ, Φ^*) . При этом в зависимости от природы этих пространств оптимальный эксперимент может включать различное число наблюдений, в частности может позволять или не позволять оценивать остальные n параметров регрессии.

3. Пространство C_X — чебышевская аппроксимация. В классической теории планирования эксперимента, как уже отмечалось в § 1, в качестве основного пространства Φ выбирается пространство C_X непрерывных функций на компакте X . Множество планирования $\mathcal{X} \subset C_X^*$ в сопряженном пространстве состоит из функционалов вида

$$X_x(\varphi) = \varphi(x), \quad x \in X.$$

В этом случае задача (14) — классическая задача чебышевского приближения в равномерной метрике (норма пространства C_X)

$$\|\varphi\|_{\mathcal{X}} = \max_{x \in X} |\varphi(x)|.$$

Если компакт X представляет отрезок числовой оси $[a, b]$ и при этом базис подпространства (e_1, \dots, e_n) в модели (13) — чебышевский на отрезке $[a, b]$, то оптимальный план включает ровно $n+1$ точек чебышевского альтерпанса и позволяет в принципе оценить все параметры модели. Веса плана должны быть выбраны из условия ортогональности (15), что вместе с условием нормировки как раз составляет $n+1$ условий для определения $n+1$ нагрузок.

4. Пространство L_2 . Выбирая в качестве основного пространства Φ пространство $L_2(T)$ функций на компакте T , интегрируемых с квадратом относительно некоторой положительной меры λ , получаем $\Phi^* = L_2(T)$. Рассмотрим в качестве множества планирования единичный шар сопряженного пространства, т. е. множество функционалов вида

$$\mathcal{X} = \left\{ X : X(\varphi) = \int_T x(t) \varphi(t) d\lambda(t) = (x, \varphi), \quad \int_T |x(t)|^2 d\lambda \leq 1 \right\}.$$

В этом случае норма $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$ совпадает с нормой основного пространства $L_2(T)$, а решение задачи наилучшего приближения (14) дается ортогональной проекцией элемента e_0 на подпространство $\mathcal{L}(e_1, \dots, e_n)$.

Вектор коэффициентов наилучшего приближения получается из системы линейных уравнений

$$\sum_{i=1}^n c_i^* (e_i, e_k) = (e_0, e_k), \quad k = 1, \dots, n.$$

Оптимальный план сосредоточен на единственном функционале $X^*(\cdot) = (x^*, \cdot)$,

$$x^*(t) = \frac{\varphi^*(t)}{(\varphi^*, \varphi^*)^{1/2}}, \quad \varphi^*(t) = e_0(t) - \sum_{i=1}^n c_i^* e_i(t).$$

Условия ортогональности (15) выполняются при этом автоматически. Наблюдение функционала X^* позволяет оценить только параметр θ_0 , остальные параметры не оцениваются.

5. Пространство L_1 . Рассмотрим ситуацию, описанную в § 3: $\Phi = L_1(T)$, $\mathcal{X} \subset L_\infty(T)$ — множество положительных ограниченных функционалов A_T . Норма, порождаемая множеством A_T , не совпадает с нормой пространства $L_1(T)$, но топологически ей эквивалентна. Пусть теперь $f^*(t)$ — «полином» наименьшего уклонения в аппроксимационной задаче (14) с метрикой $\|\cdot\|_{A_T}$:

$$f^*(t) = f_0(t) - \sum_{i=1}^n c_i^* f_i(t),$$

где f_0, f_1, \dots, f_n — плотности базисных распределений относительно меры Лебега. Тогда в качестве множества B функционалов плана можно взять множество, состоящее максимум из двух функционалов X^+ и X^- , весовые функции которых суть индикаторы множеств положительности и отрицательности полинома $f^*(t)$:

$$X^\pm(f) = \int_T \chi_{f^*}^\pm(t) f(t) d\lambda(t),$$

$$\chi_{f^*}^\pm(t) = \begin{cases} 1, & f^*(t) \geq 0, \\ 0, & f^*(t) < 0, \end{cases} \quad \chi_{f^*}^-(t) = 1 - \chi_{f^*}^+(t).$$

Для любого $0 \leq p \leq 1$ введем числовую функцию

$$|x|_p = \begin{cases} px, & x \geq 0, \\ (p-1)x, & x \leq 0 \end{cases}$$

и рассмотрим семейство аппроксимационных задач вида (14) в несимметричной метрике $\|f\|_p = \int_T |f(t)|_p d\lambda(t)$. Тогда:

1) Задача аппроксимации (14) с нормой $\|\cdot\|_{A_T}$ эквивалентна задаче аппроксимации в норме $\|\cdot\|_{p^*}$ при некотором $0 \leq p^* \leq 1$; при этом, если $0 < p^* < 1$, то выполняется условие $X^+(f^*) = -X^-(f^*)$, где f^* — полином наименьшего уклонения;

2) оптимальный план для оценивания параметра θ_0 сосредоточен на функционалах X^\pm с весами p^* и $1 - p^*$;

$$\xi^* = (X^+, X^-; p^*, 1 - p^*),$$

при этом не исключаются случаи $p^* = 0$ и $p^* = 1$. Условия ортогональности (15) выполняются автоматически, и наблюдения не содержат информацию о мешающих параметрах.

Литература к гл. 7: [6*, 41, 45, 55, 62*, 92*].

ГЛАВА 8
НЕКОТОРЫЕ ЗАДАЧИ
ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ
ДЛЯ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОЛЕЙ

Известно много задач наблюдения и анализа случайных процессов и полей, так или иначе связанных с выбором числа и расположения отсчетных точек, в которых регистрируются значения поля (процесса). Типичным примером могут служить наблюдения метеорологических полей (температуры, давления и т. д.); проводимых в отдельных точках земной поверхности. Фиксируя некоторый критерий информативности таких наблюдений, приходим к задачам оптимизации, напоминающим задачи планирования эксперимента, однако по существу эти задачи носят аппроксимационный характер. Несмотря на сравнительно большое число публикаций, известные результаты, по-видимому, не являются окончательными. Ниже приводятся в основном постановки задач планирования, связанных с изучением случайных процессов и полей, иллюстрируемые некоторыми типичными результатами.

§ 1. Планирование регрессионного эксперимента
с коррелированными наблюдениями

1. **Оценивание единственного параметра регрессии в коррелированном шуме.** Простейшей задачей оптимального выбора отсчетных точек для наблюдения случайного процесса является следующая. Пусть на отрезке $T = [0, 1]$ задан случайный процесс

$$y(t) = \theta f(t) + \varepsilon(t), \quad t \in T, \quad (1)$$

где $f(t)$ — известная функция, θ — неизвестный параметр, $\varepsilon(t)$ — случайный процесс второго порядка с нулевым средним и ковариационной функцией $K(s, t) = E\varepsilon(s)\varepsilon(t)$ ($s, t \in T$). Предположим, что ядро $K(s, t)$ образует несингулярную матрицу при сужении на любое конечное множество точек из T , и что процесс $\varepsilon(t)$ непрерывен в среднем на T . Пусть далее $T_n = \{t_1, \dots, t_n \mid 0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq 1\}$. Вектор наблюдений Y_n образуется отсчетами процесса $y(t)$ в точках множества T_n : $Y_n = (y(t_1), \dots, y(t_n))^T$,

аналогично $f_n = (f(t_1), \dots, f(t_n))^T$ и $K_n = (K(t_i, t_k))_{i,k=1}^n$. НЛН-оценка параметра θ по наблюдениям Y_n есть $\hat{\theta} = c^T Y_n$, где $c = K_n^{-1} f_n / (f_n^T K_n^{-1} f_n)$, и дисперсия этой оценки равна $D(\hat{\theta}) = f_n^T K_n^{-1} f_n$. При добавлении новых отсчетных точек дисперсия наилучшей оценки не возрастает.

Наша ближайшая цель состоит в том, чтобы придать смысл оптимальному выбору множества отсчетных точек T_n . Пусть функция $f(t)$ в модели (1) непрерывна на T , обозначим

$$\|f\|^2 = \sup f_n^T K_n^{-1} f_n, \quad (2)$$

где верхняя грань берется по всем конечным наборам T_n . Класс функций $\mathcal{F} = \{f \mid \|f\| < \infty\}$ является гильбертовым пространством с нормой (2), порожденной ядром K . Это гильбертово пространство называется *гильбертовым пространством с воспроизводящим ядром K* (ГПВЯ) (см. гл. 9). Если $(\cdot, \cdot)_K$ — скалярное произведение, ассоциированное с нормой (2), то:

- 1) при любом $t \in T$ функция $K(\cdot, t) \in \mathcal{F}$,
- 2) для любой функции $f \in \mathcal{F}$ и любого $t \in T$ имеем $(f, K(\cdot, t))_K = f(t)$ — воспроизводящее свойство.

Пространство \mathcal{F} представляет собой класс функций регрессии, для которых всем конечным наборам наблюдений соответствует минимальная дисперсия линейной оценки параметра θ , отделенная от нуля. Точнее, пусть $z_n = c_n^T Y_n$ — НЛН-оценка параметра θ в модели (1) по наблюдениям на T_n ; тогда существует такая случайная величина z , что

$$E_\theta z = \theta, \quad E_\theta (z - \theta)^2 = \|f\|^{-2}, \quad E_\theta (z_n - z)^2 \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Если функция регрессии $f \notin \mathcal{F}$, то дисперсию наилучшей оценки следует считать пулем. Таким образом, пространство \mathcal{F} есть пространство регулярных сдвигов процесса $\varepsilon(t)$ (см. гл. 9). Если процесс $\varepsilon(t)$ непрерывен в среднем, то

$$K(s, s) + K(t, t) - 2K(s, t) = \|K(\cdot, s) - K(\cdot, t)\|^2 \rightarrow 0, \quad t \rightarrow s,$$

откуда в силу воспроизводящего свойства следует, что пространство \mathcal{F} состоит из непрерывных функций и является сепарабельным гильбертовым пространством. Пространство \mathcal{F} изоморфно подпространству в $L_2(T)$, натянутому на «реализации» случайного процесса $\varepsilon(t)$, т. е. порождается всевозможными линейными комбинациями $\sum \alpha_i K(s_i, t)$ ($t \in T$).

Рассмотрим теперь проблему оптимального выбора конечного набора T_n . Пусть $S_n = \{T_n\}$ — множество всех конечных наборов, содержащих ровно n различных точек. *Оптимальный n -точечный план* для модели (1) определяется как набор

$$T_n^* = \text{Arg} \sup_{T_n \in S_n} \|f\|_{T_n},$$

где норма $\|\cdot\|_{T_n}$, соответствующая набору (плану) T_n , порождает

ется квадратичной формой с матрицей K_n^{-1} :

$$\|f\|_{T_n}^2 = f_n^T K_n^{-1} f_n.$$

Если обозначить через \mathcal{F}_n гильбертово пространство с нормой $\|\cdot\|_n = \sup_{T_n \in S_n} \|\cdot\|_{T_n}$, то $\|f\|_{T_n} = \|P_{T_n} f\|_n$, где P_{T_n} — проектор в пространстве \mathcal{F}_n на подпространство, натянутое на $\{K(\cdot, t), t \in T_n\}$. Из-за непрерывности процесса $P_{T_n} f \rightarrow P_{T_n} f$ при $T_n' \rightarrow T_n''$ ($t_i' \rightarrow t_i''$, $i = 1, \dots, n$), т. е. $\|P_{T_n} f\|_n$ — непрерывная функция на множестве n -точечных наборов S_n . Так как замыкание $\bar{S}_n = \bigcup_{r < n} S_r$

содержит планы с меньшим числом точек, то существование оптимального строго n -точечного плана T_n^* фактически представляет некоторое, вообще говоря, трудно проверяемое условие на процесс $\varepsilon(t)$. Конструктивные результаты в этом направлении отсутствуют, за исключением важного частного случая, когда при некотором $n < \infty$ выполнено $\|f\|_n = \|f\|$.

План T_n с наименьшим n , для которого $\|f\|_n = \|f\|$, называется *глобально-оптимальным планом*. Необходимым и достаточным условием существования глобально-оптимального плана при некотором n является представление

$$f(t) = \sum_{i=1}^n a_i K(t, t_i),$$

причем набор (t_1, \dots, t_n) , фигурирующий в написанном представлении, и есть соответствующий глобально-оптимальный план. Заметим, что понятие глобально-оптимального плана очевидным образом переносится на случай произвольного компакта T .

При отсутствии глобально-оптимального плана для поиска точного n -точечного плана T_n^* можно (при сравнительно небольшом числе точек) применять прямые численные методы поиска максимума величины $\|f\|_{T_n}$ как функции отсчетных точек.

2. Асимптотическая оптимальность. Так как всегда $\|f\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|f\|_n$, то представляется естественным ослабить требование точной оптимальности плана при каждом n до асимптотической оптимальности последовательности планов $\{T_n, n \rightarrow \infty\}$. Пусть в модели (1) $f(t)$ — непрерывная функция, допускающая представление

$$f(t) = \int_0^1 K(s, t) \varphi(s) ds, \quad (3)$$

где функция $\varphi(s)$ также предполагается непрерывной на $T = [0, 1]$, так что в частности $f \in \mathcal{F}$. Последовательность планов

$\{T_n, n \geq 1\}$ называется *асимптотически оптимальной*, если

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\|f\|^2 - \|P_{T_n} f\|^2}{\|f\|^2 - \sup_{T_n \in S_n} \|P_{T_n} f\|^2} = 1.$$

Типичный результат относительно структуры асимптотически оптимальной последовательности планов формулируется следующим образом.

Пусть ядро $K(s, t)$ непрерывно на квадрате $T \times T$ и имеет непрерывные производные до второго порядка включительно во всех точках квадрата вне главной диагонали ($s \neq t$). На диагонали $s = t$ функция имеет все правые и левые производные до второго порядка включительно и ненулевой скачок первой производной:

$$\alpha(t) = \lim_{s \downarrow t} \frac{\partial}{\partial s} K(s, t) - \lim_{s \uparrow t} \frac{\partial}{\partial s} K(s, t) > 0, \quad t \in T;$$

при этом функция $\alpha(t)$ — строго положительна и непрерывна на T . Пусть $\partial^2 K(\cdot, t)/\partial t^2 \in \mathcal{F}$ при любом $t \in T$ и нормы функций этого семейства ограничены в совокупности; тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \inf_{T_n \in S_n} \|f - P_{T_n} f\|^2 = \frac{1}{12} \int_0^1 [\alpha(t) \varphi^2(t)]^{1/3} dt.$$

Асимптотически оптимальная последовательность $\{T_n^*\}$ определяется через плотность $h(t) = [\alpha(t)\varphi^2(t)]^{1/3}$ следующим образом:

$$\int_0^{t_i^*} h(t) dt = \frac{i-1}{n-1} \int_0^1 h(t) dt, \quad i = 1, \dots, n,$$

где t_i^* — наименьшее число, удовлетворяющее написанному условию.

Замечание 1. Условия на ядро связаны с разрешимостью интегрального уравнения (3) относительно функции $\varphi(s)$ в классе непрерывных функций. Примеры ядер, удовлетворяющих указанным условиям, доставляют семейства

$$K(s, t) = \int_0^{|t-s|^{-1}} \{1 - \lambda |t-s|\} p(\lambda) d\lambda,$$

где $p(\lambda)$ — вероятностная плотность на $(0, \infty)$ с условиями

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^3 p(\lambda) = c < 0,$$

$$\int_0^\infty [\lambda p'(\lambda) + 3p(\lambda)]^2 \lambda^6 d\lambda < \infty,$$

или

$$K(s, t) = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t - s\lambda} dP(\lambda),$$

где $P(\lambda)$ — функция распределения с конечным третьим моментом.

Замечание 2. Результат об асимптотически оптимальной последовательности может быть распространен на функции $f(t)$, представимые в виде

$$f(t) = \int_0^1 K(s, t) \varphi(s) ds + \sum_{k=1}^N a_k K(s_k, t),$$

откуда следует, что требование непрерывности решения интегрального уравнения (3) является излишним.

3. **Оценивание нескольких параметров регрессии в коррелированном шуме.** Обобщение модели (1) на случай нескольких неизвестных параметров $\theta_1, \dots, \theta_k$ имеет вид

$$y(t) = \sum_{i=1}^k \theta_i f_i(t) + \varepsilon(t), \quad t \in T = [0, 1], \quad (4)$$

где $f_1(t), \dots, f_k(t)$ — известные функции, а процесс $\varepsilon(t)$ определен, как в (1). Каждому набору отсчетных точек T_n соответствует система наилучших линейных несмещенных оценок параметров $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_k$ с ковариационной матрицей $A_{T_n}^{-1}$, где матрица A_{T_n} порядка k имеет элементы

$$[A_{T_n}]_{rs} = \sum_{i,j=1}^n f_r(t_i) [K_n^{-1}]_{ij} f_s(t_j), \quad r, s = 1, \dots, k.$$

Поскольку множество положительно определенных матриц только частично упорядочено, нельзя гарантировать существование наименьшей (в смысле соответствующего порядка) матрицы $A_{T_n}^{-1}$ для некоторого $T_n \in S_n$. Поэтому для целей оптимизации необходимо использовать какие-либо «одномерные» критерии типа дисперсии линейной формы от параметров, максимальной дисперсии линейной формы из некоторого компактного множества таких форм или обобщенной дисперсии оценок параметров $\det A_{T_n}^{-1}$. Для того чтобы соответствующие критерии качества имели смысл, необходимо, как и в одномерном случае, чтобы функция $f(t) = Ey(t)$ принадлежала ГПВЯ — пространству регулярных сдвигов процесса $\varepsilon(t)$, т. е. необходимо, чтобы $f_i \in \mathcal{F}$ ($i = 1, \dots, n$). Относительно точных оптимальных планов порядка n в этом случае также ничего не известно, за исключением ситуации, когда существует глобально-оптимальный план, т. е. все f_i представимы в виде конечных линейных комбинаций $\{K(t_j, t), t_j \in T_n\}$.

Асимптотически оптимальные последовательности планов определяются как в одномерном случае, только вместо функционалов типа $\|f\|_{T_n}$ используется какой-то критерий $\psi(A_{T_n})$ от матрицы A_{T_n} . Для построения таких последовательностей также используется представление через квантили некоторой плотности $h(t)$, определяемой по ядру $K(s, t)$, совокупности решений $\varphi_i(s)$ интегральных уравнений (3) для всех f_i и критерию ψ . Однако соответствующие конкретные результаты трудно обозримы и, видимо, не являются окончательными; так как используют, вообще говоря, мало естественные предположения относительно базисных функций $\{f_i\}$.

Литература к § 1: [46, 184, 185].

§ 2. Оптимальная интерполяция случайных полей второго порядка

Проблема оптимальной интерполяции случайного поля по заданным значениям в конечном числе точек также является по существу проблемой аппроксимации. Пусть $g(t)$ ($t \in T$) — непрерывная функция на компакте T и $T_n = \{t_1, \dots, t_n\}$, — как и раньше, конечный набор точек (называемый *планом* наблюдений). Предположим, что $g(t)$ является реализацией гауссовского процесса (поля) с нулевым средним $Eg(t) = 0$ и заданной строго положительно определенной ковариационной функцией $K(s, t) = Eg(s)g(t)$ ($s, t \in T$). Байесовская (регрессионная) оценка $g_n(t)$ для поля $g(t)$ по данным $g(t_1), \dots, g(t_n)$ есть

$$g_n(t) = E\{g(t) | g(t_1), \dots, g(t_n)\} = k_{T_n}^T(t) K_{T_n}^{-1} g_{T_n},$$

где векторы $k_{T_n}(t)$ и g_{T_n} определены следующим образом:

$$k_{T_n}(t) = (K(t_1, t), \dots, K(t_n, t))^T, \quad g_{T_n} = (g(t_1), \dots, g(t_n))^T,$$

а матрица K_{T_n} — сужение ядра $K(s, t)$ на сетку T_n : Оценка $g_n(t)$ является наилучшей линейной оценкой поля в точке t :

$$\min_a E \left| g(t) - \sum_{i=1}^n a_i g(t_i) \right|^2 = E |g(t) - g_n(t)|^2.$$

В случае гауссовского поля оценка $g_n(t)$ оказывается наилучшей в классе всех (не обязательно линейных) оценок. Определим меру качества оценки $g_n(t)$, т. е. плана T_n , в виде средней дисперсии ошибки прогноза по области T :

$$J(T_n) = E \int_T (g(t) - g_n(t))^2 dt.$$

Справедлива формула

$$J(T_n) = \int_T \left\{ K(t, t) - k_{T_n}^T(t) K_{T_n}^{-1} k_{T_n}(t) \right\} dt.$$

Нижняя граница для $J(T_n)$ при заданном n может быть указана в терминах собственных чисел ковариационного оператора K :

$$(Kf)(t) = \int_T K(s, t) f(s) ds.$$

Предположим, что так определенный оператор является компактным симметрическим оператором из пространства $L_2(T)$ в $L_2(T)$ и соответствующие собственные числа упорядочены по величине: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$. Тогда

$$\inf_{T_n} J(T_n) \geq \sum_{i=n+1}^{\infty} \lambda_i = \int_T K(t, t) dt - \sum_{i=1}^n \lambda_i.$$

Ничего не известно о том, достигается ли указанная нижняя граница. Тем не менее при численном поиске оптимального плана этот результат может быть использован, если на некотором этапе поиска окажется, что величина $J(T_n)$ близка к своей нижней границе.

Литература к § 2: [167].

ГЛАВА 9

ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ, СВЯЗАННЫХ С ОБРАТНЫМИ ЗАДАЧАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

§ 1. Общая постановка обратной задачи, связанной с регрессионным экспериментом

1. Обратные задачи (физический аспект). По сложившейся терминологии к прямым задачам математической физики относят задачи, ориентированные по ходу причинно-следственной связи, т. е. задачи разыскания неизвестных следствий заданных причин, например определение полей во времени и в пространстве при заданных источниках, вычисление реакции прибора по известному сигналу на входе и т. п. При исследовании сложных объектов содержание прямых задач составляет определение всевозможных внешних, т. е. доступных для непосредственных наблюдений, проявлений внутреннего состояния объекта. Обратными задачами в этом понимании оказываются задачи, связанные с обращением причинно-следственной связи, т. е. задачи отыскания неизвестных причин известных следствий, например, определение характеристик источников поля по значениям поля в некоторых точках или областях пространства, восстановление входного сигнала по реакции на выходе прибора и т. д. Обратные задачи возникают обычно как задачи интерпретации тех или иных наблюдений, т. е. задачи восстановления внутреннего состояния объекта по его внешним проявлениям.

Характерной особенностью большинства обратных задач является их *некорректность*. Этим исторически сложившимся и не очень удачным термином обозначается особый род неустойчивости решения обратной задачи к ошибкам задания исходных данных, связанный с математической природой задачи. На практике, при численном решении некорректной обратной задачи, если не приняты соответствующие меры, возникают большие численные ошибки, часто совершенно лишаящие результат какого-либо физического смысла.

Конкретными примерами некорректных обратных задач математической физики могут служить следующие задачи:

а) Обратная задача теории потенциала, связанная, например, с интерпретацией гравиметрических наблюдений в геологоразведке.

б) Обратная задача теплопроводности, т. е. восстановление начального распределения температуры (или распределения источников тепла) по наблюдаемому распределению температуры в некоторый более поздний момент времени.

в) Класс обратных задач теории переноса излучения, возникающих как задачи «зондирования» протяженных сред по оптическим характеристикам выходящего излучения, а также задачи оптической и рентгеновской томографии, диагностики плазмы и т. д.

г) Класс «инструментальных» обратных задач, возникающих при попытке исключить влияние измерительного прибора в оптической и рентгеновской спектроскопии, инструментальной оптике и радиоастрономии и т. д.

Трудности численного решения некорректных задач породили обширную литературу, посвященную анализу устойчивости обратных задач и поискам устойчивых численных алгоритмов обращения. Однако, как показывает более внимательный анализ, некорректность обратной задачи связана по существу с информационной недоопределенностью. Поэтому представляется очевидным, что одно усовершенствование численных методов не может привести к полезным результатам, если в исходных экспериментальных данных отсутствует необходимая информация. Важным средством повышения реальной информативности исходных данных является оптимальное планирование эксперимента для их получения.

2. Некорректность обратной задачи. Типичная обратная задача математической физики — это решение интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода

$$\int_a^b K(x, y) \varphi(x) dx = f(y), \quad c \leq y \leq d, \quad (1)$$

где $\varphi(x)$ — неизвестная функция, $K(x, y)$ — ядро интегрального уравнения, функция $f(y)$ считается известной. Предположим для определенности, что все функции в соотношении (1) непрерывны, и уравнение (1) имеет единственное решение для всякой непрерывной функции $f(y)$. Подставляя в левую часть (1) вместо $\varphi(x)$ функцию $C \sin \omega x$ и рассматривая значения правой части при $\omega \rightarrow \infty$, легко показать, что ядро рассмотренного типа может сгладить сколь угодно интенсивную, но достаточно «высокочастотную» составляющую искомой функции до произвольно малого уровня. Если правая часть известна точно, это не исключает возможности точного решения (в силу единственности). Однако наличие ошибок, сопровождающих регистрацию функции $f(y)$, исключает такую возможность. Действительно, пусть по условиям эксперимента можно контролировать близость факти-

чески зарегистрированной функции к точному образу $f(y)$ неизвестной функции $\varphi(x)$ лишь с точностью до ошибки ε :

$$\max_{y \in [c, d]} |\tilde{f}(y) - f(y)| \leq \varepsilon. \quad (2)$$

Тогда, если найдется некоторая функция $\varphi_1(x)$, образ которой $f_1(y)$ удовлетворяет неравенству (2), то всегда найдется и функция $\varphi_2(x) = \varphi_1(x) + C \sin \omega x$ с произвольной большой константой C , образ которой $f_2(y)$ также удовлетворяет неравенству (2).

3. Линейная обратная задача. Линейная обратная задача формулируется математически как задача решения операторного уравнения

$$A\varphi = f, \quad \varphi \in \Phi, \quad f \in F, \quad (3)$$

где A — линейный непрерывный оператор, действующий из линейного нормированного пространства Φ в нормированное пространство F . Задача решения уравнения (3) называется *корректно поставленной* относительно нормированных пространств (Φ, F) , коротче, *корректной*, если:

1) для всякого элемента $f \in F$ существует единственный элемент $\varphi_f \in \Phi$ (решение), удовлетворяющий уравнению (3);

2) для любого числа $\delta > 0$ существует такое число $\varepsilon(\delta) > 0$, что $\|\varphi_1 - \varphi_2\|_\Phi \leq \varepsilon(\delta)$ всякий раз, как только выполнено неравенство $\|f_1 - f_2\|_F \leq \delta$, где $\varphi_{1,2}$ и $f_{1,2}$ связаны уравнением (3).

Эти условия эквивалентны существованию ограниченного непрерывного обратного оператора $A^{-1}: F \rightarrow \Phi$. Если условия 1), 2) не выполнены, задача решения уравнения (3) называется *некорректно поставленной* относительно данной пары пространств (Φ, F) или, проще, *некорректной*. Иногда используется ослабленное условие корректности: задача решения уравнения (3) *корректна по Тихонову (условно корректна)*, если обратный оператор A^{-1} существует и непрерывен на множестве $F_0 \subset F$, являющемся образом компактного множества $\Phi_0 \subset \Phi$: $F_0 = A(\Phi_0)$.

По существу, в приведенных формулировках предполагается, что экспериментатор в состоянии контролировать отклонение фактически регистрируемого элемента \tilde{f} от его точного образа $f = A\varphi$ в метрике пространства F :

$$\|\tilde{f} - A\varphi\|_F \leq \delta. \quad (4)$$

Условие (4) фактически исчерпывает всю содержащуюся в экспериментальных данных информацию о решении φ , т. е. *обобщенным решением* уравнения (3) с неточными данными \tilde{f} можно считать множество

$$\Phi_{\tilde{f}, \delta} = \{\varphi \mid \|\tilde{f} - A\varphi\|_F \leq \delta\} \subset \Phi. \quad (5)$$

Без дополнительных условий это — наименьшее множество, содержащее истинное решение φ_0 , т. е. тот элемент пространства Φ , с которым получены данные \tilde{f} . Некорректность задачи (3)

эквивалентна неограниченности множества $\Phi_{\tilde{f},\delta}$ в норме $\|\cdot\|_{\Phi}$. Тем самым задача отыскания решения уравнения (3) в обычном смысле слова, т. е. как некоторого элемента $\tilde{\varphi}_{\tilde{f}} \in \Phi$, оказывается недоопределенной.

Доопределение задачи (3) производится различными способами путем указания дополнительных условий, которым должно удовлетворять неизвестное решение φ . Совокупность таких дополнительных условий называется *априорной информацией* и включается в формулировку обратной задачи (3).

Априорной информацией типа R (ограничения) будем называть точное указание класса Φ_0 допустимых решений:

$$R: \varphi \in \Phi_0 \subset \Phi;$$

при этом, вообще говоря, само множество Φ_0 не обязательно ограничено в метрике пространства Φ , например, Φ_0 — конечномерное подпространство пространства Φ .

Априорной информацией типа P (вероятностной) будем называть указание вероятностной меры, определенной на некоторой σ -алгебре \mathcal{A} подмножеств пространства Φ :

$$P: \text{Prob}\{\varphi \in \Phi'\} = \mu(\Phi'), \quad \Phi' \in \mathcal{A}.$$

Априорной информацией типа D (директивной) назовем указание правила предпочтения на множестве возможных решений:

$$D: \varphi_1 \succ \varphi_2 \quad (\varphi_1 \text{ предпочтительнее } \varphi_2), \text{ если } \Omega(\varphi_1) < \Omega(\varphi_2),$$

где $\Omega(\varphi)$ — некоторый непрерывный положительный функционал, определенный на плотном в пространстве Φ множестве Φ_1 , — регуляризирующий функционал. Практически в качестве регуляризирующего функционала используют некоторую норму $\|\cdot\|_1$ на $\Phi_1 \subset \Phi$. Частным случаем регуляризации является регуляризация в норме исходного пространства Φ : $\Omega(\varphi) = \|\varphi\|_{\Phi}$.

Регуляризацией в широком смысле называют любой способ использования априорной информации для однозначного выделения устойчивого решения — элемента $\tilde{\varphi}_{\tilde{f}} \in \Phi_{\tilde{f},\delta}$, непрерывно зависящего от \tilde{f} . Регуляризация в узком смысле (по Тихонову) основана на использовании некоторого регуляризирующего функционала в рамках директивного подхода (тип D). Регуляризация в узком смысле эквивалентна минимизации регуляризирующего функционала на обобщенном решении:

$$\tilde{\varphi}_{\tilde{f}} = \arg \inf_{\varphi \in \Phi_{\tilde{f},\delta}} \Omega(\varphi).$$

Вместо использования априорной информации можно ослабить требования к решению задачи (3). В самом деле, пусть решение задачи (3), т. е. определенный элемент $\varphi \in \Phi$, удовлетворяющий уравнению (3) с заданной точностью (4), должно использоваться для вычисления тех или иных характеристик ис-

следуемого объекта — функционалов $\alpha(\varphi)$ (напомним, что φ , по физическому смыслу, — описание состояния объекта). Практически наибольшее значение имеют линейные функционалы, т. е. аддитивные однородные функционалы, непрерывные в метрике пространства Φ . Множество всех линейных функционалов, определенных на пространстве Φ , образует сопряженное пространство Φ^* , норма в котором индуцируется нормой исходного пространства Φ :

$$\alpha \in \Phi^*: \|\alpha\|_{\Phi^*} = \sup_{\varphi \in \Phi} \frac{|\alpha(\varphi)|}{\|\varphi\|} < \infty.$$

Для любого множества $\Phi' \subset \Phi$ и функционала $\alpha \in \Phi^*$ определим (конечные или бесконечные) границы функционала α :

$$\inf_{\varphi \in \Phi'} \alpha(\varphi) = h_{\Phi'}^-(\alpha), \quad \sup_{\varphi \in \Phi'} \alpha(\varphi) = h_{\Phi'}^+(\alpha).$$

Пусть теперь Φ_1^* — некоторое множество функционалов. Обратная задача (3) слабо корректна относительно множества функционалов $\Phi_1^* \subset \Phi^*$, если относительный размах функционалов из Φ_1^* равномерно ограничен на обобщенном решении (5):

$$\sup_{\alpha \in \Phi_1^*} \left(h_{\Phi_{\bar{\gamma}, \delta}}^+(\alpha) - h_{\Phi_{\bar{\gamma}, \delta}}^-(\alpha) \right) / \|\alpha\| < \infty.$$

Слабая корректность означает, что функционалы из множества слабой корректности Φ_1^* могут быть вычислены с ошибкой, непрерывно зависящей от ошибки в исходных данных. Если множество корректности Φ_1^* плотно в Φ^* , слабо корректная задача корректна в обычном смысле. *Слабым решением* некорректной задачи (3) относительно множества функционалов Φ_1^* называется такой элемент $\bar{\varphi}$, что

$$\|\bar{\varphi}\| < \infty, \quad \alpha(\bar{\varphi}) = \left(h_{\Phi_{\bar{\gamma}, \delta}}^-(\alpha) + h_{\Phi_{\bar{\gamma}, \delta}}^+(\alpha) \right) / 2 \quad \forall \alpha \in \Phi_1^*.$$

Максимальное множество слабой корректности совпадает с множеством функционалов вида

$$\alpha(\varphi) = f^*(A\varphi) = (A^*f^*)(\varphi),$$

где $f^* \in F^*$ — произвольный линейный функционал над F , $A^*: F^* \rightarrow \Phi^*$ — оператор, сопряженный к оператору A . Без дополнительной информации типа R множество слабой корректности нельзя расширить до всего сопряженного пространства Φ^* .

4. Планирование эксперимента для обратных задач. Для обратной задачи (3) в постановке п. 3 условия эксперимента определяют вид оператора A (в той степени, в какой это допускается физической природой явлений), а также по существу метрику в пространстве наблюдений F . Смысл оптимизации экспериментальных условий — планирования эксперимента для обратной за-

дачи (3) — состоит в такой модификации этой задачи (без изменения исходного пространства Φ), которая допускала бы получение большей информации об объекте исследования. Этого можно достичь, в частности, после включения обратной задачи (3) в надлежащим образом обобщенную схему регрессионного эксперимента (см. гл. 1, 2). При этом возникает глубокая связь между методами регуляризации задачи (3) и смещенными оценками (гл. 1).

Принимая естественное (в рамках линейных задач) условие аддитивности ошибок эксперимента

$$\tilde{f} = f + \xi,$$

и считая помеху ξ случайным процессом, получаем, что вероятностное распределение процесса ξ определяет распределение вероятностей вектора наблюдений \tilde{f} , управляемое состоянием объекта φ . Эта точка зрения является исходной для применения методов математической статистики к решению обратных задач рассматриваемого типа. В действительности, распределение вероятностей процесса ξ (случайного шума) порождает некоторым каноническим образом метрику в пространстве наблюдений F .

5. Случайный процесс второго порядка, пространство сдвигов и пространство линейных статистик. С абстрактной точки зрения с каждым случайным процессом, как с любым вероятностным объектом, связано вероятностное пространство (Ω, \mathcal{A}, P) , позволяющее указать вероятности некоторого класса событий, индуцированных данным процессом. Этим событиям (измеримым событиям) соответствуют подмножества $\Omega' \subset \Omega$, принадлежащие σ -алгебре \mathcal{A} подмножеств множества Ω . Для любого измеримого события Ω' определена вероятность $P(\Omega')$. Всякая измеримая функция $u(\omega)$ на вероятностном пространстве (Ω, \mathcal{A}, P) называется *случайной величиной*. Выделим класс случайных величин с конечным математическим ожиданием:

$$U = \left\{ u(\omega) \mid Eu = \int u(\omega) dP < \infty \right\}.$$

По построению класс U — линейное множество (векторное пространство), так как любая конечная линейная комбинация элементов из U принадлежит U . Будем считать, что вся информация о реализациях процесса заключена в значениях всевозможных случайных величин, индуцированных этим процессом — статистик процесса, — образующих пространство U .

В задачах измерения, когда рассматриваемый случайный процесс представляет шум измерительного устройства, интерес представляют не сами реализации процесса или, что то же, статистики процесса, а изменения статистик (как случайных величин) при поступлении полезного сигнала. Всякое изменение случайного процесса под воздействием внешних условий может быть описано некоторым измеримым отображением $T: \Omega \rightarrow \Omega$, сохраняющим структуру вероятностного пространства.

Класс измеримых отображений $\{T_x, x \in \mathcal{X}\}$ назовем *классом векторных сдвигов*, согласованным с векторным пространством \mathcal{X} , если он образует группу, изоморфную группе векторных сдвигов пространства \mathcal{X} , в частности

$$T_{x_1} T_{x_2} = T_{x_1 + x_2}, \quad x_1, x_2, x_1 + x_2 \in \mathcal{X}.$$

Статистика u на сдвиге x — это случайная величина $u_x(\omega) = u(T_x \omega)$, и математическое ожидание определено для любой измеримой статистики на любом векторном сдвиге:

$$Eu_x = \int u(T_x \omega) dP = \int u(\omega) dP \circ T_x^{-1} = m_u(x). \quad (6)$$

Случайная величина $u(\omega)$ называется *линейной статистикой* относительно класса векторных сдвигов \mathcal{X} , если:

- 1) для любого $x \in \mathcal{X}$ выполнено $m_u(x) < \infty$,
- 2) $m_u(\cdot)$ — линейный функционал над векторным пространством \mathcal{X} .

Все линейные статистики образуют векторное пространство U_1 . Говорят, что билинейный функционал (6) *приводит пространства \mathcal{X} и U_1 в двойственность*, т. е. они оказываются *сопряженными пространствами* относительно этого функционала. В действительности может оказаться, что статистик из U_1 недостаточно для разделения точек из \mathcal{X} .

Пример 1. Сдвиги одномерной случайной величины $y = \theta_1 + \theta_2 + \varepsilon$ не разделяются статистиками вида $u = \alpha y$, если под сдвигом понимать вектор $(\theta_1, \theta_2) \in \mathbb{R}^2$. отождествляя «ненаблюдаемые» сдвиги $\theta_1 - \theta_2 = 0$, получаем класс сдвигов $y = \theta + \varepsilon$, разделяемый статистиками указанного вида.

Пусть $\mathcal{X}_0 = \{x | m_u(x) = 0, u \in U\}$ — подпространство ненаблюдаемых сдвигов. отождествляя точки из \mathcal{X} , отличающиеся на ненаблюдаемый сдвиг $x_0 \in \mathcal{X}_0$ (т. е. рассматривая соответствующие классы эквивалентности), получаем фактор-пространство $\mathcal{X}_1 = \mathcal{X} / \mathcal{X}_0$ — пространство наблюдаемых сдвигов, точки которого разделяются статистиками из U_1 .

Рассматривая далее только наблюдаемые сдвиги, можно считать, что каждая линейная статистика представима в виде

$$u(T_x \omega) = m_u(x) + u(\omega).$$

Кроме того, без ограничения общности будем считать случайный процесс ξ центрированным относительно класса сдвигов, т. е. для всех линейных статистик

$$Eu = \int u(\omega) dP = 0, \quad u \in U_1.$$

Не все линейные статистики из пространства U_1 подходят для наблюдения сдвигов, так как среди этих статистик могут оказаться статистики с бесконечной дисперсией. Выделим линейные статистики с конечной дисперсией:

$$\{u | Eu^2 < \infty, u \in U_1\} = U_2.$$

Так как $Eu_x^2 = Eu^2 + m_u(x)^2$, множество U_2 переходит в себя под действием сдвигов из \mathcal{X} . Случайный процесс ξ называется *случайным процессом второго порядка*, если существует линейная статистика с конечной дисперсией, т. е. множество U_2 не пусто. Случайный процесс называется *невырожденным* относительно векторного пространства сдвигов \mathcal{X}_1 , если не существует нетривиальных линейных статистик с нулевой дисперсией, т. е. из $Eu^2 = 0$ следует равенство $m_u(x) = 0$ для всех $x \in \mathcal{X}_1$. Для невырожденного процесса пространство U_2 оказывается гильбертовым пространством статистик H_u со скалярным произведением

$$(u, v) = Euv.$$

Если процесс вырожден, гильбертово пространство статистик есть фактор-пространство относительно подпространства линейных статистик с нулевой дисперсией:

$$H_u = U_2/U_0, \quad U_0 = \{u \mid Eu^2 = 0, u \in U_1\}.$$

Рассмотрим теперь наблюдаемые сдвиги, ограниченные относительно нормы

$$\|x\|^2 = \sup_{u \in H_u} \frac{|m_u(x)|^2}{(u, u)} < \infty. \quad (7)$$

Обозначим множество таких регулярных сдвигов через \mathcal{X}_2 . Фиксируем некоторый сдвиг $x \in \mathcal{X}_2$; тогда $m_u(x)$ — ограниченный линейный функционал над H_u , и по теореме Рисса он допускает представление

$$m_u(x) = (u, u_x) \quad \forall u \in H_u,$$

при этом из определения (7) следует

$$\|x\|^2 = (u_x, u_x) \equiv [x, x], \quad (8)$$

т. е. множество \mathcal{X}_2 с метрикой (8) становится гильбертовым пространством регулярных сдвигов H_x .

Оператор, сопоставляющий каждому $x \in H_x$ по указанному выше правилу линейную статистику с конечной дисперсией $u_x \in H_u$, называется *обратным корреляционным оператором* K^{-1} : $H_x \rightarrow H_u$. Оператор K^{-1} определяет изометрическое отображение взаимно сопряженных гильбертовых пространств H_x и H_u . Обратное отображение K : $H_u \rightarrow H_x$, определяемое как $x_u = Ku$: $(u, v) = m_v(x_u)$ для всех $v \in H_u$, называется *корреляционным оператором процесса*. Оператор K^{-1} каждому регулярному сдвигу x сопоставляет оптимальную линейную статистику $u_x = K^{-1}x$ для оценивания сдвига вдоль направления x , т. е. параметра β в модели $x_\beta = \beta x$, при этом дисперсия (наименьшая в классе линейных несмещенных оценок) оценки $\hat{\beta}$ параметра β есть

$$D(\hat{\beta}) = (u_x, u_x)^{-1} = [x, x]^{-1}.$$

Отметим, что описание случайного процесса в терминах пространств H_u и H_x есть внешнее описание процесса, выделяющее его «шумовые» свойства, т. е. выделяющее регулярные сдвиги и соответствующие им оптимальные линейные статистики для наблюдения этих сдвигов. Если случайный процесс ξ задан непосредственно своим распределением (вероятностной мерой) в банаховом пространстве R своих реализаций, то при некоторых дополнительных условиях корреляционный оператор может быть определен интегралом по этой мере:

$$x_u = Ku = E\xi u(\xi) = \int_R xu(x) \mu(dx), \quad u \in R^*,$$

u — линейный функционал, заданный на реализациях процесса, т. е. как оператор из R^* в R . Сдвиг процесса определяется при этом непосредственно в пространстве R :

$$\xi_x = x + \xi.$$

В зависимости от свойств оператора K рамки одного из пары сопряженных пространств (R, R^*) могут оказаться либо слишком узкими, либо слишком широкими для «вмещения» соответственно канонических пространств H_x и H_u . Они в этом случае строятся как сужение или пополнение одного из пространств сопряженной пары по соответствующему скалярному произведению. Если в пространстве реализаций существует ядро корреляционного оператора как ковариационная функция локальных значений процесса:

$$K(s, t) = E\xi(s)\xi(t), \quad s, t \in T,$$

гильбертово пространство регулярных сдвигов строится как гильбертово пространство с воспроизводящим ядром K .

Пример 2. Вырожденный случайный процесс в пространстве непрерывных функций на компакте

$$\xi_x(t) = x(t) + \xi(t), \quad t \in T,$$

с непосредственно заданным ядром корреляционного оператора вида

$$K(s, t) = \varphi(s)\varphi(t), \quad s, t \in T.$$

Предполагается, как обычно, что $E\xi(t) = 0$. Пространство регулярных сдвигов H_x есть множество функций, представимых через ядро:

$$x(t) = \sum K(t, s_i) a_i = a\varphi(t),$$

т. е. одномерное подпространство пространства C_T . Действительно, любой сдвиг $x \notin H_x$ может быть восстановлен точно по единственной реализации процесса, т. е. не является ограниченным в норме (7). Пространство линейных статистик H_u состоит из одномерного семейства классов эквивалентности всевозможных

борелевских мер

$$\tilde{u}_c = \{u \mid \int \varphi(t) du(t) = c\}.$$

При этом, например, статистикой может служить локальное значение производной настолько высокого порядка, насколько это допускают индивидуальные дифференциальные свойства функции $\varphi(t)$. Итак, пространство линейных статистик, будучи по существу одномерным, состоит из элементов, не принадлежащих пространству C_T^* , сопряженному к исходному пространству реализаций C_T .

Случайный процесс называется *гауссовским*, если случайные величины, порожденные линейными статистиками $u \in H_u$, являются гауссовскими случайными величинами. Для гауссовского процесса метрика, задаваемая квадратичной формой (8) в пространстве регулярных сдвигов, представляет предельный случай информационной метрики Фишера — Махаланобиса и может быть получена предельным переходом по конечномерным распределениям процесса.

6. Обратная задача как регрессионный эксперимент. Используя аппарат предыдущего пункта, можно сформулировать обратную задачу (3) со случайным вектором наблюдений как некоторый регрессионный эксперимент над изучаемым объектом. А именно, запишем уравнение (3) в виде

$$\tilde{f} = A\varphi + \xi,$$

попимая эту запись следующим образом:

1) Вектор наблюдений \tilde{f} является случайным процессом, порожденным сдвигами стандартного случайного процесса второго порядка ξ (шума) с нулевым математическим ожиданием и корреляционным оператором K .

2) Оператор A отображает пространство состояний Φ (полное нормированное пространство) изучаемого объекта в гильбертово пространство $H_x[K]$ регулярных сдвигов процесса ξ .

Случайный процесс второго порядка каноническим образом порождает два изометричных гильбертовых пространства — пространство H_x регулярных сдвигов и пространство H_u линейных статистик с конечной дисперсией, сопряженных друг к другу относительно билинейного функционала (6). Линейная статистика $u \in H_u$ называется *несмещенной оценкой* линейного функционала $\alpha(\varphi)$ ($\alpha \in \Phi^*$), если для любого $\varphi \in \Phi$

$$Eu_{A\varphi} = m_u(A\varphi) = \alpha(\varphi).$$

Оператор A^* : $H_u \rightarrow \Phi^*$, сопоставляющий каждой линейной статистике из H_u тот функционал из сопряженного пространства Φ^* , несмещенной оценкой которого эта статистика является, называется *оператором, сопряженным* к оператору A . Множество функционалов, допускающих несмещенную оценку с конечной

дисперсией, совпадает с множеством значений сопряженного оператора $A^*(H_u) \subset \Phi^*$.

7. Статистически корректные задачи, наилучшая линейная несмещенная оценка функционала. Если множество функционалов, допускающих оценку, совпадает со всем пространством Φ^* , т. е. любой ограниченный линейный функционал допускает несмещенную оценку с конечной дисперсией, задача называется *статистически корректной*. Условие статистической корректности можно записать как условие разрешимости уравнения

$$A^*u = \alpha. \quad (9)$$

Для разрешимости уравнения (9) необходимо, чтобы область значений оператора A^* совпадала со всем пространством Φ^* :

$$A^*(H_u) = \Phi^*.$$

Область определения оператора A^* есть, очевидно, все пространство H_u . Если уравнение (9) имеет единственное решение при любой правой части, то из полноты пространств H_u и Φ^* следует ограниченность обратного оператора $(A^*)^{-1}$, при этом

$$u_\alpha = (A^*)^{-1}\alpha$$

есть единственная несмещенная оценка функционала α , имеющая конечную дисперсию.

Если решение уравнения (9) не единственно, то наилучшей линейной несмещенной оценкой функционала α будет решение этого уравнения — статистика \bar{u} , удовлетворяющая дополнительному условию минимальности дисперсии:

$$(\bar{u}, \bar{u}) = \inf_{u \in H_u, A^*u = \alpha} (u, u).$$

Пусть $\bar{H} = \{u | u = K^{-1}A\varphi, \varphi \in \Phi\}$ — подпространство пространства статистик, порожденное «переносом» в него пространства Φ . Необходимым и достаточным условием минимальности дисперсии является включение $\bar{u} \in \bar{H}$, т. е. существование такого элемента $\bar{\varphi} \in \Phi$, что $\bar{u} = K^{-1}A\bar{\varphi}$. Условие (9) при этом принимает вид

$$[A\bar{\varphi}, A\bar{\varphi}] = \alpha(\bar{\varphi}).$$

При фиксированном элементе $\bar{\varphi}$ левая часть написанного равенства — функционал над Φ , т. е. элемент $\alpha_{\bar{\varphi}} \in \Phi^*$, однозначно определяемый элементом $\bar{\varphi}$. Вводя оператор G , осуществляющий указанное соответствие, получаем уравнение для определения элемента $\bar{\varphi}$ по заданному функционалу α :

$$G\bar{\varphi} = \alpha.$$

При описанной ситуации линейный оператор G действует из Φ в пространство Φ^* таким образом, что:

- 1) область его определения есть все пространство Φ ;
- 2) область его значений есть все пространство Φ^* ;
- 3) отображение $G: \Phi \rightarrow \Phi^*$ взаимно однозначно.

Поэтому существует органиченный обратный оператор $G^{-1}: \Phi^* \rightarrow \Phi$, т. е. искомая наилучшая несмещенная линейная оценка функционала есть статистика

$$\bar{u} = K^{-1}AG^{-1}\alpha. \quad (10)$$

Дисперсия наилучшей несмещенной оценки функционала выражается в виде квадратичной формы от этого функционала

$$(\bar{u}, \bar{u}) = \alpha(G^{-1}\alpha).$$

Оператор G представим в виде произведения $G = A^*K^{-1}A$, поэтому, в частности, он вполне непрерывен, если вполне непрерывен оператор A . Из существования непрерывного обратного оператора G^{-1} вытекает, что необходимым условием статистической корректности обратной задачи для вполне непрерывного оператора A является конечная размерность пространства состояний Φ .

8. Слабое и сильное решения статистически корректной задачи, оценки метода наименьших квадратов (МНК). Представление дисперсии наилучшей несмещенной оценки показывает, что оператор G^{-1} играет роль корреляционного оператора некоторого случайного процесса с реализациями, лежащими в пространстве Φ . Случайный элемент $\tilde{\varphi}$ пространства Φ называется *слабым решением статистически корректной обратной задачи*, если для любого функционала $\alpha \in \Phi^*$ случайная величина $\alpha(\tilde{\varphi})$ есть наилучшая линейная несмещенная оценка этого функционала. При тех же условиях элемент $\tilde{\varphi}$ называется *сильным решением порядка p* , если

$$E\|\tilde{\varphi}\|^p < \infty,$$

Слабое решение обратной задачи может быть легко построено в явном виде, если пространство Φ есть сепарабельное пространство с базисом. Более того, предположим, что $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n, \dots\}$ — полная система линейно независимых элементов пространства Φ — является безусловным базисом этого пространства. Это значит, что ряд

$$\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i(\varphi) \alpha(\varphi_i),$$

где $\{\alpha_i\}$ — биортогональная система элементов сопряженного пространства Φ^* , сходится абсолютно для любых $\alpha \in \Phi^*$, $\varphi \in \Phi$. Если при этом Φ^* также сепарабельно, то система функционалов $\{\alpha_i\}$ будет безусловным базисом пространства Φ^* , т. е. любой элемент $\alpha \in \Phi^*$ может быть единственным образом представлен в виде сходящегося ряда

$$\alpha = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \alpha_i, \quad c_i = \alpha(\varphi_i), \quad i = 1, \dots$$

Пусть, далее, $\{u_i\}$ — система наилучших несмещенных оценок базисных функционалов $\{\alpha_i\}$:

$$u_i = K^{-1}AG^{-1}\alpha_i.$$

Тогда слабым решением обратной задачи будет случайный процесс

$$\tilde{\varphi} = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{u}_i \varphi_i,$$

где $\{\tilde{u}_i\}$ — случайные величины, соответствующие статистикам $\{u_i\}$. Можно считать, что выборочное значение случайной величины \tilde{u}_i получается при вычислении линейной статистики u_i от реализации процесса $\tilde{f} = A\varphi + \xi$. Действительно, для любого функционала $\alpha \in \Phi^*$ значение $\alpha(\tilde{\varphi})$ на реализациях процесса $\tilde{\varphi}$ является несмещенной оценкой с минимальной дисперсией:

$$E\alpha(\tilde{\varphi}) = \sum_i \alpha(\varphi_i) \alpha_i(\varphi) = \alpha(\varphi),$$

$$D\alpha(\tilde{\varphi}) = \sum_{i,k} \alpha(\varphi_i) \alpha(\varphi_k) \alpha_k(G^{-1}\alpha_i) = \alpha(G^{-1}\alpha),$$

при этом для любых $\alpha, \beta \in \Phi^*$

$$\text{cov}(\alpha(\tilde{\varphi}), \beta(\tilde{\varphi})) = \alpha(G^{-1}\beta) = \beta(G^{-1}\alpha),$$

т. е. G^{-1} — корреляционный оператор процесса $\tilde{\varphi}$. Вопрос о существовании слабого решения в пространствах, не обладающих безусловным базисом, например C и L_1 , требует специального исследования.

Для того чтобы построенное выше слабое решение было сильным решением конечного порядка p , нужны дополнительные условия. Так, найденный выше процесс $\tilde{\varphi}$ будет сильным решением второго порядка, если сходятся ряды

$$\sum \|\varphi_i\|^2, \quad \sum |\alpha_i(\varphi)|^2, \quad \sum \alpha_i(G^{-1}\alpha_i).$$

В конечномерном пространстве Φ вопрос о сходимости рядов не возникает, и там слабое решение всегда будет сильным решением второго порядка. В этом случае процесс (случайный вектор) $\tilde{\varphi}$ называется *оценкой метода наименьших квадратов* (оценкой МНК) (ср. гл. 1), так как он может быть найден формальной минимизацией по параметрам $\theta_1, \dots, \theta_n$ квадратичной формы

$$\left[\tilde{f} - \sum_{i=1}^n \theta_i A\varphi_i, \tilde{f} - \sum_{k=1}^n \theta_k A\varphi_k \right].$$

Получаемые при этом оценки $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_n$ также называются *оценками МНК*, а решение $\tilde{\varphi}$ имеет вид

$$\tilde{\varphi} = \sum_{i=1}^n \hat{\theta}_i \varphi_i.$$

Возникающая при этом матрица с элементами

$$M_{ik} = (G\varphi_i)(\varphi_k) = [\varphi_i, \varphi_k], \quad i, k = 1, \dots, n,$$

называется *матрицей системы нормальных уравнений МНК* или *информационной матрицей МНК* (ср. гл. 2).

9. Статистически некорректные задачи, наилучшая линейная смещенная оценка функционала. В общем случае не все линейные функционалы из пространства Φ^* допускают несмещенное оценивание. В этом случае обратная задача называется *статистически некорректной*. Так, если оператор A вполне непрерывен, а пространство Φ бесконечномерно, обратная задача не может быть статистически корректной. В этой ситуации для оценивания функционалов, не допускающих несмещенного оценивания, используются смещенные оценки. Линейные смещенные оценки могут иметь ограниченное смещение только при дополнительной априорной информации типа R :

$$\varphi \in \Phi_0 \subset \Phi,$$

где Φ_0 — ограниченное множество в метрике пространства Φ .

Пусть множество допустимых решений Φ_0 , кроме того, симметрично относительно нулевого элемента. Определим *калибровочный функционал* множества Φ_0 :

$$\Omega(\alpha) = \sup_{\varphi \in \Phi_0} |\alpha(\varphi)|^2, \quad \alpha \in \Phi^*. \quad (11)$$

Он определен на всех элементах сопряженного пространства функционалов, положителен, однороден степени 2 и ограничен в силу ограниченности множества Φ_0 . Предположим, что множество Φ_0 является тотальным для Φ^* , т. е. соотношение $\Omega(\alpha) = 0$ может выполняться только для нулевого элемента $\alpha = 0$ (нуль пространства Φ^*). Другими словами, норма

$$\|\alpha\|_1 = \Omega(\alpha)^{1/2} = \sup_{\varphi \in \Phi_0} |\alpha(\varphi)|$$

эквивалентна исходной норме в пространстве Φ^* .

Для функционала $\alpha \in \Phi^*$ наилучшая линейная оценка (линейная статистика) $u_\alpha \in H_u$ определяется из условия

$$u_\alpha = \arg \inf_{u \in H_u} \sup_{\varphi \in \Phi_0} E |u_{A\varphi} - \alpha(\varphi)|^2 = \\ = \arg \min_{u \in H_u} \left\{ \sup_{\varphi \in \Phi_0} |m_u(A\varphi) - \alpha(\varphi)|^2 + (u, u) \right\}, \quad (12)$$

при этом нижняя грань достигается в силу полноты пространства статистик H_u . Множество Φ_0 называется *невырожденным эллипсоидом* пространства Φ , если его калибровочный функционал (11) эквивалентен норме и может быть представлен в виде квадратичной формы с помощью ограниченного линейного оператора J :

$$\Omega(\alpha) = \alpha(J\alpha), \quad J: \Phi^* \rightarrow \Phi, \quad (13)$$

Оператор J , определенный согласно (13), называется *калибровочным оператором*. Порожденная им норма является гильбертовой и соответствует скалярному произведению

$$[\alpha, \beta]_J = \alpha(J\beta) = \beta(J\alpha). \quad (14)$$

С помощью калибровочного оператора условие минимума (12) может быть записано в виде

$$m_v(AJA^*u) + (u, v) = m_v(AJ\alpha),$$

которое должно выполняться при любом $v \in H_u$. Отсюда, используя общую форму линейного функционала в пространстве H_u , получаем уравнение для наилучшей линейной оценки (статистики)

$$K^{-1}AJA^*u + u = K^{-1}AJ\alpha. \quad (15)$$

Левая часть уравнения (15) содержит оператор $H_u \rightarrow H_u$, определенный на всем пространстве H_u . Этот оператор ограничен и множество его значений есть все пространство H_u , кроме того, решение уравнения (15) единственно; следовательно, указанный оператор имеет ограниченный обратный

$$u_\alpha = (AJA^* + K)^{-1}AJ\alpha. \quad (16)$$

Линейная статистика u_α , определенная соотношением (16) для любого функционала $\alpha \in \Phi^*$, и есть искомая наилучшая линейная смещенная оценка функционала α .

Заметим, что при построении оценки (16) может быть использован, вообще говоря, любой калибровочный оператор с указанными выше свойствами. В частности, в рамках априорной информации типа P роль калибровочного оператора играет корреляционный оператор K_u априорного распределения $\mu(\cdot)$ в пространстве решений.

10. Информационный оператор и канонический базис регрессионного эксперимента. Структура регрессионного эксперимента (обратной задачи) при наличии априорной информации, задаваемой с помощью калибровочного оператора J , может быть представлена следующим образом:

$$\begin{array}{ccc} \Phi & \xrightarrow{A} & H_x \\ J \uparrow & & \downarrow K^{-1} \\ \Phi^* & \xleftarrow{A^*} & H_u \end{array} \quad (17)$$

стрелками, как обычно, указано направление действия соответствующих операторов. Как видно из схемы (17), ни один из основных операторов задачи не действует «внутри» одного пространства, т. е. ни один из этих операторов не может иметь собственных элементов. Однако система всех четырех обозначенных на схеме операторов образует замкнутый цикл, т. е. их произведение, взятое в надлежащем порядке, действует «внутри» каждого из пространств, приведенных на схеме, и, следовательно,

но, может иметь собственные элементы в соответствующем пространстве.

Рассмотрим произведение, действующее в исходном пространстве состояний объекта:

$$JA^*K^{-1}A = JG: \Phi \rightarrow \Phi,$$

где $G = A^*K^{-1}A: \Phi \rightarrow \Phi^*$ — введенный ранее в п. 8 метрический оператор, и сформулируем проблему собственных значений:

$$JG\varphi_k = \lambda_k\varphi_k. \quad (18)$$

Если G — вполне непрерывный оператор, то проблема (18) имеет по крайней мере одно решение φ_1 , принадлежащее самому пространству Φ (а не его пополнению по гильбертовой норме $\|\varphi\|_H = |(G\varphi)(\varphi)|^{1/2}$, как можно было бы ожидать из формальных соображений). Соответствующее собственное значение положительно:

$$\lambda_1 = \sup \frac{(G\varphi)(JG\varphi)}{(G\varphi)(\varphi)} > 0.$$

Далее, множество собственных значений не более чем счетно:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \dots \geq 0,$$

и, если их число бесконечно, имеет нуль точкой сгущения $\lambda_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$). Размерность инвариантного подпространства, соответствующего любому отличному от нуля собственному значению, конечна. В дальнейшем для простоты записи будет предполагаться, что эти подпространства одномерны, т. е. имеется с точностью до нормировки всего один вектор φ_k , удовлетворяющий (18) при данном значении λ_k . Обозначим

$$G\varphi_k = \alpha_k \in \Phi^*.$$

Тогда системы $\{\varphi_k\}$ и $\{\alpha_k\}$ — биортогональны, более того, они обладают «двойной» ортогональностью, т. е., во-первых,

$$\alpha_k(\varphi_l) = 0, \quad \lambda_k \neq \lambda_l,$$

во-вторых, при нормировке $\alpha_k(\varphi_k) = 1$ ($k = 1, 2, \dots$)

$$\alpha_k(J\alpha_l) = \lambda_k\alpha_k(\varphi_k) = \begin{cases} 0, & \lambda_k \neq \lambda_l, \\ \lambda_k, & \lambda_k = \lambda_l. \end{cases}$$

Оператор JG называется *информационным оператором регрессионного эксперимента* (обратной задачи), а система элементов $\{\varphi_k\}$ — *каноническим базисом* пространства Φ . Перенос системы $\{\varphi_k\}$ вдоль цикла, обозначенного на схеме (17), порождает канонический базис в каждом из остальных пространств цикла. В частности, система статистик

$$u_k = K^{-1}A\varphi_k, \quad k = 1, \dots,$$

Есть система ортогональных статистик с единичной дисперсией:

$$(u_k, u_l) = \begin{cases} 1, & k = l, \\ 0, & k \neq l. \end{cases}$$

Эта система полна среди статистик, представимых в виде

$$\bar{u} = K^{-1}AJA^*u, \quad u \in H_u.$$

Наилучшая статистика для оценивания функционала, являющаяся решением уравнения (15), может быть представлена в виде разложения по каноническим элементам:

$$u_\alpha = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_k}{1 + \lambda_k} \alpha(\varphi_k) u_k, \quad (19)$$

т. е. статистика $\lambda_k(1 + \lambda_k)^{-1}u_k$ есть наилучшая оценка функционала α_k ; при этом различные канонические функционалы оцениваются ортогональными (некоррелированными) статистиками. Разложение (19) приводит к форме слабого регуляризованного решения статистически некорректной задачи:

$$\tilde{\varphi} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_k}{1 + \lambda_k} \varphi_k \tilde{u}_k, \quad (20)$$

где \tilde{u}_k — случайная величина, порожденная линейной статистикой u_k на реализациях процесса $A\varphi + \xi$. Случайный элемент $\tilde{\varphi}$ характеризуется тем, что значения $\alpha(\tilde{\varphi})$ любого функционала $\alpha \in \Phi^*$ на реализациях этого процесса эквивалентны по смещению и дисперсии наилучшей статистике для оценивания этого же функционала.

С информационной точки зрения решение (20) интерпретируется следующим образом: для неизвестного состояния объекта принимается представление

$$\varphi = \sum_{k=1}^{\infty} \theta_k \varphi_k,$$

где неизвестные параметры θ_k оцениваются на основе «наблюдений»

$$y_k = \theta_k + \varepsilon_k,$$

где ε_k — некоррелированные случайные ошибки с единичной дисперсией, а параметры θ_k независимо подчинены априорным ограничениям $|\hat{\theta}_k|^2 \leq \lambda_k$ (наилучшая смещенная оценка в этом случае есть $\hat{\theta}_k = \lambda_k(1 + \lambda_k)^{-1}y_k$, что совпадает по форме с (20)). Таким образом, величина $\lambda_k^{-1/2}$ есть отношение априорного диапазона изменения параметра θ_k к среднеквадратичной ошибке его измерения. Следовательно, в каноническом представлении регрессионный эксперимент (с фиксированным калибровочным оператором J) распадается на элементарные независимые экспе-

рименты, информативность которых измеряется величинами соответствующих собственных чисел. В этом смысле говорят, что решения проблемы (18) описывают структуру полезной информации, получаемой в эксперименте. В частности, если шум представляет гауссовский случайный процесс, а калибровочный оператор интерпретируется как корреляционный оператор гауссовского распределения в пространстве состояний Φ , количество информации в смысле Шеннона, содержащееся в наблюдениях относительно состояния объекта, выражается формулой

$$I_s = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \log(1 + \lambda_k), \quad (21)$$

если ряд в правой части сходится, и $I_s = \infty$, если этот ряд расходится.

З а м е ч а н и е. Если разложение (20) содержит лишь конечное число членов, оно эквивалентно гребневой оценке (см. гл. 1) неизвестного (конечномерного) элемента φ , построенной по калибровочному оператору J . Таким образом, регуляризованное решение статистически некорректной обратной задачи оказывается эквивалентным оптимальной смещенной оценке искомого элемента.

Л и т е р а т у р а к § 1: [28, 40, 52, 89—91, 171].

§ 2. Планирование экспериментов для некоторых классов обратных задач

1. Класс экспериментов, область планирования, план. В § 1 обратная задача (3) сведена к некоторому фиксированному регрессионному эксперименту. В задаче планирования нужно выбрать наилучший в определенном смысле эксперимент из некоторого класса экспериментов. Заметим, что исчерпывающим описанием собственно эксперимента, безотносительно к возможной калибровке решений, является «метрический» оператор $G = A * K^{-1} A$. Поэтому описание класса экспериментов есть по существу описание класса операторов $\mathcal{G} = \{G\}$, совместимых с реальными ограничениями на выбор условий измерения.

Для выяснения структуры класса метрических операторов \mathcal{G} уточним схему (17) регрессионного эксперимента. А именно, в схеме (17) оператор A непосредственно осуществлял преобразование состояния объекта в некоторый регулярный сдвиг регистрируемого процесса. В действительности это преобразование состоит из двух этапов:

$$\begin{array}{ccccc}
 \Phi & \xrightarrow{A_1} & \Psi & \xrightarrow{A_2} & H_x \\
 J \uparrow & & & & \downarrow K^{-1} \\
 \Phi^* & \xleftarrow{A_1^*} & \Psi^* & \xleftarrow{A_2^*} & H_u
 \end{array} \quad (22)$$

Здесь оператор $A_1: \Phi \rightarrow \Psi$ отображает пространство состояний объекта на пространство доступных для измерения данных, а далее уже оператор A_2 переводит эти данные в сдвиг регистрируемого процесса. Оператор A_1 соответствует физическому механизму прямой задачи и, вообще говоря, задан. Оператор A_2 «конструируется» в процессе подготовки эксперимента за счет выбора подходящих условий измерения, при этом оператор A_2 следует рассматривать совместно с обратным корреляционным оператором процесса регистрации, так как обычно указывается некоторая специальная процедура, одновременно задающая A_2 и K^{-1} . Суть этой процедуры состоит в следующем.

В пространстве Ψ^* , сопряженном к пространству Ψ , фиксируется некоторое множество функционалов \mathcal{X} . Каждый данный функционал $X_i \in \mathcal{X}$ задает некоторый элементарный «одноточечный» эксперимент

$$y_i = X_i(\psi) + \varepsilon_i,$$

где ε_i — случайная ошибка с нулевым средним и конечной дисперсией $E\varepsilon_i^2 = \sigma_i^2$. Класс \mathcal{G} метрических операторов порождается всевозможными конечными наборами элементарных экспериментов с ограниченной суммарной точностью

$$\sum_{j=1}^N \sigma_j^2 = \sum_{j=1}^N w_j = \text{const}. \quad (23)$$

Каждому такому набору элементарных экспериментов соответствует метрический оператор вида

$$G(\xi) = \sum_{j=1}^N w_j X_j(\cdot) X_j: \Psi \rightarrow \Psi^*, \quad (24)$$

где сумма распространена на функционалы и веса набора $\xi = \{X_1, \dots, X_N; w_1, \dots, w_N\}$. Замыкание класса операторов вида (24), соответствующих всем конечным распределениям ξ с условием нормировки (23) в операторной норме $[\Psi \rightarrow \Psi^*]$, и есть искомый класс метрических операторов. Операторы этого класса допускают представление в виде интеграла, понимаемого как предел соответствующих интегральных сумм (24):

$$G(\xi) = \int_{\mathcal{X}} X(\cdot) X d\xi(X), \quad \xi(\mathcal{X}) = W,$$

где $\xi(\cdot)$ — положительная σ -конечная мера, определенная на σ -алгебре всех борелевских подмножеств \mathcal{X} . Мера ξ называется *планом эксперимента*, множество \mathcal{X} — *областью планирования*. В отличие от конечномерных параметрических задач планирования эксперимента, оптимальный план в непараметрических случаях зависит от абсолютного веса (суммарной точности) $W = \xi(\mathcal{X})$.

Пример 3 (оптимальный опрос параллельных каналов). Пусть y_1, \dots, y_n, \dots — последовательность независимых случайных величин, представимых в виде попарных сумм:

$$y_n = x_n + \varepsilon_n, \quad n = 1, \dots,$$

где x_n и ε_n в свою очередь независимы и

$$E\varepsilon_n = Ex_n = 0, \quad Ex_n^2 = d_n, \quad E\varepsilon_n^2 = \sigma_n^2 = w_n^{-1}.$$

Интерпретация такова: x_n представляет «полезный сигнал» в n -м из параллельных каналов, ε_n — ошибка измерения сигнала x_n на выходе канала. В течение тактового периода T сигналы $\{x_n\}$ фиксированы и каналы опрашиваются последовательно. Предполагая, что, точность измерения выходного сигнала в n -м канале пропорциональна времени, затраченному на опрос этого канала:

$$\sigma_n^{-2} = w_n \sim T_n, \quad \sum_n T_n = T;$$

приходим к задаче оптимального распределения времен опроса $\{T_n\}$, или, что то же, весов $\{w_n\}$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} w_n = W, \quad w_n \geq 0, \quad n = 1,$$

В известном смысле данная задача планирования эксперимента обратна задаче оптимального распределения энергии сигналов $\{d_n\}$ $\left(\sum_{n=1}^{\infty} d_n = D \right)$ между каналами при фиксированных дисперсиях ошибок $\{\sigma_n^2\}$ с целью достижения информационной пропускной способности системы каналов, рассматривавшейся в [47]. В задаче планирования, наоборот, априорные дисперсии предполагаются фиксированными.

В качестве исходного пространства Φ рассмотрим пространство l_2 последовательностей $x = (x_1, \dots, x_n, \dots)$ с нормой $\|x\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} x_n^2$. Сопряженное к Φ пространство Φ^* состоит из последовательностей $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n, \dots)$ с нормой

$$\|\alpha\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^2 < \infty, \quad \alpha(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n x_n.$$

Пространство H_x регулярных сдвигов есть гильбертово пространство со скалярным произведением

$$[x', x''] = \sum_{n=1}^{\infty} w_n x'_n x''_n$$

и состоит из всех последовательностей x с $\|x\| < \infty$. Поскольку $w_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, пространство H_x шире пространства Φ , т. е.

$\Phi \subset H_x$ — пространство сигналов вложено в H_x — гильбертово пространство с воспроизводящим ядром, и $A: \Phi \rightarrow H_x$ — оператор вложения, т. е. оператор, сопоставляющий каждой последовательности x пространства Φ эту же последовательность, по рассматриваемую как элемент пространства H_x . Пространство допустимых статистик H_u состоит из последовательностей $u = (u_1, \dots, u_n, \dots)$, подчиненных условию

$$(u, u) = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n^2 u_n^2 = \sum_{n=1}^{\infty} w_n^{-1} u_n^2 < \infty.$$

Для сопряженных пространств имеет место обратное вложение $\Phi^* \supset H_u$. Задача измерения «сигнальной» последовательности при сформулированных условиях статистически некорректна, так как существуют функционалы $\alpha \in \Phi^*$, которые не могут быть оценены несмещенным образом с конечной дисперсией, а именно, это такие последовательности, для которых

$$\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^2 < \infty, \quad \sum_{n=1}^{\infty} w_n^{-1} \alpha_n^2 = +\infty.$$

Калибровочный оператор J в данном случае есть корреляционный оператор априорного распределения сигналов. Он действует из Φ^* в Φ по правилу

$$J\alpha = E x \alpha(x) = \{\alpha_n d_n\}_{n=1}^{\infty};$$

при этом величина $\alpha(J\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^2 d_n$ имеет смысл априорной дисперсии функционала α . Наилучшая линейная смещенная оценка для функционала α дается статистикой

$$\hat{\alpha} = u(y) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n y_n,$$

где статистика $u = \{u_n\}$ находится из уравнения (15):

$$w_n d_n u_n + u_n = w_n d_n \alpha_n,$$

т. е. получим

$$u_n = \frac{w_n d_n}{1 + w_n d_n} \alpha_n.$$

Следовательно, слабым решением задачи восстановления сигнальной последовательности будет последовательность случайных величин

$$\tilde{x}_n = \frac{w_n d_n}{1 + w_n d_n} y_n, \quad n = 1, \dots$$

Отсюда видно, что собственные числа информационного оператора

$$\lambda_n = w_n d_n = d_n / \sigma_n^2$$

действительно равны отношению априорной дисперсии к ошибке соответствующего измерения. Определим еще величины $\{s_n\}$, характеризующие точность решения задачи восстановления

$$E|\hat{\alpha} - \alpha(x)|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^2 d_n / (1 + w_n d_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^2 s_n,$$

где величины

$$s_n = d_n / (1 + w_n d_n) = E|\tilde{x}_n - x_n|^2$$

могут быть названы *апостериорными (остаточными) дисперсиями* сигналов после проведения эксперимента.

Полагая случайные величины x_n и ε_n , а следовательно, и y_n гауссовскими, определим шенноновскую информацию (21)

$$I_s(y|x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \log(1 + \lambda_n) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \log(1 + w_n d_n).$$

Задача оптимального планирования эксперимента может рассматриваться как задача максимизации информации $I_s(y|x)$ за счет выбора весов $\{w_n\}$ при фиксированных суммарных «затратах» (23). Поскольку при изменении весов $\partial I_s / \partial w_n = \text{const } s_n$, то легко понять, что оптимальное распределение нагрузки характеризуется условиями

$$\begin{aligned} w_n^* &= 0, & s_n^* &< \max_n s_n^* = s^*, \\ w_n^* &> 0, & s_n^* &= s^*, \end{aligned}$$

т. е. нагрузка сосредоточена в точках максимума апостериорной дисперсии, причем все нагруженные точки имеют одно и то же (максимальное) значение этой дисперсии. Поскольку всегда $s_n^{-1} = d_n^{-1} + w_n$, то оптимальное распределение весов определяется «затоплением» априорного профиля $\{d_n^{-1}\}$ до уровня $1/s^*$:

$$w_n^* = \begin{cases} 1/s^* - 1/d_n, & d_n > s^*, \\ 0, & d_n \leq s^*; \end{cases}$$

при этом уровень апостериорной дисперсии s^* соответствует суммарным затратам

$$\sum_{n=1}^{\infty} (1/s^* - 1/d_n)^+ = W.$$

Таким образом, оптимальная стратегия измерений должна состоять в том, чтобы в первую очередь измерять сигналы с наибольшей априорной дисперсией и только при наличии достаточных измерительных ресурсов «включать» измерения сигналов с меньшими дисперсиями, при этом всегда измеряется только конечное число сигналов, если суммарная дисперсия сигналов

ограничена $\sum_{n=1}^{\infty} d_n < \infty$.

З а м е ч а н и е 1. Безразмерная величина

$$n^* = \sum_{n=1}^{\infty} w_n s_n \leq W \max_n s_n$$

имеет смысл эффективной размерности рассматриваемого эксперимента. Для оптимального эксперимента получаем

$$W \max_n s_n = n^*$$

— необходимое и достаточное условие оптимальности распределения весов $\{w_n^*\}$ (ср. с теоремой эквивалентности Кифера — Вольфовица для регрессионного эксперимента конечной размерности (гл. 2)).

З а м е ч а н и е 2. Оптимальное распределение нагрузок, найденное выше из условия максимизации информационного количества (21), обладает еще одним экстремальным свойством:

$$\inf_{\{w_n\}} \max_n s_n = \max_n s_n^* = s^*,$$

т. е. оптимальный план минимизирует максимальное значение апостериорной дисперсии. Это свойство аналогично G -оптимальности для конечномерного регрессионного эксперимента. Следует отметить, что в данном примере отмеченная эквивалентность информационно-оптимального и минимаксного планов является следствием независимости отдельных каналов.

2. **Параметрическая регрессионная модель с априорными ковариациями параметров, гребневая регрессия.** Стандартный регрессионный эксперимент вкладывается в схему (22) следующим образом. Пусть модель линейна по параметрам:

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^m \theta_i \psi_i(x), \quad x \in X,$$

$\psi_1(x), \dots, \psi_m(x)$ — базис модели, состоящий из конечного числа линейно независимых непрерывных функций на компакте X , а наблюдения порождаются независимыми отсчетами в точках

$$y_j = \psi(x_j) + \varepsilon_j, \quad E\varepsilon_j = 0, \quad E\varepsilon_j^2 = \sigma_j^2 = w_j^{-1}, \quad j = 1, \dots, r,$$

где веса наблюдений не нормированы и подчинены условию (23). Полный вес W характеризует точность несмещенного оценивания константы

$$y_j = c + \varepsilon_j, \quad \hat{c} = \frac{1}{W} \sum_{j=1}^r w_j y_j, \quad D(\hat{c}) = W^{-1}.$$

В соответствии со схемой (22) в этом случае $\Phi = \mathbf{R}^m$ — конечномерное евклидово пространство параметров, $\Phi^* = \mathbf{R}^m$, оператор A_1 отображает вектор параметров $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m) \in \Phi$ в пространство непрерывных функций $\Psi = C_X$ на компакте X . Сопря-

женное пространство Ψ^* есть пространство линейных функционалов от непрерывных функций, а множество планирований \mathcal{Z} состоит из функционалов вида

$$X_x(\psi) = \psi(x), \quad x \in X,$$

Класс \mathcal{S} метрических операторов $G: \Psi \rightarrow \Psi^*$ в задаче планирования состоит из всевозможных положительных операторов, соответствующих квадратичным формам вида

$$(G_\zeta \psi)(\psi) = W \int_X |\psi(x)|^2 d\zeta, \quad \zeta(X) = 1.$$

В пространстве параметров каждый такой оператор порождает матрицу $m \times m$

$$WM(\zeta) = A_1^* C_\zeta A_1: \Phi \rightarrow \Phi^*$$

с элементами

$$M_{ik} = \int_X \psi_i(x) \psi_k(x) d\zeta = W^{-1} (G_\zeta \psi_i)(\psi_k),$$

являющуюся информационной матрицей эксперимента. Если матрица $M(\zeta)$ невырождена, то задача оценивания вектора параметров θ статистически корректна и ее решение дается оценками МНК. Часто оказывается, что матрица $M(\zeta)$ «почти» вырождена, т. е. ее определитель близок к нулю в масштабе, согласованном с единицами измерения параметров. В этих случаях используют априорную калибровку (регуляризацию) оценок на основе априорной статистики (см. также гл. 1). Калибровочный оператор задается при этом матрицей ковариаций

$$D_0 = E(\theta - E\theta)(\theta - E\theta)^T,$$

Рассмотренный в гл. 1 случай гребневых оценок получается, если матрица D_0 кратна единичной.

В дальнейшем без ограничения общности можно считать $E\theta = 0$. Предполагая, что матрица D_0 невырождена, определим матрицу D' соотношением

$$D' = (D_0^{-1} + WM(\zeta))^{-1}.$$

Тогда наилучшие линейные (смещенные) оценки параметров даются компонентами вектора

$$\hat{\theta} = D' Y,$$

где компоненты вектора $Y = (Y_1, \dots, Y_m)^T$ вычисляются по наблюдениям y_1, \dots, y_r :

$$Y_i = \sum_{j=1}^r w_j \psi_i(x_j) y_j, \quad i = 1, \dots, m.$$

Оценки параметров являются наилучшими в том смысле, что для любой линейной комбинации параметров $\alpha(\theta) = \sum_{i=1}^m \alpha_i \theta_i = \alpha^T \theta$ средний квадрат уклонения

$$E|\alpha(\hat{\theta}) - \alpha(\theta)|^2 = \alpha^T D' \alpha$$

минимален в классе линейных оценок. Последнее соотношение показывает также, что матрица D' , определенная выше, имеет смысл дисперсионной матрицы остаточных уклонений, т. е.

$$D' = E(\hat{\theta} - \theta)(\hat{\theta} - \theta)^T.$$

Подчеркнем, что «регуляризованные» наилучшие оценки, в отличие от оценок МНК $\hat{\theta}^* = W^{-1}M^{-1}Y$, являются смещенными:

$$E(\hat{\theta}|\theta) = WD'M(\zeta)\theta \neq \theta.$$

Это естественно, так как оценки МНК, если они существуют, являются наилучшими (в указанном выше смысле) несмещенными оценками параметров. Кроме того, всегда $D' \leq W^{-1}M(\zeta)^{-1}$, где неравенство понимается как обычно — для положительно определенных матриц.

Задача планирования в рассматриваемой ситуации состоит в выборе распределения затрат $W\zeta(\cdot)$ на множестве X — области планирования. Критерии оптимальности естественно связать с матрицей D' , характеризующей точностные свойства наилучших оценок. В частности, по аналогии с обычными D -оптимальными планами, определим D' -оптимальный план ζ^* условием

$$\det [D_0^{-1} + WM(\zeta^*)] = \sup_{\zeta} \det [D_0^{-1} + WM(\zeta)].$$

При обычных условиях (непрерывность базисных функций на компакте X) экстремум достигается на единственной информационной матрице $M^* = M(\zeta^*)$, причем оптимальный план всегда можно выбрать дискретным и содержащим не более $m(m+1)/2$ точек. Далее определим функцию

$$d(x, \zeta) = \sum_{i,k=1}^m \psi_i(x) \psi_k(x) D'_{ik},$$

имеющую смысл остаточной дисперсии при восстановлении функции $\psi(x) = \sum_{i=1}^m \theta_i \psi_i(x)$ с помощью оценки $\hat{\psi}(x) = \sum_{i=1}^m \hat{\theta}_i \psi_i(x)$, и число

$$n_w(\zeta) = W \operatorname{tr} D' M(\zeta) \leq m,$$

зависящее от плана (эффективную размерность регрессионной задачи). Для любого невырожденного плана ζ

$$\lim_{W \rightarrow \infty} n_w(\zeta) = m,$$

причем $dn_w/dW > 0$, т. е. зависимость от суммарных затрат строго монотонна. Необходимым и достаточным условием D' -оптимальности плана ζ^* при фиксированных затратах W является равенство

$$W \max_{x \in X} d(x, \zeta^*) = n_w(\zeta^*),$$

и максимум достигается в точках спектра оптимального плана:

$$Wd(x^*, \zeta^*) = n_w(\zeta^*), \quad W\zeta^*(x^*) = w^* > 0.$$

Для любого неоптимального плана выполнено неравенство, аналогичное неравенству Кифера,

$$\ln \frac{\det [D_0^{-1} + WM(\zeta)]}{\det [D_0^{-1} + WM(\zeta^*)]} \leq \left\{ \max_{x \in X} d(x, \zeta) - \frac{n_w(\zeta)}{M} \right\}.$$

В силу указанных свойств оптимальный план «регуляризованной» регрессии может быть найден с помощью точно такого же итерационного процесса, как и обычный D -оптимальный план (см. гл. 4).

З а м е ч а н и е 1. В рассматриваемой ситуации D' -оптимальный план, вообще говоря, не является минимаксным, т. е. удовлетворяющим условию

$$\max_{x \in X} d(x, \zeta^*) = \inf_{\zeta} \max_{x \in X} d(x, \zeta).$$

Для того чтобы D' -оптимальный план был минимаксным, необходимо и достаточно, чтобы система линейных уравнений

$$\sum_{l=1}^r \left[\sum_{i,k=1}^m D'_{ik} \psi_i(x_j^*) \psi_k(x_l^*) \right]^2 p_l = c > 0, \quad j = 1, \dots, r,$$

где x_1^*, \dots, x_r^* — спектр D' -оптимального плана, а в правой части всех уравнений стоит положительная константа, имела положительное решение $p_l > 0$, $l = 1, \dots, r$.

З а м е ч а н и е 2. Рассмотренная задача планирования обычно возникает в связи с приближенным решением интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода:

$$\int_T K(x, t) \varphi(t) dt = \psi(x), \quad x \in X,$$

ядро которого $K(x, t)$ — непрерывная функция аргументов на произведении компактов $T \times X$. Линейная модель для правой части — функции $\psi(x)$, порождается линейной моделью для искомого решения

$$\varphi(t) = \sum_{i=1}^m \theta_i \varphi_i(t), \quad \psi_i(x) = \int_T K(x, t) \varphi_i(t) dt.$$

Оценивая параметры $\theta_1, \dots, \theta_m$, восстанавливаем искомую функцию

$$\hat{\varphi}(t) = \sum_{i=1}^m \hat{\theta}_i \varphi_i(t),$$

т. е. приближенно решаем интегральное уравнение. Выбор плана из условия D' -оптимальности представляется при этом естественным независимо от того, интересует ли нас непосредственно модель $\psi(x)$ или решение $\varphi(x)$. Что касается точности восстановления искомой функции, то она непосредственно с D' -оптимальностью не связана — относительно ошибки такого восстановления

$$E |\hat{\varphi}(t) - \varphi(t)|^2 = \sum_{i,h}^m D'_{ih} \varphi_i(t) \varphi_h(t) = d_\varphi(t, \zeta)$$

ничего определенного сказать нельзя. Максимум дисперсии $d(x, \zeta)$ для функции ψ можно интерпретировать лишь следующим образом: при любом фиксированном $x \in X$ интегральное выражение в левой части уравнения есть линейный функционал от функции φ :

$$k_x(\varphi) = \int_T K(x, t) \varphi(t) dt.$$

Обозначим через \mathcal{K}_x выпуклое замыкание множества функционалов $k_x(\cdot)$, когда x пробегает область планирования X . Тогда

$$\max_{x \in X} d(x, \zeta) = \sup_{h \in \mathcal{K}_x} E |k(\hat{\varphi}) - k(\varphi)|^2.$$

3. Аппроксимация регрессионной зависимости при планировании экспериментов для обратных задач. Особенности планирования экспериментов, связанных с некорректными обратными задачами, определяются природой множества допустимых решений $\Phi_0 \subset \Phi$. Если Φ_0 — конечномерное подпространство и обратная задача, суженная на это подпространство, может быть сделана статистически корректной при некотором плане эксперимента, то оптимальный план может быть найден обычными методами теории планирования эксперимента (см. гл. 2, 4). Если же Φ_0 — ограниченное множество бесконечной размерности (например, эллипсоид, заданный калибровочным оператором J), то обычные методы непосредственно неприменимы. Поскольку в настоящее время точные решения задач оптимального планирования для указанного класса ограничений практически отсутствуют (за исключением, быть может, задачи, приведенной в качестве примера 1), представляют интерес подходы, основанные на тех или иных приближениях исходной задачи планирования. Ниже рассматривается подход, основанный на аппроксимации множества Φ_0 конечномерными подпространствами пространства Φ и тесно связанный с асимптотическими методами в теории непараметрического оценивания регрессии [36].

Пусть $\Phi_0 \subset \Phi$ — произвольное ограниченное множество допустимых функций. Используем для приближения элементов из Φ_0 конечномерное подпространство $L_n \subset \Phi$:

$$L_n = \left\{ \varphi \mid \varphi = \sum_{i=1}^n \theta_i \varphi_i \right\},$$

где $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ — базис подпространства L_n . Предположим, что обратная задача, суженная на подпространство L_n , статистически корректна для некоторого плана ξ , т. е. матрица $M(\xi) = \|(G\varphi_i)(\varphi_k)\|_{i,k=1}^n$ имеет обратную. Оценка МНК для элемента $\varphi \in L_n$ имеет вид

$$\hat{\varphi} = \sum_{i=1}^n \hat{\theta}_i \varphi_i, \quad \hat{\theta}_i = \sum_{k=1}^n [M(\xi)]_{ik}^{-1} \tilde{u}_k,$$

где \tilde{u}_k — случайные величины, порожденные статистиками $u_k = K^{-1}A\varphi_k$. Если элемент $\varphi \in \Phi_0$ не принадлежит L_n , то выписанная оценка оказывается смещенной. Нетрудно видеть, что в действительности она является несмещенной оценкой элемента $\varphi^* \in L_n$:

$$\|\varphi - \varphi^*\|_G = \inf_{\varphi' \in L_n} \|\varphi - \varphi'\|_G,$$

являющегося наилучшим приближением элемента φ в метрике $\|\varphi\|_G^2 = (G\varphi)(\varphi)$.

Рассмотрим уклонение оценки $\hat{\varphi}$ для какого-либо линейного функционала $\alpha \in \Phi$:

$$E|\alpha(\hat{\varphi}) - \alpha(\varphi)|^2 = D(\alpha, \xi, L_n) + |\alpha(\varphi - \varphi^*)|^2,$$

где первый член в правой части представляет дисперсию оценки $\alpha(\hat{\varphi})$:

$$D(\alpha, \xi, L_n) = \frac{1}{W} \sum_{i,k=1}^n [M(\xi)]_{i,k}^{-1} \alpha(\varphi_i) \alpha(\varphi_k).$$

Отметим, что величина $D(\alpha, \xi, L_n)$ не зависит от неизвестного элемента φ . Поэтому, в частности, верхняя грань уклонения оценки $\alpha(\hat{\varphi})$ от точного значения функционала $\alpha(\varphi)$ представима в виде

$$\sup_{\varphi \in \Phi_0} E|\alpha(\hat{\varphi}) - \alpha(\varphi)|^2 = D(\alpha, \xi, L_n) + \Omega_{\Phi_0}(\alpha, \xi, L_n),$$

$$\Omega_{\Phi_0}(\alpha, \xi, L_n) = \sup_{\varphi \in \Phi_0} |\alpha(\varphi - \varphi^*)|^2.$$

Поскольку правая часть, по предположению, конечна, указанный способ аппроксимации дает возможность оценить значение любого линейного функционала α от неизвестного решения φ с конечной ошибкой. Этот способ, вообще говоря, не оптимален,

поэтому найденная выше верхняя грань уклонения может быть улучшена, например, с помощью оценок, рассмотренных в § 1. Тем не менее с помощью этого способа можно получить некоторые указания относительно выбора плана эксперимента.

Пусть $\mathcal{X} \subset \Psi^*$ — «фактическая» область планирования для обратной задачи (22). Очевидно, что в качестве эффективной области планирования, как это видно из схемы (22), можно рассматривать множество

$$\mathcal{X}' = \overline{A^*(\mathcal{X})} \subset \Phi^*,$$

т. е. выпуклую оболочку образа $A^*(\mathcal{X})$, полученного с помощью сопряженного оператора A^* . Предположим, что область \mathcal{X}' , полученная таким способом, обладает воспроизводящим свойством в пространстве Φ^* , т. е. любой элемент $\alpha \in \Phi$ может быть получен в виде конечной линейной комбинации элементов области \mathcal{X}' :

$$\alpha = \sum_{i=1}^m c_i \alpha_i, \quad \alpha_i \in \mathcal{X}'.$$

Например, если \mathcal{X}' — поглощающее множество в пространстве Φ^* , то $m = 1$, если \mathcal{X}' — часть положительного конуса в пространстве Φ^* , то может оказаться, что $m = 2$. Существенно предположить, что число слагаемых не превосходит некоторого определенного числа m^* . С помощью указанного разложения легко получается оценка сверху для уклонения любого функционала $\alpha \in \Phi^*$ через верхнюю грань этого уклонения для функционалов из \mathcal{X}' :

$$\sup_{\varphi \in \Phi_0} E |\alpha(\hat{\varphi}) - \alpha(\varphi)| \leq c(\alpha) \left\{ \sup_{\alpha \in \mathcal{X}'} D(\alpha, \xi, L_n) + \sup_{\alpha \in \mathcal{X}'} \Omega_{\Phi_0}(\alpha, \xi, L_n) \right\},$$

$$\text{где } c(\alpha) = \left[\sum_{i=1}^m |c_i| \right]^2 < \infty.$$

В приведенной оценке от выбора аппроксимирующего подпространства и плана зависит только сумма в фигурных скобках, которую и следует по возможности минимизировать. На основании теории эквивалентности в формулировке гл. 7

$$\inf_{\xi} \sup_{\alpha \in \mathcal{X}'} D(\alpha, \xi, L_n) = \frac{n}{W}$$

и существует оптимальный план $\xi^*(L_n)$, зависящий только от подпространства L_n и области \mathcal{X}' , на котором нижняя грань в левой части достигается. Фиксируем этот план в качестве плана эксперимента. Тогда

$$\sup_{\varphi \in \Phi_0} E |\alpha(\hat{\varphi}) - \alpha(\varphi)|^2 \leq c(\alpha) \left\{ \frac{n}{w} + \varepsilon_n^* \right\},$$

где $\varepsilon_n^* = \sup_{\alpha \in \mathcal{X}'} \Omega_{\Phi_0}(\alpha, \xi^*, L_n) = \sup_{\alpha \in \mathcal{X}'} \sup_{\varphi \in \Phi_0} |\alpha(\varphi - \varphi^*)|^2$ есть по существу характеристика аппроксимируемости множества Φ_0

подпространством L_n относительно множества функционалов \mathcal{R}' : $\varepsilon_n^* = \varepsilon_n^*(\Phi_0, L_n, \mathcal{R}')$. Это приводит к задаче оптимальной аппроксимации за счет выбора подпространства L_n :

$$L_n^* : \varepsilon_n^*(\Phi_0, L_n^*, \mathcal{R}') = \inf_{L_n} \varepsilon_n^*(\Phi_0, L_n, \mathcal{R}') = d_n(\Phi_0, \mathcal{R}'),$$

а результирующая характеристика аппроксимации $d_n(\Phi_0, \mathcal{R}')$ аналогична n -поперечнику множества Φ_0 по Колмогорову.

Предположим, что множество Φ_0 таково, что для какой-либо последовательности $\{L_n, n = 1, 2, \dots\}$ аппроксимирующих подпространств $\varepsilon_n^* \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$), причем указанная сходимость монотонна. Тогда для заданной величины w существует оптимальная конечная размерность аппроксимации $n^*(w)$

$$\frac{n^*(w)}{w} + \varepsilon_{n^*}^* = \min_n \left(\frac{n}{w} + \varepsilon_n^* \right).$$

Таким образом, приближенное решение задачи планирования может быть найдено в результате следующих действий: для каждой размерности аппроксимации n выбираем некоторое аппроксимирующее подпространство L_n и находим соответствующий оптимальный план $\xi^*(L_n)$. Эти процедуры могут быть выполнены без привлечения данных о множестве Φ_0 и величине суммарной точности W . Затем нужно найти величину $\varepsilon_n^*(\Phi_0, L_n, \mathcal{R}')$ и убедиться, что при некотором выборе $\{L_n\}$ для данного множества Φ_0 справедливо: $\lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon_n^* = 0$. После этого можно определить оптимальную размерность $n^*(w)$, зависящую уже только от точности w . Окончательным решением будет план $\xi^*(L_{n^*})$ — n^* -оптимальный план для подпространства оптимальной размерности. В принципе процедуру можно несколько улучшить, выбирая при каждом n наилучшее аппроксимирующее подпространство L_n^* , что на практике, конечно, затруднительно.

В частных случаях описанную процедуру можно несколько упростить, не вычисляя явно величину ε_n^* . Пусть, например, множество Φ_0 есть эллипсоид с калибровочным оператором J . Тогда для каждого плана ξ наилучшее слабое решение $\tilde{\varphi}_\xi^*$ обратной задачи (22) может быть найдено в явном виде (20). Рассмотрим теперь последовательность подпространств и соответствующую ей последовательность n -планов $\xi^*(L_n)$. Поскольку оптимальный в смысле предшествующего рассмотрения план содержится в указанной последовательности, он может быть выбран просто по характеристикам соответствующего наилучшего решения $\tilde{\varphi}_{\xi^*}^*$ с помощью любого подходящего критерия, например функционала (21).

Литература к § 2: [27, 28, 34, 36, 47, 92*, 171].

ГЛАВА 10

ФАКТОРНЫЕ МОДЕЛИ

Главы 10—13 посвящены факторному планированию, с которого начала свое развитие вся теория планирования эксперимента. Факторные эксперименты были впервые рассмотрены Фишером более полувека тому назад в связи с задачами проведения сельскохозяйственных экспериментов.

Часто факторные эксперименты ставятся с целью проведения в дальнейшем дисперсионного анализа в его классической трактовке и служат для того, чтобы по возможности сократить число необходимых экспериментов. Соответствующие планы поэтому иногда называют *планами дисперсионного анализа*. В этом случае предполагается, что все факторы имеют качественную структуру. Это приводит к моделям неполного ранга и к статистическому анализу с использованием понятия линейных параметрических функций, допускающих оценку.

Однако возможен более общий подход к факторным экспериментам, при котором статистический анализ выполняется единым образом независимо от структуры (качественной или количественной) используемых факторов. В гл. 10 факторные модели вводятся таким образом, что для параметров этих моделей можно вывести систему линейных равенств, сводящих задачу к случаю модели полного ранга с помощью техники редуцирования, изложенной в п. 1.2.5. После этого нахождение оценок МНК параметров и параметрических функций, ковариационных матриц этих оценок, проверки различных гипотез и построение доверительных эллипсоидов осуществляется с помощью обычных методов регрессионного анализа (см. § 1.2).

Глава 11 посвящена вопросам оптимальности факторного планирования. Главы 12, 13 содержат конструктивные результаты по существованию широких классов эффективных факторных планов. Изложение в этих главах относится к общему случаю факторных планов с качественными и количественными факторами.

§ 1. Основные определения и вспомогательные результаты

1. Модель. Рассмотрим серию из N наблюдений y_1, \dots, y_N , каждое из которых соответствует значениям k переменных X_i ($i = 1, \dots, k$). А именно, для u -го ($u = 1, \dots, N$) наблюдения y_u (т. е. в u -м опыте) переменные X_i принимают значения X_{iu} . Предполагается следующая модель наблюдений: математическое ожидание наблюдения связано с X_{iu} с точностью до параметров $\theta_1, \dots, \theta_m$ известной зависимостью

$$E y_u = \theta^T f(X_{1u}, \dots, X_{ku}), \quad (1)$$

где $\theta^T = (\theta_1, \dots, \theta_m)$ — вектор неизвестных параметров, $f = (f_1, \dots, f_m)^T$ — вектор известных функций, $\{f(X_{1u}, \dots, X_{ku})\}$ — матрица коэффициентов.

Относительно области определения переменных X_i предполагается следующее. Если переменная X_i определена на множестве значений X_{iu} ($u = 1, \dots, N$), то она называется *качественной* и значения X_{iu} — символы, быть может, записанные в виде чисел. Если же переменная X_i определена на отрезке $[X_{i \min}, X_{i \max}]$ ($X_{i \min} = \min_u X_{iu}$, $X_{i \max} = \max_u X_{iu}$), то она называется *количественной*. Будем считать, что первые k_1 ($0 \leq k_1 \leq k$) переменных качественные, а остальные — количественные. Тогда область определения переменных X_i задается в виде многомерной решетки \mathcal{X} :

$$\begin{aligned} X_i &\in \{X_{iu}\}, & i = 1, \dots, k_1, \\ X_i &\in [X_{i \min}, X_{i \max}], & i = k_1 + 1, \dots, k, \end{aligned}$$

и модель (1) можно доопределить на всей области определения \mathcal{X} .

2. План. Матрица $D_X = \{X_{iu}\}$ ($i = 1, \dots, k$; $u = 1, \dots, N$) называется *матрицей плана* или *планом*. Каждое из различных значений, которое принимает переменная X_i в плане D_X называется *уровнем*. Общее число различных уровней переменной X_i обозначим через s_i .

Принадлежность того или иного фактора к множеству качественных или количественных факторов не оказывает существенного влияния на свойства плана. Поэтому удобно наряду с переменной X_i рассматривать некоторую абстракцию — фактор \mathcal{F}_i , вводимый следующим образом. Каждому из различных уровней $X_i^{(0)}, \dots, X_i^{(s_i-1)}$ переменной X_i ставятся в соответствие символы $0, 1, \dots, s_i - 1$ независимо от того, является ли переменная X_i количественной или качественной. В этом случае говорят о факторе \mathcal{F}_i (качественном или количественном), принимающем соответствующие переменной X_i значения $0, 1, \dots, s_i - 1$. Матрица плана может быть переписана в виде $D_F = \{\mathcal{F}_{iu}\}$, где \mathcal{F}_{iu} — значение, которое принимает фактор \mathcal{F}_i в u -м опыте ($i = 1, \dots, k$; $u = 1, \dots, N$). Индекс в обозначении матрицы плана часто будет опускаться.

План, состоящий из N опытов и включающий факторы $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$, имеющие соответственно s_1, \dots, s_k уровней, обозначается через $s_1 \times \dots \times s_k // N$ (или просто через $s_1 \times \dots \times s_k$). Максимальное число различных опытов (строк в матрице плана) равно $s_1 \dots s_k$.

План $s_1 \times \dots \times s_k // N$ называется *полным*, если он состоит из $N = s_1 \dots s_k$ различных опытов; *дробным*, если он не содержит всех различных $s_1 \dots s_k$ опытов; *симметричным*, если все факторы имеют одинаковое число уровней; *равномерным*, если уровни любого фактора встречаются в плане одинаковое для данного фактора число раз.

План называется *факторным* только по отношению к определенному виду факторной модели, для которой данный план рассматривается. Точно так же и модель называется *факторной* только по отношению к определенному факторному плану. Далее фактически будет вводиться посредством определения сразу совокупность двух понятий: факторного плана и факторной модели. Различные виды факторных моделей будут рассмотрены в §§ 2—4.

3. Главные эффекты и эффекты взаимодействий. В N -мерном евклидовом пространстве \mathbf{R}^N u -й координате каждого вектора поставим в соответствие u -й опыт плана D .

Контрастом называется такой вектор $z^T = (z_1, \dots, z_N) \in \mathbf{R}^N$, что

$$\sum_{u=1}^N z_u = 0.$$

Вектором главных эффектов фактора \mathcal{F}_i плана D называется такой контраст, компоненты которого для всех наблюдений, в которых фактор \mathcal{F}_i в плане D принимает одинаковые значения, равны. Этот вектор называется также *вектором эффекта взаимодействия нулевого порядка* фактора \mathcal{F}_i плана D .

Вектором эффекта взаимодействия $(r-1)$ -го порядка, или вектором r -факторного эффекта взаимодействия факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ плана D называется такой ортогональный ко всем векторам эффектов взаимодействий вплоть до порядка $r-2$ факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ плана D контраст, коэффициенты которого для всех наблюдений плана D , в которых факторы $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ принимают одинаковые значения, равны. Там, где это не приводит к недоразумениям, слово «вектор» будет опускаться.

Совокупность всех эффектов взаимодействия $(r-1)$ -го порядка фиксированных r факторов вместе с нулевым вектором есть линейное подпространство пространства \mathbf{R}^N .

Числом степеней свободы эффектов взаимодействия $(r-1)$ -го порядка фиксированных r факторов для плана D называется размерность соответствующего им линейного подпространства.

В приведенном определении требование ортогональности эффектов взаимодействия $(r-1)$ -го порядка ко всем эффектам взаимодействий вплоть до порядка $r-2$ этих же факторов, можно за-

метить требованием ортогональности к максимальным линейно независимым системам соответствующих эффектов взаимодействия.

Матрица F_i , состоящая из максимальной независимой системы векторов главных эффектов фактора \mathcal{F}_i , называется *матрицей главных эффектов* фактора \mathcal{F}_i . Матрица $F_{1\dots r}$, состоящая из максимальной независимой системы векторов эффектов взаимодействия факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$, называется *матрицей эффектов взаимодействия* факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$.

Введем следующее обозначение:

$$\Phi_{1\dots r} = [JF_1 \dots F_r F_{12} \dots F_{1\dots r}],$$

где J — вектор-столбец из единиц.

Для матриц эффектов полного плана D^f будем использовать аналогичные обозначения с верхним индексом f .

4. Полное множество эффектов. Число степеней свободы главных эффектов фактора \mathcal{F}_i для любого плана равно $s_i - 1$. Пусть в плане D число различных комбинаций уровней факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ равно

$$C^{1\dots r} = s_1 \dots s_r. \quad (2)$$

Тогда справедливо следующее утверждение.

Условие (2) необходимо и достаточно для того, чтобы число степеней свободы любых n -факторных эффектов взаимодействия ($n \leq r$) n факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_n}$ из $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ определялось выражением $(s_{i_1} - 1) \dots (s_{i_n} - 1)$. При выполнении условия (2) $\Phi_{1\dots r}$ есть матрица полного ранга.

Далее предполагается, что условие (2) выполнено, если речь идет об r -факторных эффектах взаимодействия факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$.

Множество линейно независимых эффектов взаимодействия факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ называется *полным*, если число этих эффектов во множестве равно $(s_1 - 1) \dots (s_r - 1)$.

5. Ортогональность эффектов в полном плане. Для двух векторов $a^T = (a_1, \dots, a_N)$ и $c^T = (c_1, \dots, c_N)$ вводится операция \otimes , которая называется *произведением*, так что $a \otimes c = (a_1 c_1, \dots, a_N c_N)^T$. Пусть столбцы матрицы A размера $N \times n$ есть a_1, \dots, a_n , а столбцы матрицы C размера $N \times l$ есть c_1, \dots, c_l . По определению

$$A \otimes C = [a_1 \otimes c_1 \ a_1 \otimes c_2 \ \dots \ a_n \otimes c_l].$$

Рассмотрим теперь некоторые свойства главных эффектов и эффектов взаимодействий для полного плана D^f . Поскольку в плане D^f для произвольных факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ выполняется условие (2), то матрица $F_{1\dots r}^f$ содержит полное множество эффектов взаимодействия. Кроме того, справедливо следующее утверждение.

Для полного плана D^f любой эффект взаимодействия (главный эффект) одной группы факторов ортогонален любому эффекту

ту взаимодействия (главному эффекту) другой группы факторов. Произведение $F_1^f \otimes F_2^f \otimes \dots \otimes F_r^f$ дает матрицу $F_{1\dots r}^f$ эффектов взаимодействия факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$. При этом столбцы матрицы $F_{1\dots r}^f$ будут ортогональны, если ортогональны все столбцы каждой из матриц F_1^f, \dots, F_r^f , а скалярный квадрат любого столбца матрицы $F_{1\dots r}^f$ будет равен N^f , если аналогичное условие справедливо для любого из столбцов матриц F_1^f, \dots, F_r^f .

Пример 1. Рассмотрим матрицу полного плана 3×2 для факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 :

$$D^f = \begin{array}{c} \mathcal{F}_1 \quad \mathcal{F}_2 \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 2 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \end{array}.$$

Поскольку фактор \mathcal{F}_1 — трехуровневый, имеется ровно два линейно независимых главных эффекта этого фактора. В качестве таких главных эффектов можно выбрать, например, столбцы следующей матрицы:

$$F_1^f = \begin{bmatrix} -1 & +1 \\ 0 & -2 \\ +1 & +1 \\ -1 & +1 \\ 0 & -2 \\ +1 & +1 \end{bmatrix}.$$

Каждый из столбцов матрицы F_1^f ортогонален единичному столбцу (т. е. является контрастом) и для одинаковых уровней фактора \mathcal{F}_1 принимает одинаковые значения. Любая нетривиальная комбинация столбцов матрицы F_1^f дает также вектор главного эффекта фактора \mathcal{F}_1 . Таким вектором, например, будет их полусумма $(0 \ -1 \ +1 \ 0 \ -1 \ +1)^T$.

Число степеней свободы главных эффектов фактора \mathcal{F}_2 равно 1, и все главные эффекты с точностью до множителя совпадают со столбцом, составляющим следующую матрицу главных эффектов фактора \mathcal{F}_2 :

$$F_2^f = (-1 \ -1 \ -1 \ +1 \ +1 \ +1)^T.$$

Матрица эффектов взаимодействий F_{12}^f факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 может быть получена как произведение матриц F_1^f и F_2^f :

$$F_1^f \otimes F_2^f = F_{12}^f = \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ 0 & +2 \\ -1 & -1 \\ -1 & +1 \\ 0 & -2 \\ +1 & +1 \end{bmatrix}.$$

Поскольку столбцы матрицы F_2^f выбраны ортогональными, то ортогональными оказываются также и столбцы матрицы F_{12}^f . Это влечет за собой ортогональность всех столбцов матрицы

$$\Phi_{12}^f = \begin{bmatrix} +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & 0 & -2 & -1 & 0 & +2 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & 0 & -2 & +1 & 0 & -2 \\ +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \end{bmatrix}.$$

6. Эффекты уровней и взаимодействий уровней. Ниже вводятся понятия эффектов уровней и эффектов взаимодействий уровней факторов, а также векторов этих эффектов. Будет рассматриваться трехфакторный эксперимент. Переход к многофакторному случаю не вызывает принципиальных затруднений.

Обозначим $\eta_{ijn} = E y_{ijn}$, где y_{ijn} — наблюдение, соответствующее точке полного трехфакторного плана D^f , для которой фактор \mathcal{F}_1 поддерживается на i -м уровне, фактор \mathcal{F}_2 — на j -м уровне и фактор \mathcal{F}_3 — на n -м уровне. Звездочка вместо некоторого индекса означает, что производится усреднение по всем уровням соответствующего фактора. Так, например,

$$\eta_{*jn} = \frac{1}{s_1} \sum_{i=0}^{s_1-1} \eta_{ijn}.$$

Число $\beta_0 = \eta_{***}$ называется *истинным средним*, число $\beta_1^{(i)} = \eta_{i**} - \eta_{***}$ называется *эффектом i -го уровня фактора \mathcal{F}_1* .

Эффектом взаимодействия β_{12}^{ij} уровней i и j факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 соответственно называется разность между эффектом уровня i фактора \mathcal{F}_1 при условии, что фактор \mathcal{F}_2 поддерживается на уровне j , и эффектом уровня i фактора \mathcal{F}_1 .

Эффектом взаимодействия β_{123}^{ijn} уровней i, j, n факторов $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \mathcal{F}_3$ соответственно называется разность между эффектом взаимодействия уровней j и n факторов \mathcal{F}_2 и \mathcal{F}_3 соответственно при условии, что фактор \mathcal{F}_1 поддерживается на уровне i , и эффектом взаимодействия уровней j и n факторов \mathcal{F}_2 и \mathcal{F}_3 соответственно.

Данные определения симметричны относительно факторов $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2$ и \mathcal{F}_3 . Аналогичным образом определяются другие эффекты уровней и эффекты взаимодействия уровней.

Любой эффект уровня фактора, так же как и эффект взаимодействия уровней факторов, есть алгебраическая сумма математических ожиданий наблюдений для D^f с некоторыми коэффициентами. Эти коэффициенты образуют векторы, которые называются соответственно *векторами эффектов уровней фактора и эффектов взаимодействия уровней факторов*.

Обозначим через ψ_1^i вектор эффекта i -го уровня фактора \mathcal{F}_1 , через ψ_{12}^{ij} — вектор эффекта взаимодействия уровней i и j соответственно факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 и т. д. Вектор эффектов взаимодействия уровней i_1, \dots, i_r факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ соответственно может быть получен из следующего соотношения:

$$N^f \psi_{1\dots r}^{i_1\dots i_r} = N^f \psi_1^{i_1} \otimes N^f \psi_2^{i_2} \otimes \dots \otimes N^f \psi_r^{i_r}.$$

Обозначим через $\psi_1 = [\psi_1^0 \psi_1^1 \dots \psi_1^{s_1-1}]$ матрицу всех векторов эффектов уровней фактора \mathcal{F}_1 , через $\psi_{12} = [\psi_{12}^{00} \psi_{12}^{01} \dots \psi_{12}^{(s_1-1)(s_2-1)}]$ матрицу всех векторов эффектов взаимодействия уровней факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 и т. д. Тогда справедливо следующее соотношение:

$$N^f \psi_{1\dots r} = N^f \psi_1 \otimes N^f \psi_2 \otimes \dots \otimes N^f \psi_r.$$

Все s_i векторов, составляющие матрицу ψ_i эффектов уровней фактора \mathcal{F}_i плана D^f , являются векторами главных эффектов фактора \mathcal{F}_i , и $\text{rg } \psi_i = s_i - 1$. Все s_1, \dots, s_r векторов, составляющие матрицу $\psi_{1\dots r}$ эффектов взаимодействия уровней факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$ плана D^f , являются векторами эффектов взаимодействия факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$, и $\text{rg } \psi_{1\dots r} = (s_1 - 1) \dots (s_r - 1)$. Введем матрицу $\Psi_{1\dots r}$, содержащую все векторы эффектов уровней и взаимодействий уровней факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_r$:

$$\Psi_{1\dots r} = \left[\frac{1}{N^f} J \psi_1 \dots \psi_r \psi_{12} \dots \psi_{1\dots r} \right].$$

Пример 2. Пусть D^f — полный план типа 3×2 для факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 :

$$\begin{array}{cc} \mathcal{F}_1 & \mathcal{F}_2 \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 2 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \end{array}.$$

Тогда матрица Ψ_{12} имеет следующий вид:

$$6\Psi_{12} = \begin{array}{c} J \qquad 6\psi_1 \qquad 6\psi_2 \qquad 6\psi_{12} = 6\psi_1 \otimes 6\psi_2 \\ \left[\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c} 1 & 2 & -1 & -1 & 1 & -1 & 2 & -2 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 2 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 2 & -2 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 2 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 2 & -2 \\ 1 & 2 & -1 & -1 & -1 & 1 & -2 & 2 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 2 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -2 & 2 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 2 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -2 & 2 \end{array} \right]. \end{array}$$

Литература к § 4: [6*, 81, 99, 117].

§ 2. Факторные модели для количественных факторов

1. Общая модель. Пусть в плане D все k факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ (с числом уровней s_1, \dots, s_k соответственно) — количественные. Рассмотрим следующую модель:

$$E y(X_1, \dots, X_k) = b_0 + b_1^{(1)} f_1^{(1)}(X_1) + \dots + b_1^{(s_1-1)} f_1^{(s_1-1)}(X_1) + \\ + b_k^{(1)} f_k^{(1)}(X_k) + \dots + b_k^{(s_k-1)} f_k^{(s_k-1)}(X_k) + \Pi. \quad (3)$$

В модели (3) приняты следующие обозначения и допущения: $y(X_1, \dots, X_k)$ — наблюдение в точке (X_1, \dots, X_k) ; Π содержит члены с произведениями $\lambda_{i_1 \dots i_r}^{(q_1 \dots q_r)} f_{i_1}^{(q_1)}(X_{i_1}) \dots f_{i_r}^{(q_r)}(X_{i_r})$ ($\lambda_{i_1 \dots i_r}^{(q_1 \dots q_r)}$ — константы, $i_1 \neq \dots \neq i_r$); система функций $1, f_i^{(1)}(X_i), \dots, f_i^{(s_i-1)}(X_i)$ линейно независима в точках X_{i1}, \dots, X_{iN} , т. е. $\text{rg } G_i = s_i$ для любого i , где

$$G_i = \begin{bmatrix} 1 & f_i^{(1)}(X_{i1}) & \dots & f_i^{(s_i-1)}(X_{i1}) \\ 1 & f_i^{(1)}(X_{i2}) & \dots & f_i^{(s_i-1)}(X_{i2}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & f_i^{(1)}(X_{iN}) & \dots & f_i^{(s_i-1)}(X_{iN}) \end{bmatrix}.$$

Если Π содержит всевозможные члены с произведениями $\lambda_{i_1 \dots i_r}^{(q_1 \dots q_r)} f_{i_1}^{(q_1)}(X_{i_1}) \dots f_{i_r}^{(q_r)}(X_{i_r})$ ($i_1 \neq \dots \neq i_r$), то модель (3) называется *полной факторной моделью* для количественных факторов (или *моделью A^1*) для факторного плана D .

Множество факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$, пар факторов $\mathcal{F}_{i_1} \mathcal{F}_{i_2}$ ($i_1 \neq i_2$), троек факторов $\mathcal{F}_{j_1} \mathcal{F}_{j_2} \mathcal{F}_{j_3}$ ($j_1 \neq j_2 \neq j_3$) и т. д. называется *факторным множеством* ω при выполнении следующего условия: если $\mathcal{F}_{n_1} \dots \mathcal{F}_{n_r} \in \omega$ ($n_1 \neq \dots \neq n_r$), то и $\mathcal{F}_{l_1} \dots \mathcal{F}_{l_v} \in \omega$ для всех $v = 1, \dots, r-1$ и $l_i \in \{n_1, \dots, n_r\}$ ($i = 1, \dots, v$), $l_i \neq l_j$ при $i \neq j$.

Модель

$$E y(X_1, \dots, X_k) = \\ = b_0 + \sum_{i=1}^k [b_i^{(1)} f_i^{(1)}(X_i) + \dots + b_i^{(s_i-1)} f_i^{(s_i-1)}(X_i)] + \\ + \sum_{i_1, i_2} [b_{i_1 i_2}^{1,1} \lambda_{i_1 i_2}^{1,1} f_{i_1}^{(1)}(X_{i_1}) f_{i_2}^{(1)}(X_{i_2}) + \dots \\ \dots + b_{i_1 i_2}^{s_{i_1}-1, s_{i_2}-1} \lambda_{i_1 i_2}^{s_{i_1}-1, s_{i_2}-1} f_{i_1}^{(s_{i_1}-1)}(X_{i_1}) f_{i_2}^{(s_{i_2}-1)}(X_{i_2})] + \dots \quad (4)$$

называется *факторной моделью для плана D* для количественных факторов для множества ω (или *моделью A^0*) при выполнении следующего условия: если модель содержит член с произведением $\lambda_{i_1 \dots i_r}^{q_1 \dots q_r} f_{i_1}^{(q_1)}(X_{i_1}) \dots f_{i_r}^{(q_r)}(X_{i_r})$ для некоторого набора q_1, \dots, q_r ,

то она содержит все возможные произведения для всех $q_1 = 0, \dots, s_1 - 1, \dots, q_r = 0, \dots, s_r - 1$ (полагаем $f_i^{(0)}(X_i) = 1$).

Модель A^0 (4) — общая модель для количественных факторов. Очевидно, что модель A^f , например, является частным случаем модели A^0 . Еще один частный случай общей модели может быть получен, если $f_i^{(q)}(X_i)$ — полином q -й степени от X_i . Если для каждого i система функций $1, f_i^{(1)}(X_i), \dots, f_i^{(s_i-1)}(X_i)$ представляет собой систему ортогональных полиномов в точках X_{i1}, \dots, X_{iN} , то столбцы матрицы G_i будут попарно ортогональны. В этом случае соответствующая модель называется *чебышевской*.

2. Модель истинных эффектов. Рассмотрение чебышевской модели в практических ситуациях, как правило, имеет смысл тогда, когда это дает возможность получить ортогональный план (см. гл. 11). В тех случаях, когда структура плана D не дает такой возможности, рассматривается так называемая *модель истинных эффектов* для количественных факторов.

Рассмотрим для этого полный план D^f с числом опытов N^f для факторов, входящих в D . Вектор истинных значений η^f для D^f определяется следующим образом: $\eta^f = E y^f = E(y_1, \dots, y_{N^f})$. По аналогии с предыдущим определяется вектор истинных эффектов B для количественных факторов.

Пусть для D^f

$$\Phi_{1\dots k}^f = [J F_1^f \dots F_k^f F_{12}^f \dots F_{1\dots k}^f],$$

где все матрицы F имеют попарно ортогональные столбцы, и скалярный квадрат любого столбца в $\Phi_{1\dots k}^f$ равен N^f . Тогда полагаем

$$B = \frac{1}{N^f} \Phi_{1\dots k}^{fT} \eta^f.$$

Для вектора наблюдений $y^f = (y_1, \dots, y_{N^f})^T$ в точках D^f выполняется тождество

$$E y^f = \Phi_{1\dots k}^f B, \quad (5)$$

называемое *полной моделью истинных эффектов* для количественных факторов (или *моделью A^f истинных эффектов*). Модель (5) является частным случаем факторной модели A^f и, следовательно, частным случаем общей факторной модели A^0 .

Обозначим через Φ^0 и B^0 части, отвечающие соответственно факторному множеству ω матрицы $\Phi_{1\dots k}^f$ и вектора B . В предположении, что компоненты вектора B , не отвечающие факторному множеству ω , равны нулю, модель (5) переписется следующим образом:

$$E y^f = \Phi^0 B^0. \quad (6)$$

Модель (6) называется *моделью A^0 истинных эффектов*.

Слова «истинных эффектов» опускаются, если из текста ясно или безразлично, о каком типе модели для количественных факторов идет речь.

В приложениях часто предполагают справедливость следующей модели, получаемой из модели (6) доопределением ее в более широкой области \mathcal{Z} :

$$E y(X_1, \dots, X_k) = f^i(X_1, \dots, X_k) B^0, \quad (7)$$

где $f^i(X_{1u}, \dots, X_{ku})$ совпадает с i -й строкой матрицы Φ^0 .

Модели (6) и (7) являются частными случаями факторной модели A^0 . Параметры модели (5) и, следовательно, моделей (6) и (7) допускают удобную интерпретацию, которая ясна из следующего примера.

Пример 3. Рассмотрим план D и соответствующий вектор математических ожиданий наблюдений η :

$$D = \begin{bmatrix} F_1 & F_2 & F_3 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}; \quad D_X = \begin{bmatrix} X_1^{(1)} & X_2^{(0)} & X_3^{(0)} \\ X_1^{(0)} & X_2^{(1)} & X_3^{(0)} \\ X_1^{(0)} & X_2^{(0)} & X_3^{(1)} \\ X_1^{(0)} & X_2^{(0)} & X_3^{(0)} \\ X_1^{(1)} & X_2^{(1)} & X_3^{(1)} \end{bmatrix}; \quad E y = \eta = \begin{bmatrix} \eta_2 \\ \eta_3 \\ \eta_5 \\ \eta_1 \\ \eta_8 \end{bmatrix}.$$

В этом случае полный план D^j и соответствующий вектор математических ожиданий наблюдений имеют вид

$$D^j = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}; \quad E y^j = \eta^j = (\eta_1, \dots, \eta_8)^T.$$

Для D^j матрица Φ_{123}^j может быть записана, например, следующим образом:

$$\Phi_{123}^j = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Тогда вектор истинных эффектов равен

$$B = (b_0, b_1, b_2, b_3, b_{12}, b_{13}, b_{23}, b_{123})^T = \frac{1}{8} \Phi_{123}^{jT} \eta^j$$

и справедлива модель A^f истинных эффектов (5) в точках D^f . Для доопределения ее в более широкой области положим

$$f_i^{(1)}(X_i) = x_i = \frac{X_i - \bar{X}_i}{\Delta X_i}, \quad i = 1, 2, 3,$$

где

$$\bar{X}_i = \frac{X_i^{(1)} + X_i^{(0)}}{2}, \quad \Delta X_i = \frac{X_{i \max} - X_i^{(0)}}{2}.$$

Тогда x_i будет в точках D^f принимать значения, совпадающие с компонентами вектора F_i^f . Значения x_1x_2 , x_1x_3 , x_2x_3 , $x_1x_2x_3$ в точках D^f , будут совпадать соответственно с компонентами векторов F_{12}^f , F_{13}^f , F_{23}^f , F_{123}^f . Тогда придем к расширенной модели A^f истинных эффектов:

$$E y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3. \quad (8)$$

В предположении, что $b_{12} = b_{23} = b_{123} = 0$, например, получим следующую модель A^0 истинных эффектов:

$$E y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2.$$

Параметры модели (8), т. е. компоненты вектора истинных эффектов, или просто истинные эффекты, допускают наглядную интерпретацию. Так, например, $b_0 = \frac{1}{8} \sum_{u=1}^8 \eta_u$, т. е. является средним по всем значениям $\eta_u = E y_u$.

Число

$$2b_3 = \frac{1}{4} \sum_{u=5}^8 \eta_u - \frac{1}{4} \sum_{u=1}^4 \eta_u$$

показывает, каково «влияние» фактора \mathcal{F}_3 , т. е. насколько среднее математических ожиданий наблюдений в точках, в которых фактор \mathcal{F}_3 принимает одно из значений, больше среднего математических ожиданий наблюдений для точек, в которых фактор \mathcal{F}_3 принимает другое значение.

Число

$$4b_{12} = \left\{ \frac{\eta_1 + \eta_5}{2} - \frac{\eta_2 + \eta_6}{2} \right\} - \left\{ \frac{\eta_3 + \eta_7}{2} - \frac{\eta_4 + \eta_8}{2} \right\}$$

показывает, насколько больше «влияние» фактора \mathcal{F}_1 при одном значении фактора \mathcal{F}_2 , чем «влияние» фактора \mathcal{F}_1 при другом значении фактора \mathcal{F}_2 .

Полная модель истинных эффектов (5) — тождество, в то же время справедливость всех остальных моделей, рассмотренных выше, может только постулироваться в приложениях в зависимости от характера изучаемого явления.

Литература к § 2: [6*].

§ 3. Факторная модель для качественных факторов

1. Модель истинных эффектов. Рассмотрим полный план D^f с числом опытов N^f для качественных факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$, входящих в план D . Запишем вектор \mathcal{R} истинных эффектов:

$$\mathcal{R} = \Psi_{1\dots k}^T \eta^f.$$

Пусть

$$x_i^j(u) = \begin{cases} 1, & \text{если фактор } \mathcal{F}_i \text{ поддерживается в } u\text{-м} \\ & \text{опыте плана } D \text{ на уровне } j; \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Обозначим

$$x_i^j = (x_i^j(1), \dots, x_i^j(N))^T, \quad x_i = [x_i^0 \dots x_i^{s_i-1}], \\ x_{i_1 \dots i_r} = x_{i_1} \otimes \dots \otimes x_{i_r}, \quad X_{1\dots k} = [Jx_1 \dots x_k x_{12} \dots x_{1\dots k}].$$

Для плана D^f используем аналогичные обозначения с верхним индексом f .

Для вектора наблюдений $y^f = (y_1, \dots, y_{N^f})^T$ в точках D^f выполняется тождество

$$Ey^f = X_{1\dots k}^f \mathcal{R}, \quad (9)$$

называемое *полной факторной моделью истинных эффектов* для качественных факторов (или *моделью C^f истинных эффектов*) при условии выполнения некоторых равенств для параметров, которые будут введены в п. 2.

Обозначим через X^0 и \mathcal{R}^0 соответственно части матрицы $X_{1\dots k}^f$ и вектора \mathcal{R} , отвечающие факторному множеству ω . В предположении о том, что компоненты вектора \mathcal{R} , не отвечающие множеству ω , равны нулю, модель (9) переписется следующим образом:

$$\eta^f = Ey^f = X^0 \mathcal{R}^0. \quad (10)$$

Коэффициенты модели (9) и, следовательно, модели (10) допускают удобную интерпретацию. Эта интерпретация становится очевидной при непосредственном рассмотрении определений эффектов уровней и эффектов взаимодействий уровней.

Пример 4. В качестве примера рассмотрим план $3 \times 2 // 4$:

$$D = \begin{matrix} & \mathcal{F}_1 & \mathcal{F}_2 \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \end{matrix}.$$

Полный план D^f для данного случая и матрица Ψ_{12} записаны в

примере 2. Матрица X_{12}^f имеет вид

$$X_{12}^f = \begin{bmatrix} J & x_1^f & x_2^f & & x_{12}^f \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

В предположении, например, что все эффекты взаимодействий уровней равны нулю, получим модель

$$E y^f = \beta_0 J + \beta_1^{(0)} x_1^{f0} + \beta_1^{(1)} x_1^{f1} + \beta_1^{(2)} x_1^{f2} + \beta_2^{(0)} x_2^{f0} + \beta_2^{(1)} x_2^{f1}.$$

Матрица коэффициентов X_{12} для плана D для этой модели имеет следующий вид:

$$X_{12} = \begin{bmatrix} J & x_1^0 & x_1^1 & x_1^2 & x_2^0 & x_2^1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

2. Дополнительные связи. В модели (9) матрица коэффициентов $X_{1\dots k}^f$ для полного плана не является матрицей полного ранга. Например, сумма столбцов, принадлежащих x_1 , дает J . Поэтому оценки параметров \mathcal{B} по методу наименьших квадратов даже для полного плана D^f не единственны. Однако справедлива система таких линейных равенств для этих параметров \mathcal{B} вида

$$H\mathcal{B} = 0, \tag{11}$$

что матрица

$$\begin{bmatrix} X_{1\dots k}^f \\ H \end{bmatrix}$$

будет матрицей полного ранга и никакая строка H не будет представима в виде линейной комбинации строк $X_{1\dots k}^f$. В этом случае для плана с матрицей коэффициентов $X_{1\dots k}^f$, т. е. для полного плана, при ограничениях на параметры (11) будут существовать единственные оценки МНК параметров \mathcal{B} . Матрица H с перечисленными свойствами может быть получена из коэффициентов следующей системы:

$$\sum_{n_i=0}^{s_j-1} \beta_i^{(n_i)} = 0, \quad \sum_{n_i=0}^{s_i-1} \beta_{ij}^{n_i n_j} = 0, \quad \sum_{n_j=0}^{s_j-1} \beta_{ij}^{n_i n_j} = 0, \dots$$

$$\dots, \quad \sum_{n_1=0}^{s_1-1} \beta_{1\dots k}^{n_1 \dots n_k} = 0, \dots, \quad \sum_{n_k=0}^{s_k-1} \beta_{1\dots k}^{n_1 \dots n_k} = 0, \tag{12}$$

$$i, j = 1, \dots, k, \quad i \neq j, \quad n_l = 0, \dots, s_l - 1.$$

Разобьем H на подматрицы в соответствии с разбиениями $X'_{1\dots k}$ и $\Psi_{1\dots k}$: $H = [0 \ H_1 \dots H_k \ H_{12} \dots H_{1\dots k}]$, где 0 — нулевой вектор-столбец.

Модель (9) с ограничениями (11) называется *полной факторной моделью истинных эффектов* для качественных факторов (или *моделью S^f истинных эффектов*).

Обозначим через H^0 подматрицу матрицы H , отвечающую факторному множеству ω . Модель (10) с ограничениями

$$H^0 \mathcal{F}^0 = 0$$

называется *факторной моделью истинных эффектов для множества ω* для качественных факторов (или *моделью S^0 истинных эффектов*).

Для модели S^0 выполняются следующие два условия:

1) Модель S^0 истинных эффектов содержит свободный член и члены со всеми эффектами уровней для любого фактора.

2) Если модель содержит хотя бы один член с эффектом взаимодействия некоторых уровней r факторов, то она содержит члены со всеми эффектами взаимодействий уровней любых n ($n \leq r$) из этих факторов.

Пример 5. Рассмотрим опять полный план 3×2 . Матрица H для него будет иметь следующий вид:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & H_1 & H_2 & H_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Литература к § 3: [6*, 99].

§ 4. Смешанная факторная модель

1. Модель истинных эффектов. Рассмотрим полный план D^f наряду с планом D для случая, когда часть факторов ($\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}$) имеет качественную структуру, а остальные факторы (F_{k_1+1}, \dots, F_k) — количественную структуру. Будем далее считать, что скалярный квадрат любого столбца любой матрицы главных эффектов или эффектов взаимодействий для полного плана D^f равен N^f . Для качественных факторов, как в п. 1.6 используем матрицы $\rho_i = \psi_i = [\psi_i^0, \dots, \psi_i^{s_i-1}]$ всех векторов эффектов уровней факторов \mathcal{F}_i ($i = 1, \dots, k_1$). Для количественных факторов, так же как и в п. 1.3, рассмотрим матрицы $\rho_j = \frac{1}{N^f} F_j^f$ векторов главных эффектов факторов \mathcal{F}_j ($j = k_1 + 1, \dots, k$) для плана D^f . В качестве векторов эффектов взаимодействия для качест-

венных факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_r}$ ($i_1, \dots, i_r \leq k_1$) используем матрицу $\rho_{i_1 \dots i_r}$ всех векторов эффектов взаимодействия уровней факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_r}$:

$$N^j \rho_{i_1 \dots i_r} = N^j \psi_{i_1 \dots i_r} = N^j \psi_{i_1} \otimes \dots \otimes N^j \psi_{i_r}.$$

Для количественных факторов $\mathcal{F}_{j_1}, \dots, \mathcal{F}_{j_l}$ ($j_1, \dots, j_l \geq k_1 + 1$) рассмотрим матрицу $\rho_{j_1 \dots j_l}$ эффектов взаимодействия факторов $\mathcal{F}_{j_1}, \dots, \mathcal{F}_{j_l}$:

$$N^j \rho_{j_1 \dots j_l} = F_{j_1 \dots j_l}^j.$$

Для качественных факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_r}$ ($i_1, \dots, i_r \leq k_1$) и количественных факторов $\mathcal{F}_{j_1}, \dots, \mathcal{F}_{j_l}$ ($j_1, \dots, j_l \geq k_1 + 1$) рассмотрим матрицу $\rho_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_l}$:

$$N^j \rho_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_l} = N^j \psi_{i_1 \dots i_r} \otimes F_{j_1 \dots j_l}^j.$$

Аналогично п. 1.6 справедливо следующее утверждение.

Любой вектор матрицы $\rho_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_l}$ есть вектор эффекта взаимодействия факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_r}, \mathcal{F}_{j_1}, \dots, \mathcal{F}_{j_l}$, и $\text{rg } \rho_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_l} = (s_{i_1} - 1) \dots (s_{i_r} - 1) (s_{j_1} - 1) \dots (s_{j_l} - 1)$.

Обозначим

$$\begin{aligned} P_{1 \dots k} &= \left[\frac{1}{N^j} J \rho_1 \dots \rho_k \rho_{12} \dots \rho_{1 \dots k} \right], \\ z_i &= x_i^j, \quad i = 1, \dots, k, \quad z_j = F_j^j, \quad i = k_1 + 1, \dots, k, \\ z_{i_1 \dots i_r j_1 \dots j_l} &= x_{i_1 \dots i_r}^j \otimes F_{j_1 \dots j_l}^j, \\ i_1, \dots, i_r &\leq k_1, \quad j_1, \dots, j_l \geq k_1 + 1, \\ Z_{1 \dots k} &= [J z_1 \dots z_k z_{12} \dots z_{1 \dots k}]. \end{aligned}$$

Обозначим также через $\theta = P_{1 \dots k}^T \eta^j$ вектор истинных эффектов смешанной факторной модели.

Для вектора наблюдений $y^j = (y_1, \dots, y_{N^j})^T$ в точках D^j выполняется тождество

$$E y^j = Z_{1 \dots k} \theta. \quad (13)$$

Для параметров смешанной модели (13) справедливы равенства, аналогичные равенствам (12), причем суммирование нужно производить только по индексам, не превосходящим k_1 . Если через V обозначить матрицу коэффициентов получаемой при этом системы, то

$$V \theta = 0. \quad (14)$$

Матрица

$$\begin{bmatrix} Z_{1 \dots k} \\ V \end{bmatrix}$$

есть матрица полного ранга, и никакая строка V непредставима в виде линейной комбинации строк $Z_{1..k}$.

Модель (13) с ограничениями (14) называется *смешанной полной факторной моделью истинных эффектов* (или *моделью G^1 истинных эффектов*).

Обозначим через Z^ω , V^ω и θ^ω соответственно части матриц $Z_{1..k}$, $V_{1..k}$ и вектора θ , отвечающие факторному множеству ω . Пусть компоненты вектора θ , не отвечающие множеству ω , равны нулю. Тогда справедлива модель

$$E y' = Z^\omega \theta^\omega \quad (V^\omega \theta^\omega = 0), \quad (15)$$

которая называется *смешанной факторной моделью истинных эффектов* для множества ω .

Модель (15) можно доопределить в более широкой области. В этом случае придем к модели

$$E y (X_1, \dots, X_k) = f_g^T (X_1, \dots, X_k) \theta^\omega \quad (V^\omega \theta^\omega = 0),$$

где $f_g^T (X_{1u}, \dots, X_{ku})$ совпадает с u -й строкой матрицы Z^ω .

2. Эквивалентность факторных моделей. Все перечисленные выше модели обладают рядом одинаковых свойств. Эти свойства касаются оценок регрессионных функций в точках полного плана, дисперсий этих оценок, а также вопросов существования единственных оценок метода наименьших квадратов.

Рассмотрим полное множество из n линейно независимых эффектов для факторного множества ω для полного плана D^1 и вектор J . Для дробного плана D рассмотрим также $n+1$ векторов, у которых координаты, отвечающие некоторой комбинации уровней факторов, равны координатам векторов, отвечающим тем же комбинациям уровней для плана D^1 . Эти векторы называются *векторами эффектов, порождаемыми планом D и множеством ω* .

Для фиксированного плана D существуют и притом единственные оценки МНК параметров для любой факторной модели для множества ω тогда и только тогда, когда векторы эффектов, порождаемые планом D и множеством ω , линейно независимы.

В случае выполнения приведенного необходимого и достаточного условия план D называется *невырожденным для факторного множества ω* .

Для невырожденного плана D для множества ω и заданного вектора наблюдений оценка регрессионной функции в любой фиксированной точке D^1 и дисперсия этой оценки совпадают для любых двух моделей для факторного множества ω .

3. Основные частные случаи. В этом пункте приведены несколько важных частных случаев факторных моделей. Первый из них — это модель первого порядка

$$E y = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \dots + \theta_k X_k.$$

Модель является частным случаем общей факторной модели A^*

для количественных факторов для факторного множества $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$, если все факторы — двухуровневые.

Второй случай — неполная квадратичная модель типа 1:

$$E y = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \dots + \theta_k X_k + \theta_{12} X_1 X_2 + \dots + \theta_{k-1, k} X_{k-1} X_k.$$

Модель является частным случаем общей факторной модели A^0 для количественных факторов для факторного множества $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k, \mathcal{F}_{12}, \dots, \mathcal{F}_{k-1} \mathcal{F}_k$, если все факторы двухуровневые.

Третий случай — неполная квадратичная модель типа 2:

$$E y = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \dots + \theta_k X_k + \theta_{11} X_1^2 + \dots + \theta_{kk} X_k^2.$$

Эта модель также является частным случаем общей факторной модели A^0 для количественных факторов для факторного множества $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$, если все факторы трехуровневые.

Четвертый случай — модель главных эффектов для k качественных факторов (частный случай модели C^0 для качественных факторов для факторного множества $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$). Такие модели рассматриваются, в частности, в рамках планирования с помощью так называемых *латинских планов*.

Пятый случай — частный вид последней модели — связан с задачей разбиения плана на блоки и возникает в следующей ситуации. Пусть план D для факторной модели

$$E y = \theta^T f(X_1, \dots, X_k)$$

с возможными ограничениями на параметры $T\theta = 0$ содержит N опытов. При этом может оказаться так, что все эти N опытов не могут быть реализованы в однородных условиях. Так, может случиться, например, если однородной партии сырья (в химическом эксперименте) хватает только на N_0 опытов ($N_0 < N$), если однородные участки земли в сельскохозяйственном эксперименте невелики и т. п. В таких случаях можно часто предположить аддитивность влияния указанного источника неоднородности. При этом вводится, по существу, еще один фактор \mathcal{F} , который называется *блоковым*. Число уровней этого фактора равно числу неоднородных партий сырья, участков и т. п. В этом случае модель может быть записана в следующем виде:

$$E y = \theta^T f(X_1, \dots, X_k) + \sum_{i=1}^r \beta^{(i)} x^{(i)}$$

с ограничениями на параметры:

$$T\theta = 0, \quad \sum_{i=1}^r \beta^{(i)} = 0,$$

где $\beta^{(i)}$ — эффект i -го уровня блокового фактора \mathcal{F} ,

$$x^{(i)} = \begin{cases} 1 & \text{для } i\text{-го уровня фактора } \mathcal{F}, \\ 0 & \text{для уровня } \mathcal{F}, \text{ отличного от } i\text{-го.} \end{cases}$$

Эта модель также является факторной для плана D' , содержащего все факторы плана D и блочный фактор \mathcal{F} . Для $k = 1$ такая модель рассматривается в рамках так называемого *неполноблочного планирования* для исследования влияния фактора \mathcal{F}_1 с большим числом уровней при разбиении планирования на однородные блоки. При небольших значениях k ($k > 1$) соответствующие модели и планы относятся к теории так называемых *многомерных схем*. Теория неполноблочных планов и многомерных схем составляет отдельную область комбинаторной математики и в данном издании не рассматривается.

Литература: к § 4: [6*, 57*, 126, 134*, 148*, 152, 175*],

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ФАКТОРНЫХ ПЛАНОВ

§ 1. Критерии оптимальности

1. Основные определения. Здесь в соответствии с п. 10.4.2 будут рассматриваться невырожденные планы (только для одного дополнительного свойства невырожденных планов будет сделано исключение). Будут различаться типы невырожденных планов для произвольной факторной модели для множества ω в соответствии со следующим определением.

Невырожденный план для факторной модели для множества ω содержащего все возможные элементы из $r - 1$ и менее факторов, называется *планом разрешающей способности* $2r - 1$. Невырожденный план для факторной модели для множества ω , содержащего все возможные элементы из $r - 1$ и менее факторов, называется *планом разрешающей способности* $2r$, если эффекты в модели для множества ω оцениваются несмещенно для модели для множества ω' , включающего все возможные элементы из r и менее факторов. В последнем случае план для множества ω' не обязательно невырожден. План разрешающей способности 3 называется также *планом главных эффектов*, а соответствующая ему модель — *моделью главных эффектов*.

Для невырожденных планов и факторных моделей без ограничения на параметры будем рассматривать общие критерии оптимальности: критерии D - и A -оптимальности, связанные со свойствами информационной матрицы плана, и критерии G - и Q -оптимальности, связанные со свойствами дисперсионной функции оценок МНК в исследуемой области. Для моделей с ограничениями на параметры будем рассматривать критерий D -оптимальности с информационной матрицей для редуцированной модели (см. п. 1.2.5). Поскольку свойство D -оптимальности плана инвариантно при невырожденных линейных преобразованиях вектора параметров модели, оно инвариантно и по отношению к выбору вектора новых параметров редуцированной модели.

Следующие два критерия (ортогональности и регулярности) также широко используются при планировании факторных экспериментов, хотя на первый взгляд они могут показаться не такими естественными со статистической точки зрения, как предыдущие.

В § 2 будет дано обоснование широкой применимости этих критериев.

План называется *ортогональным*, если ковариационная матрица вектора оценок параметров для этого плана имеет диагональный вид.

Пусть $\omega_{i_1 \dots i_t}^{j_1 \dots j_t}$ — число одновременных появлений j_1, \dots, j_t -х уровней соответственно факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_t}$. Условие

$$N^{t-1} \omega_{i_1 \dots i_t}^{j_1 \dots j_t} = \omega_{i_1}^{j_1} \dots \omega_{i_t}^{j_t} \quad \forall j_1, \dots, j_t \quad (1)$$

называется *условием пропорциональности частот для факторов* $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_t}$.

Говорят, что выполняется *условие пропорциональности частот для факторного множества* ω , если условие (1) выполняется для каждой группы факторов, отвечающих любым двум элементам множества ω .

Факторный план называется *регулярным* для факторного множества ω , если для этого множества ω выполняется условие пропорциональности частот.

Из приведенных определений непосредственно следует, что для регулярного плана для множества $\omega: \{\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k\}$ выполняется условие пропорциональности частот для любых двух факторов, а для множества $\omega: \{\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k, \mathcal{F}_1\mathcal{F}_2, \dots, \mathcal{F}_{k-1}\mathcal{F}_k\}$ — условие пропорциональности частот для любых четырех факторов.

Факторный план называется *регулярным мощности t* , если выполняется условие пропорциональности частот либо для любых t факторов, либо для $t/2 = k$ факторов (где k — общее число факторов в плане). Регулярный план мощности t одновременно является регулярным планом мощности $t-1$.

2. Эквивалентность критериев. Сначала рассматривается взаимосвязь критериев регулярности и ортогональности.

Для регулярного плана мощности $t = 2n$ можно выбрать полное множество взаимодействий вплоть до порядка $n-1$ попарно ортогональными. Для регулярного плана мощности $t = 2n+1$ можно выбрать полное множество взаимодействий вплоть до порядка $n-1$ попарно ортогональными, чтобы каждый из них был ортогонален ко всем взаимодействиям порядка n .

Таким образом, регулярный факторный план мощности t есть частный случай плана разрешающей способности $t+1$.

Следующие два условия эквивалентны:

- 1) план D регулярен для множества ω ;
- 2) для плана D можно выбрать полное множество главных эффектов и эффектов взаимодействий, отвечающих факторному множеству ω , попарно ортогональными.

Переобозначим вектор функций модели (10.4) как $f(X_1, \dots, X_k) = (1, f_1(X_1, \dots, X_k), \dots, f_l(X_1, \dots, X_k))^T$. И пусть $f^{(u)}(X_1, \dots, X_k) = f(X_{1u}, \dots, X_{ku})$ — значение, которое принимает вектор f в u -й точке плана D^l ($u = 1, \dots, N^l$). Вследствие результатов п. 10.1.5

функции в модели (10.4) могут быть нормированы так, чтобы выполнялось условие

$$\sum_{u=1}^{N^f} f_i(X_{1u}, \dots, X_{ku}) f_j(X_{1u}, \dots, X_{ku}) = N^f \delta_{ij}, \quad (2)$$

$$i, j = 0, 1, \dots, l; \quad f_0(X_{1u}, \dots, X_{ku}) \equiv 1.$$

Факторный план Q -оптимален на D^f для произвольной модели для множества ω тогда и только тогда, когда он A -оптимален для модели A^0 , удовлетворяющей условию (2).

Литература к § 1: [6*, 10*, 124, 174, 179*].

§ 2. Оптимальность регулярных планов

1. Критерий средней дисперсии. Пусть уровни $0, 1, \dots, (s_i - 1)$ фактора \mathcal{F}_i появляются в плане D соответственно $n_i^{(0)}, n_i^{(1)}, \dots, n_i^{(s_i-1)}$ раз. В этом случае $\sum_{j=0}^{s_i-1} n_i^{(j)} = N$. Введем коэффициент неравномерности j -го уровня фактора \mathcal{F}_i следующим образом:

$$U_i^{(j)} = \frac{N - n_i^{(j)}}{n_i^{(j)} (s_i - 1)}.$$

В том случае, когда j -й уровень фактора \mathcal{F}_i появляется в плане D более N/s_i раз, $U_i^{(j)} < 1$, если же менее N/s_i раз, то $U_i^{(j)} > 1$, и, наконец, когда j -й уровень фактора \mathcal{F}_i появляется в плане ровно N/s_i раз, имеем $U_i^{(j)} = 1$. Последнее соотношение сохраняется, в частности, для равномерных планов для любого уровня фактора.

Среднее значений $U_i^{(j)}$ по всем уровням фактора \mathcal{F}_i , равно

$$U_i = \sum_{j=0}^{s_i-1} \frac{U_i^{(j)}}{s_i} = \frac{N}{s_i (s_i - 1)} \sum_{j=0}^{s_i-1} \frac{1}{n_i^{(j)}} - \frac{1}{s_i - 1}$$

называется коэффициентом неравномерности фактора \mathcal{F}_i .

Для равномерных факторов (т. е. для факторов, у которых каждый уровень появляется одинаковое число раз) $U_i = 1$, для неравномерных факторов $U_i > 1$.

Рассмотрим регулярный план D по отношению к факторной модели для множества ω . Для этого плана средняя нормированная дисперсия по множеству D^f равна

$$\bar{\sigma}_a^2 = \sigma^2 \left\{ 1 + \sum_{i=1}^k (s_i - 1) U_i + \sum_{i_1 i_2}^k (s_{i_1} - 1)(s_{i_2} - 1) U_{i_1} U_{i_2} + \dots \right\}.$$

В равномерных регулярных планах $\bar{\sigma}_a^2 = \sigma^2 l$, где $l - 1$ — число степеней свободы всех главных эффектов и эффектов взаимодействия

ствий, отвечающих множеству ω , или, другими словами, l — число членов в репараметризованной модели.

Функция эффективности, связанная с критерием средней дисперсии в области D^f , записывается в виде $\varphi = l\sigma^2/\bar{\sigma}_a$. Поскольку $\varphi \leq 1$, эффективность, связанная с критерием Q -оптимальности на D^f выражается величиной $\varphi \cdot 100\%$. Неравенство $\varphi \leq 1$ справедливо только для факторных моделей и планов, как они определены в гл. 10. В связи с последним замечанием рассмотрим следующий пример.

Пример. В области $0 \leq X_i \leq 1$ ($i = 1, 2, 3$) рассмотрим план эксперимента

$$D = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

для модели

$$E y = b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3.$$

Этот план является D -оптимальным. Отсутствие свободного члена в модели делает ее «нефакторной». Дисперсии оценок регрессионной функции (отнесенных к σ^2) в восьми точках области D^f есть 1, 1, 1, 3/4, 3/4, 3/4, 3/4, 0. Средняя дисперсия, отнесенная к σ^2 , равна 6/8. Поэтому эффективность плана равна 133%.

2. D - и Q -оптимальность. Рассмотрим общую факторную модель (10.4) для количественных факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ для множества ω . Пусть D_i — D -оптимальный план с равной мерой в s_i точках на отрезке $[X_{i \min}, X_{i \max}]$ для модели

$$E y = b_0 + b_i^{(1)} f_i^{(1)}(X_i) + \dots + b_i^{(s_i-1)} f_i^{(s_i-1)}(X_i).$$

Регулярный факторный план для множества ω , в котором переменные X_i принимают s_i значений в точках планов D_i , будет D -оптимальным для модели (10.4) в области $X_{i \min} \leq X_i \leq X_{i \max}$ ($i = 1, \dots, k$) тогда и только тогда, когда он равномерен.

Регулярный факторный план для множества ω одновременно D - и Q -оптимальен в области D^f для произвольной факторной модели для множества ω тогда и только тогда, когда он равномерен.

Рассмотрим теперь смешанную факторную модель G° (10.13) для факторного множества ω для качественных факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}$ и количественных факторов $\mathcal{F}_{k_1+1}, \dots, \mathcal{F}_k$. Область планирования есть

$$\mathcal{F}_i = 0, 1, \dots, s_i - 1, \quad i = 1, \dots, k_1, \tag{3}$$

$$X_j \min \leq X_j \leq X_j \max, \quad j = k_1 + 1, \dots, k.$$

Регулярный факторный план для множества ω для количественных переменных X_i ($i = k_1 + 1, \dots, k$), принимающих s_i зна-

чений в точках планов D_i , и для качественных факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ D -оптимален для модели G^* (10.13) при наличии ограничений (10.14) в области (3) тогда и только тогда, когда он равномерен.

Если в рассматриваемых моделях $f_i^{(j)}(X_i)$ — полином степени j от X_i , то в качестве D -оптимальных планов D_i можно выбрать планы, в которых переменные X_i принимают s_i следующих значений: на концах отрезка $[X_{i,\min}, X_{i,\max}]$ и в корнях производной $(s_i - 1)$ -го полинома Лежандра.

Пример 1. Рассмотрим модель

$$E y = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_{11} X_1^2 + \theta_2 X_2 + \theta_3 X_3 + \theta_4 X_4 + \theta_5^{(0)} x_5^{(0)} + \theta_5^{(1)} x_5^{(1)}$$

и план

$$D_F = \begin{bmatrix} F_1 & F_2 & F_3 & F_4 & F_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

для количественных переменных X_1, X_2, X_3, X_4 и качественного фактора \mathcal{F}_5 в области

$$-1 \leq X_i \leq +1, \quad i = 1, \dots, 4, \quad x_5^{(0)}, x_5^{(1)} = \{0, 1\}.$$

План D_F есть регулярный равномерный план главных эффектов. После выбора значений количественных переменных в соответствии с результатами этого раздела он превращается в D -оптимальный для рассматриваемых модели и области:

$$D = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & x_5^{(0)} & x_5^{(1)} \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{5} & +1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ +1/\sqrt{5} & +1 & -1 & +1 & 1 & 0 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & 0 & 1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 & 1 & 0 \\ +1/\sqrt{5} & -1 & +1 & -1 & 0 & 1 \\ -1/\sqrt{5} & -1 & +1 & +1 & 1 & 0 \\ -1 & +1 & +1 & +1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Литература к § 2: [6*, 10*, 141, 144].

§ 3. Классификация регулярных планов

1. **Ортогональные таблицы.** Факторный план в N опытах с k факторами на s уровнях называется *ортогональной таблицей мощности t* и обозначается (N, k, s, t) , если для любых t факторов

все s^t различных комбинаций их уровней встречаются одинаковое число раз λ . Число λ называется *индексом таблицы*.

Если симметричный регулярный факторный план мощности t является также и равномерным, то для любых t факторов все s^t различных их комбинаций встречаются одинаковое число раз. Более того, справедливо следующее утверждение.

Симметричный равномерный регулярный s -уровневый k -факторный план в N опытах мощности t эквивалентен ортогональной таблице (N, k, s, t) .

Если для таблицы (N, k, s, t) выполняется условие $\lambda = s^t$ (l — целое), то такой план называется *гиперкубом мощности t* .

2. Латинские планы. Множество целых чисел $0, 1, \dots, s-1$, расположенных в виде $(s \times s)$ -матрицы, называется *квадратом размера s* . Квадрат называется *латинским*, если каждое целое встречается ровно один раз в каждой строке и в каждом столбце. Два квадрата одного и того же размера называются *ортогональными*, если при наложении их друг на друга каждая упорядоченная пара целых чисел встречается ровно один раз.

Существует пара ортогональных квадратов, называемых *стандартными*, таких, что им будет ортогонален любой латинский квадрат этого же размера. Первый из этих квадратов содержит первую строку из 0 , вторую — из 1 и т. д. Второй квадрат есть транспонированный первый квадрат. Число ортогональных латинских квадратов размера s не более чем $s-1$.

Множество $s-1$ попарно ортогональных латинских квадратов размера s называется *полным множеством ортогональных латинских квадратов*.

Вместе со стандартными квадратами полное множество ортогональных латинских квадратов образует множество из $s+1$ попарно ортогональных квадратов.

Если множество целых чисел одного из ортогональных латинских квадратов заменить латинскими буквами, а множество целых чисел другого латинского квадрата — греческими буквами, то такая пара ортогональных латинских квадратов называется *греко-латинским квадратом*. Система более чем из двух попарно ортогональных латинских квадратов называется *гипергреко-латинским квадратом*.

Множество целых чисел $0, 1, \dots, s-1$, расположенных в виде кубической решетки $(s \times s \times s)$, называется *кубом размера s* . Куб называется *латинским первого порядка*, если каждое целое встречается ровно s раз в каждой плоскости, параллельной некоторой грани куба. Два куба называются *ортогональными*, если при наложении их друг на друга каждая упорядоченная пара целых чисел встречается ровно s раз.

Аналогично стандартным квадратам существуют три попарно ортогональных стандартных куба таких, что им будет ортогонален любой латинский куб этого же размера первого порядка. Система из двух ортогональных латинских кубов называется *греко-латинским кубом*, а система более чем из двух попарно

ортогональных латинских кубов называется *гипергреко-латинским кубом*.

Максимальное число попарно ортогональных латинских кубов размера s первого порядка равно $s^2 + s - 2$. Вместе со стандартными кубами они образуют множество из $s^2 + s + 1$ ортогональных кубов.

Множество целых чисел $0, 1, \dots, s^2 - 1$, расположенных в виде кубической решетки ($s \times s \times s$), называется *латинским кубом размера s второго порядка*, если каждое целое встречается ровно один раз в каждой плоскости, параллельной некоторой грани куба.

Пример 2. Рассмотрим для $s = 3$ множество из четырех попарно ортогональных квадратов, из которых первые два — стандартные, а последние два — латинские:

0 0 0	0 1 2	0 1 2	0 2 1
1 1 1	0 1 2	1 2 0	1 0 2
2 2 2	0 1 2	2 0 1	2 1 0

Последние два квадрата можно представить в виде греко-латинского квадрата:

$a\alpha$	$b\gamma$	$c\beta$
$b\beta$	$c\alpha$	$a\gamma$
$c\gamma$	$a\beta$	$b\alpha$

Пример 3. Приведем еще в качестве примера греко-латинский куб размера 3 первого порядка, три параллельные плоскости которого для простоты изображения представим поочередно:

$a\alpha$	$a\alpha$	$a\alpha$	$c\beta$	$c\beta$	$c\beta$	$b\gamma$	$b\gamma$	$b\gamma$
$b\beta$	$b\beta$	$b\beta$	$a\gamma$	$a\gamma$	$a\gamma$	$c\alpha$	$c\alpha$	$c\alpha$
$c\gamma$	$c\gamma$	$c\gamma$	$b\alpha$	$b\alpha$	$b\alpha$	$a\beta$	$a\beta$	$a\beta$

3. Эквивалентность. Существование различных латинских планов тесно связано с существованием ортогональных таблиц и, таким образом, с существованием различных регулярных планов.

Существование множества из n ортогональных латинских квадратов размера s эквивалентно существованию ортогональной таблицы $(s^2, n + 2, s, 2)$.

Существование множества из n ортогональных латинских кубов размера s первого порядка эквивалентно существованию ортогональной таблицы $(s^3, n + 3, s, 2)$.

Идею доказательства этих утверждений, носящего конструктивный характер, для простоты рассмотрим на примере 2. Построим вместо каждого из четырех квадратов размера 3 вектор-столбец, записывая второй столбец квадрата под первым, а третий — под вторым. Это даст четыре столбца, образующих ортогональную таблицу $(9, 4, 3, 2)$ индекса 1, или гиперкуб

мощности 2:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Строки любой ортогональной таблицы $(9, 4, 3, 2)$ можно расположить таким образом, чтобы первые два ее столбца совпали с первыми двумя столбцами матрицы (4). Отсюда легко получить способ построения квадратов из примера 2.

Результаты этого пункта относились к случаям ортогональных таблиц мощности 2 и соответственно индексов 1 и s . Аналогично тому, как были определены латинские кубы первого порядка и стандартные кубы, можно дать определение латинских гиперкубов первого порядка и стандартных гиперкубов и установить эквивалентность существования множества из n ортогональных l -мерных гиперкубов размера s первого порядка и существования ортогональной таблицы $(s^l, n+l, s, 2)$ мощности 2 и индекса s^{l-2} ($l > 3$). Таким образом, концепция латинских гиперкубов первого порядка полностью описывает случай гиперкубов мощности 2.

Помимо рассмотренных выше случаев, известны соотношения эквивалентности между многими другими комбинаторными построениями, с одной стороны, и ортогональными таблицами или более общими случаями регулярных планов — с другой стороны.

Литература к § 3: [6*, 125, 157, 159, 179*].

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПЛАНЫ

В этой главе рассматривается один из частных случаев симметричных регулярных равномерных планов — геометрические планы. Теория построения таких планов содержит наиболее яркие аналитические методы, которые выделяются своим изяществом не только в теории факторного планирования, но и во всей теории планирования эксперимента. Немаловажно при этом, что геометрические и производящиеся от них планы использовались ранее и используются сейчас в подавляющем большинстве практических приложений.

§ 1. Расщепление степеней свободы в полном плане

1. Контрасты между множествами наблюдений. Пусть даны два множества наблюдений y_1, \dots, y_l и y_{l+1}, \dots, y_2 . Тогда вектор коэффициентов линейной функции наблюдений

$$y_1 + \dots + y_l - y_{l+1} - \dots - y_2, \quad 2l = N,$$

называется *контрастом* между этими двумя множествами наблюдений. Это определение согласуется с определением контраста в п. 10.1.3.

Если все N наблюдений разделены на q множеств по $N_1 = \dots = N/q$ наблюдений в каждом так, что никакое наблюдение не попало сразу в два множества, то имеется $C_q^2 = q(q-1)/2$ различных контрастов между этими множествами. Из них можно выбрать только $q-1$ независимых контрастов, например контрасты между любым фиксированным множеством и всеми остальными. Говорят, что *контрасты между этими множествами обладают $q-1$ степенями свободы*.

2. Конечные пространства. Рассмотрим симметричный полный план s^h , где $s = p^h$, p — простое и h — целое. В плане s^h каждому уровню фактора поставим в соответствие элемент поля Галуа $GF(s)$. При $h = 1$ поле Галуа $GF(p)$ образуется при помощи p классов вычетов по простому модулю p . При $h > 1$ поле Галуа $GF(p^h)$ образуется при помощи p^h классов вычетов по модулям p и P , где P — неприводимый полином степени h с коэффициентами в $GF(p)$. Каждый опыт с факторами $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$, зафиксиро-

рованными соответственно на уровнях χ_1, \dots, χ_h , будет отвечать точке k -мерного конечного евклидова пространства $EG(k, s)$. n -плоскость в $EG(k, s)$ содержит s^n точек, которые удовлетворяют $k - n$ линейно независимым уравнениям вида

$$a_{01} + a_{11}\chi_1 + \dots + a_{h1}\chi_h = 0,$$

$$a_{02} + a_{12}\chi_1 + \dots + a_{h2}\chi_h = 0,$$

• • •

$$a_{0, k-n} + a_{1, k-n}\chi_1 + \dots + a_{h, k-n}\chi_h = 0.$$

В частности, гиперплоскость в $EG(k, s)$ определяется уравнением

$$a_0 + a_1\chi_1 + \dots + a_h\chi_h = 0. \quad (1)$$

Если a_0 будет пробегать в выражении (1) все s возможных значений из $GF(s)$ при фиксированных значениях a_1, \dots, a_h , то получим пучок параллельных $(k-1)$ -плоскостей $P(a_1, \dots, a_h)$ в $EG(k, s)$. Числа a_1, \dots, a_h называются *координатами пучка* $P(a_1, \dots, a_h)$.

В $EG(k, s)$ нет двух гиперплоскостей пучка $P(a_1, \dots, a_h)$, имеющих общую точку, и через любую точку $EG(k, s)$ проходит точно одна гиперплоскость пучка $P(a_1, \dots, a_h)$. Пучок $P(a_1, \dots, a_h)$ параллельных гиперплоскостей в $EG(k, s)$ совпадает с пучком $P(\lambda a_1, \dots, \lambda a_h)$, где $\lambda \neq 0$. Однозначного представления пучков можно добиться считая, что первая *ненулевая* координата есть 1. Следовательно, координаты пучков можно рассматривать как однородные, поэтому множество всех различных пучков образуют конечную проективную геометрию $PG(k-1, s)$. Число различных точек в $PG(k-1, s)$ и, следовательно, число различных пучков параллельных гиперплоскостей $P(a_1, \dots, a_h)$ в $EG(k, s)$ равно $(s^h - 1)/(s - 1)$.

3. Природа степеней свободы в полном плане. При помощи пучка $P(a_1, \dots, a_h)$ все s^h наблюдений в $EG(k, s)$ естественно делятся на s множеств по s^{h-1} наблюдений в каждом по принципу соответствия s различным плоскостям пучка. Поскольку различные плоскости пучка не пересекаются и через любую точку $EG(k, s)$ проходит плоскость пучка, каждое наблюдение в соответствии с таким разбиением будет принадлежать одному и только одному множеству. В соответствии с терминологией п. 1 пучок параллельных плоскостей обладает $s-1$ степенями свободы, т. е. максимальное число независимых контрастов между множествами, порождаемыми этими пучками, равно $s-1$.

Пусть P_1 и P_2 — два различных пучка параллельных плоскостей в $EG(k, s)$. Тогда контраст между любыми двумя множествами, порождаемыми пучком P_1 , ортогонален контрасту между любыми двумя множествами, порождаемыми пучком P_2 .

Число различных пучков параллельных плоскостей равно $(s^h - 1)/(s - 1)$, и каждый пучок обладает $s-1$ степенями свободы. Поэтому общее число из $s^h - 1$ степеней свободы для всех

контрастов может быть расщеплено на $(s^k - 1)/(s - 1)$ множество, порождаемых пучками параллельных плоскостей, по $s - 1$ степеней свободы каждое, так, что контрасты, отвечающие степеням свободы одного множества, ортогональны контрастам, отвечающим степеням свободы другого множества. Для простоты в таких случаях говорят об *ортогональных степенях свободы*.

Контрасты, отвечающие различным пучкам параллельных плоскостей, имеют наглядную геометрическую интерпретацию. Предположим, что из всех координат пучка $P(a_1, \dots, a_k)$ только одна (для определенности первая) отлична от нуля. Тогда координаты контраста между любыми двумя плоскостями пучка $P(a_1, 0, \dots, 0)$ будут зависеть только от уровней фактора F_1 и, по определению, будут образовывать главный эффект этого фактора для полного плана s^k . Поскольку пучок параллельных плоскостей обладает $s - 1$ степенями свободы, пучок $P(a_1, 0, \dots, 0)$ порождает полное множество линейно независимых главных эффектов. В более общем случае справедлив следующий результат.

Если n координат a_{i_1}, \dots, a_{i_n} пучка $P(a_1, \dots, a_k)$ ненулевые, а остальные равны нулю, то контраст между любыми двумя плоскостями этого пучка есть эффект взаимодействия $(n - 1)$ -го порядка факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_n}$. Число различных пучков, образующих таким образом эффекты взаимодействия факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_n}$, равно $(s - 1)^{n-1}$. Все эти пучки порождают полное множество эффектов взаимодействия.

Пример 1. Рассмотрим полный план 3^2 . Уровням факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 поставим в соответствие элементы поля Галуа $GF(3)$: 0, 1, 2. Главные эффекты фактора \mathcal{F}_1 порождают пучок параллельных плоскостей $P(1, 0)$, главные эффекты фактора \mathcal{F}_2 порождают пучок $P(0, 1)$ и эффекты взаимодействия факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 порождают два пучка: $P(1, 1)$, $P(1, 2)$. Для вычисления главных эффектов и эффектов взаимодействий, порождаемых этими пучками, запишем значения, которые принимают в плане факторы \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_2 , а также суммы $\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$ и $\mathcal{F}_1 + 2\mathcal{F}_2$:

\mathcal{F}_1	\mathcal{F}_2	$\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$	$\mathcal{F}_1 + 2\mathcal{F}_2$
0	0	0	0
1	0	1	1
2	0	2	2
0	1	1	2
1	1	2	0
2	1	0	1
0	2	2	1
1	2	0	2
2	2	1	0

Каждую из трех плоскостей пучка $P(1, 0)$ составляют три опыта, в которых фактор \mathcal{F}_1 соответственно принимает значения 0, 1, 2. Поэтому два независимых эффекта фактора \mathcal{F}_1 можно записать, например, как контрасты между первой и второй и

между первой и третьей плоскостями. Аналогичное справедливо и для остальных трех пучков. Полученные таким образом контрасы имеют следующий вид:

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} \mathcal{F}_1 & & \mathcal{F}_2 & & \mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2 & & & \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & 0 & -1 & -1 & +1 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & 0 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & 0 & +1 & 0 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & +1 & 0 & 0 & +1 & -1 & -1 \\ 0 & +1 & +1 & 0 & -1 & -1 & +1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & +1 & 0 & +1 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & +1 & -1 & -1 & 0 & +1 \\ 0 & +1 & 0 & +1 & +1 & 0 & -1 & -1 \end{array} \right]$$

Литература к § 1: [6*, 117, 192].

§ 2. Геометрический метод построения дробных планов

1. Генераторы. Как и ранее, будем ставить в соответствие полному симметричному плану s^k точки конечного евклидова пространства $EG(k, s)$. Если координаты точки этого пространства записывать как (χ_1, \dots, χ_k) , система из l независимых уравнений

$$a_{1l}\chi_1 + \dots + a_{kl}\chi_k = 0,$$

(2)

$$a_{1l}\chi_1 + \dots + a_{kl}\chi_k = 0$$

с коэффициентами $a_{ij} \in GF(s)$ определяет подмножество из s^{k-l} точек $EG(ks)$ или полного плана s^k .

Дробный план для k s -уровневых факторов, состоящий из s^{k-l} точек, удовлетворяющих системе из l линейно независимых уравнений (2), называется *геометрическим*.

Равенства (2) называются *генерирующими соотношениями* геометрического плана, а пучки $P(a_{1l}, \dots, a_{kl})$, \dots , $P(a_{1l}, \dots, a_{kl})$ — *генераторами*. Поскольку пучки задаются своими координатами, то термины «генераторы» относят также и к координатам пучков. Пучки

$$P(\lambda_1 a_{11} + \dots + \lambda_l a_{1l}, \dots, \lambda_1 a_{k1} + \dots + \lambda_l a_{kl}),$$

где λ_i ($i = 1, \dots, l$) не равны одновременно нулю, называются *определяющими пучками* геометрического плана, задаваемого системой (2).

Для данного геометрического плана генераторы можно выбрать неоднозначно. Определяющие пучки можно представить неоднозначно, если первую из ненулевых координат считать равной единице. Таким образом, общее число различных определяющих пучков плана, задаваемого системой (2), равно $(s^l - 1)/(s - 1)$.

2. Процедура построения по заданным генераторам. Непосредственный выбор точек из $EG(k, s)$; удовлетворяющих системе (2), с помощью прямой подстановки крайне затруднителен. Более простой способ использует так называемые *элементарные преобразования матрицы* $A = \{a_{ij}\}$ ($i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, l$) коэффициентов системы (2), т. е. умножение строки на число, прибавление к некоторой строке линейной комбинации других строк и перестановку строк или столбцов. Матрица A путем элементарных преобразований может быть приведена к виду

$$\begin{bmatrix} g_{11} \dots g_{k-l,1} & 0 & 0 \dots s-1 \\ g_{1l} \dots g_{k-l,l} & s-1 & 0 \dots 0 \end{bmatrix}.$$

Введем следующее обозначение:

$$G = \begin{bmatrix} g_1^T \\ \vdots \\ g_l^T \end{bmatrix},$$

где

$$g_i^T = (g_{11}, \dots, g_{k-l,1}), \dots, g_l^T = (g_{1l}, \dots, g_{k-l,l}).$$

Векторы g_1, \dots, g_l называются *псевдогенераторами* геометрического плана, задаваемого системой (2).

Образуем теперь матрицу

$$C = \begin{bmatrix} I_{k-l} \\ G \end{bmatrix},$$

где I_{k-l} — единичная матрица порядка $k-l$. Тогда искомый план D может быть получен следующим образом:

$$D = D_{k-l}^f C^T, \quad (3)$$

где D_{k-l}^f — матрица полного плана s^{k-l} размера $s^{k-l} \times (k-l)$.

3. Связанные множества. Рассмотрим вектор ξ для плана D , задаваемого системой (2), с координатами, равными соответствующим координатам ξ^f , порождаемого пучком $P(a_1, \dots, a_k)$ в D^f . В этом случае говорят, что *контраст ξ^f в D^f порождает ξ в D* . Если $P(a_1, \dots, a_k)$ является определяющим пучком плана D , то D целиком лежит в одной из плоскостей

$$a_0 + a_1\chi_1 + \dots + a_k\chi_k = 0 \quad (4)$$

(при $a_0 = 0$) и не имеет общих точек с другими плоскостями (4) (при $a_0 \neq 0$). В этом случае ξ^f порождает в D вектор λJ . Вектор λJ порождает те и только те контрасты ξ^f , которые соответствуют определяющим пучкам плана D . В этом случае говорят, что *вектор λJ и векторы, порождаемые определяющими пучками плана D ,*

находятся в одном связанном множестве (относительно плана D). Относительно определяющих пучков плана D также говорят, что они находятся в одном связанном множестве. Более того, справедлив следующий результат.

Все $(s^k - 1)/(s - 1)$ пучков параллельных плоскостей в D^k делятся на $(s^{k-1} - 1)/(s - 1)$ связанных множеств по s^1 пучков в каждом и одно связанное множество из $(s^1 - 1)/(s - 1)$ определяющих пучков. В одно связанное множество с пучком P входят те и только те пучки, которые представимы в виде суммы пучка P и линейной комбинации определяющих пучков. Пучки одного и того же связанного множества порождают совпадающие пучки параллельных плоскостей в D . Пучки из различных связанных множеств порождают пучки параллельных плоскостей в D , обладающие ортогональными степенями свободы.

Геометрический смысл контрастов полного плана (см. п. 1.3) распространяется и на геометрический дробный план D , задаваемый системой (2).

Если план D включает все комбинации факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_k}$, или, что то же самое, среди определяющих пучков нет пучка, имеющего в качестве нулевых координат одновременно все координаты, отличные от a_{i_1}, \dots, a_{i_k} , то все пучки, соответствующие эффектам взаимодействия факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_k}$ в D^k , порождают пучки параллельных плоскостей в D , соответствующие полному набору эффектов взаимодействия этих же факторов в плане D .

Пример 2. Рассмотрим полный план 3^4 (план D^4) и план D из 9 точек, задаваемый двумя линейно независимыми уравнениями

$$\chi_1 + \chi_2 + 2\chi_3 = 0, \quad \chi_1 + 2\chi_2 + 2\chi_4 = 0.$$

Генераторами плана D будут точки $P(1, 1, 2, 0)$ и $P(1, 2, 0, 2)$. Четыре определяющих пучка: $P(1, 1, 2, 0)$, $P(1, 2, 0, 2)$, $P(1, 0, 1, 1)$, $P(0, 1; 1, -2)$ образуют связанное множество определяющих пучков. Для любого номера координаты пучка найдется определяющий пучок с нулевой координатой на этом месте. Поэтому в плане D никакие три фактора не имеют всех своих комбинаций (это становится очевидным с помощью простого подсчета числа этих комбинаций). Поскольку ни один определяющий пучок не имеет двух нулевых координат, для любой пары факторов план D включает все их комбинации. Это в свою очередь означает, что соответствующие пучки порождают полное множество эффектов взаимодействия для любой пары факторов. К аналогичному выводу можно прийти и по отношению к главным эффектам всех факторов.

Имеется четыре связанных множества неопределяющих пучков, каждое из которых содержит 9 пучков. Ниже приведены их координаты.

Связанные множества

Первое	Второе	Третье	Четвертое
(1, 0, 0, 0)	(0, 1, 0, 0)	(0, 0, 1, 0)	(0, 0, 0, 1)
(1, 2, 1, 0)	(1, 2, 2, 0)	(1, 1, 0, 0)	(1, 1, 2, 1)
(1, 1, 0, 1)	(1, 0, 0, 2)	(1, 2, 1, 2)	(1, 2, 0, 0)
(1, 0, 2, 2)	(1, 1, 1, 1)	(1, 0, 2, 1)	(1, 0, 1, 2)
(1, 1, 1, 2)	(0, 1, 2, 1)	(0, 1, 2, 2)	(0, 1, 1, 0)
(0, 1, 2, 0)	(1, 0, 2, 0)	(1, 1, 1, 0)	(1, 1, 2, 2)
(0, 1, 0, 1)	(1, 1, 0, 2)	(1, 2, 2, 2)	(1, 2, 0, 1)
(0, 0, 1, 1)	(1, 2, 1, 1)	(1, 0, 0, 1)	(1, 0, 1, 0)
(1, 2, 2, 1)	(0, 0, 1, 2)	(0, 1, 0, 2)	(0, 1, 1, 1)

4. Невырожденность и смещение оценок. При выборе модели, отвечающей факторному множеству ω и соответствующей заданному геометрическому плану, важным является получение условий, при которых этот план будет невырожденным. В силу результатов п. 10.4.2 эти условия связаны с фактом линейной независимости эффектов, порождаемых планом D и факторным множеством ω . Вследствие результатов п. 3 множество эффектов будет линейно независимым, если никакой из пучков, отвечающих факторному множеству ω , не является определяющим и никакие два из них не принадлежат одному и тому же связанному множеству.

Предположим, что с помощью плана D найдены оценки МНК параметров модели, содержащей эффекты, порождаемые не более чем одним пучком из каждого связанного множества. Интересным является вопрос о смещении этих оценок в том случае, когда, вопреки предположению, модель содержит дополнительные эффекты. В этом случае оценка коэффициента, соответствующего взаимодействию S будет, вообще говоря, смещенной. Это смещение будет ненулевым тогда и только тогда, когда в число дополнительных входят эффекты, находящиеся в одном связанном множестве с S .

Пример 3. Рассмотрим геометрический план $2^3/4$, задаваемый равенством $\chi_1 + \chi_2 + \chi_3 = 0$:

$$D_F = \begin{matrix} & \mathcal{F}_1 & \mathcal{F}_2 & \mathcal{F}_3 \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Для модели $Ey = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3$ ($X_i = \pm 1$) план переписывается в следующем виде:

$$D_X = \begin{matrix} & X_1 & X_2 & X_3 \\ \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Если, вопреки предположению, модель имеет вид, скажем, $Ey = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3$, то МНК-оценки \hat{B} вектора параметров $B = (b_0, b_1, b_2, b_3)$ будут смещены. Смещение

определяется с помощью равенства $E\hat{B} = B + AB_0$, где $B_0 = (b_{12}, b_{13})^T$ — вектор дополнительных параметров, и A — матрица смещения:

$$A = (X^T X)^{-1} X^T X_0, \quad X = \begin{bmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \end{bmatrix}, \quad X_0 = \begin{bmatrix} +1 & +1 \\ -1 & +1 \\ -1 & -1 \\ +1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} E\hat{b}_0 &= b_0, & E\hat{b}_2 &= b_2 - b_{13}, \\ E\hat{b}_1 &= b_1, & E\hat{b}_3 &= b_3 - b_{12}, \end{aligned}$$

что согласуется с результатами этого пункта, поскольку, помимо определяющего пучка $P(1, 1, 1)$, имеется три пары пучков, составляющих три связанных множества:

$$\begin{aligned} &P(1, 0, 0), \quad P(0, 1, 1), \\ &P(0, 1, 0), \quad P(1, 0, 1), \\ &P(0, 0, 1), \quad P(1, 1, 0). \end{aligned}$$

Литература к § 2: [6*, 118, 182].

§ 3. Обратная задача построения геометрических планов

1. Переформулировки обратной задачи. В предыдущем параграфе решалась задача построения геометрических планов при заданной системе (2) или, что то же самое, при заданных генераторах. На практике чаще всего возникает обратная задача поиска геометрического плана с заданным числом экспериментов, отвечающего линейно независимому множеству заданных эффектов, принадлежащих некоторому факторному множеству ω .

Более точно, будем называть *обратной задачей* задачу поиска плана из s^n экспериментов, отвечающих линейно независимому множеству главных эффектов факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ и заданных групп эффектов взаимодействия факторов:

$$\begin{aligned} &\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{j_1} \\ &\dots \\ &\mathcal{F}_{i_t}, \dots, \mathcal{F}_{j_t}. \end{aligned} \quad (5)$$

Обозначим через $\lambda_1(s-1), \dots, \lambda_t(s-1)$ числа степеней свободы соответствующих групп из (5). Пусть $\lambda = \lambda_1 + \dots + \lambda_t$.

Смежной системой по отношению к заданному множеству эффектов взаимодействий t групп факторов (5) называется система из λ уравнений

$$\begin{aligned} &a_{i_1 1} \chi_{i_1} + \dots + a_{j_1 1} \chi_{j_1} + (s-1) \chi_{k+1} = 0, \\ &a_{i_1 \lambda_1} \chi_{i_1} + \dots + a_{j_1 \lambda_1} \chi_{j_1} + (s-1) \chi_{k+\lambda_1} = 0, \\ &\dots \\ &a_{i_t 1} \chi_{i_t} + \dots + a_{j_t 1} \chi_{j_t} + (s-1) \chi_{k+\lambda-\lambda_t+1} = 0, \\ &\dots \\ &a_{i_t \lambda_t} \chi_{i_t} + \dots + a_{j_t \lambda_t} \chi_{j_t} + (s-1) \chi_{k+\lambda} = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где строки матрицы

$$\begin{bmatrix} a_{i_v 1} \dots a_{j_v 1} \\ \dots \\ a_{i_v \lambda_v} \dots a_{j_v \lambda_v} \end{bmatrix}, \quad v = 1, \dots, t,$$

есть однородные координаты всех точек конечной проективной геометрии с ненулевыми координатами.

Обратная задача может ставиться как задача нахождения системы (2), задающей s^n ($n = k - 1$) точек в $EG(k, s)$, с требуемыми свойствами. Другая эквивалентная переформулировка этой задачи состоит в нахождении системы (2), задающей совместно со смежной системой (6) s^n точек в $EG(k + \lambda, s)$ для факторов $F_1, \dots, F_{k+\lambda}$.

Еще одна переформулировка состоит в следующем. Поставим в соответствие факторам $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ из факторного множества ω точки конечной проективной геометрии $PG(n - 1, s)$. Говорят, что соответствующие точки из $PG(n - 1, s)$ заняты факторами $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$. Говорят также, что точка $\chi \in PG(n - 1, s)$ занята взаимодействием факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_t}$, если существует линейная комбинация (с ненулевыми коэффициентами из $GF(s)$) точек из $PG(n - 1, s)$, занятых факторами $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_t}$, совпадающая с χ .

Если для заданного факторного множества ω факторам из этого множества поставить в соответствие точки конечной проективной геометрии $PG(n - 1, s)$ так, чтобы ни одна из точек $PG(n - 1, s)$ не была занята более одного раза факторами и взаимодействиями факторов, отвечающим множеству ω , то такое соответствие называется *регулярным*.

В соответствии с результатами предыдущего параграфа можно переформулировать обратную задачу следующим образом: для заданных n и факторного множества ω построить регулярное соответствие факторов из этого множества и точек конечной проективной геометрии $PG(n - 1, s)$.

Аналитическое решение этой задачи неизвестно. Поэтому все известные методы ее решения используют в той или иной форме прямой или направленный перебор, что при возрастании размерности задачи приводит к значительным вычислительным трудностям.

Различные частные методы построения регулярных планов рассматривались в работах С. Аддельмана, Г. Бокса, Н. Дрейпера, К. Дэниеля, Т. Митчела, Дж. Хантера и др.

Из частных методов в § 4 даются способы построения гиперкубов мощности t (при этом свободными от перебора являются только методы построения гиперкубов мощности 2); в п. 2 приведен один из изящных методов решения обратной задачи (использующий перебор), представляющий большой интерес для приложений.

2. Компромиссные планы. В данном пункте приведено три класса так называемых *компромиссных симметричных факторных планов Аддельмана*, которые являются регулярными геометрическими планами для множества ω , содержащего, помимо всех факторов, некоторые пары факторов.

Первый класс планов отвечает факторному множеству ω , содержащему k факторов и все пары факторов среди заданных k_0 факторов. Эти заданные k_0 факторов называются *взаимодействующими*. Всем точкам $PG(n-1, s)$ поставим в соответствие $(s^n - 1)/(s - 1)$ факторов. В качестве взаимодействующих факторов выберем те, которым отвечают точки $PG(n-1, s)$, удовлетворяющие условию: не существует нетривиальной линейной комбинации никаких четырех (или менее) этих точек, равной нулю. В этом случае главные эффекты и двухфакторные эффекты взаимодействий взаимодействующих факторов образуют линейно независимое множество контрастов. Вычеркнем те точки $PG(n-1, s)$, которые представляются в виде линейной комбинации каких-либо двух точек, занятых взаимодействующими факторами. Полученное соответствие будет регулярным.

Пример 4. Рассмотрим случай $s=2, n=3$. Каждой из семи точек $PG(2, 2)$ поставим в соответствие факторы F_1, \dots, F_7 :

$$F_1 \leftrightarrow (100), \quad F_2 \leftrightarrow (010), \quad F_3 \leftrightarrow (001), \quad F_4 \leftrightarrow (110), \\ F_5 \leftrightarrow (101), \quad F_6 \leftrightarrow (011), \quad F_7 \leftrightarrow (111).$$

В качестве взаимодействующих факторов выберем, например, \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_6 . Сумма соответствующих им точек есть (111). Поэтому точку (111) и соответствующий ей фактор \mathcal{F}_7 следует вычеркнуть. Полученный план

$$D = \begin{bmatrix} F_1 & F_2 & F_3 & F_4 & F_5 & F_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

отвечает линейно независимому множеству главных эффектов факторов $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_6$ и эффекта взаимодействия факторов \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_6 .

Второй класс компромиссных планов отвечает множеству ω , состоящему из факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$, всех пар факторов среди k_0 заданных и всех пар факторов среди $k - k_0$ остальных факторов. Всем точкам $PG(n-1, s)$ поставим в соответствие $(s^n - 1)/(s - 1)$ факторов. В качестве первого множества взаимодействующих факторов выберем те, которым отвечают точки $PG(n-1, s)$, удовлетворяющие условию: не существует нетривиальной линейной комбинации никаких четырех (или менее) этих точек, рав-

пой нулю. Вычеркнем те точки $PG(n-1, s)$, которые представляются в виде линейной комбинации каких-либо двух точек $PG(n-1, s)$, занятых взаимодействующими факторами. Из оставшихся точек выберем те, которые удовлетворяют двум требованиям: не существует нетривиальной линейной комбинации никаких четырех (или менее) этих точек, равной нулю; не существует нетривиальной линейной комбинации никаких двух из них, дающей какую-либо линейную комбинацию каких-либо двух точек, занятых первыми взаимодействующими факторами.

Пример 5. Построим план для шести трехуровневых факторов в 81 опыте, который соответствует множеству ω , состоящему из шести факторов, трех пар факторов среди первых трех факторов и трех пар факторов среди последних трех факторов. Для этого поставим в соответствие всем точкам $PG(3, 3)$ 40 трехуровневых факторов. Выберем точки (1000), (0100), (0010) в качестве первых взаимодействующих факторов. Эти точки, а также все их линейные комбинации не могут входить во второе множество взаимодействующих факторов. В то же время точки (0001), (1110), (1121) могут быть заняты факторами второго множества, и никакая четвертая точка не может быть занята факторами из второго множества.

Третий класс планов отвечает факторному множеству ω , состоящему из факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ и всех пар факторов, среди которых находится по крайней мере один из k_0 заданных. Всем точкам $PG(n-1, s)$ поставим в соответствие $(s^n - 1)/(s - 1)$ факторов. В качестве множества точек $PG(n-1, s)$, занятых заданными k_0 факторами, выберем те, для которых выполняется условие: не существует нетривиальной линейной комбинации никаких четырех (или менее) этих точек, равной нулю. Вычеркнем те точки $PG(n-1, s)$, которые являются линейными комбинациями трех из занятых. Из остальных точек выберем те, которые удовлетворяют требованию: не существует нетривиальной линейной комбинации двух из них и двух из k_0 занятых точек, равной нулю. Полученное соответствие будет регулярным.

Пример 6. Построим двухуровневый план в 64 опытах, отвечающий факторному множеству ω , состоящему из 11 факторов и всех пар факторов, среди которых находится по крайней мере один из первых четырех. Для этого поставим в соответствие всем точкам $PG(5, 2)$ 63 двухуровневых фактора. Выберем в качестве первых четырех точек $PG(5, 2)$ точки (100000), (010000), (001000), (000100). В этом случае исключим из дальнейшего рассмотрения все точки, у которых две последние координаты равны нулю, а среди первых четырех имеется по крайней мере одна нулевая координата. Из оставшихся точек следующие семь удовлетворяют всем сформулированным требованиям: (000010), (000001), (000011), (111100), (111110), (111101), (111111).

3. Необходимые условия. В ситуации, когда неизвестен аналитический метод решения обратной задачи, особый интерес

представляет получение необходимых и достаточных условий существования решения этой задачи.

Конструктивные результаты, связанные с достаточными условиями существования, в настоящее время неизвестны.

Тривиальное необходимое условие можно получить с помощью простого подсчета суммарного числа λ степеней свободы, отвечающих заданному множеству главных эффектов факторов и эффектов взаимодействий. При этом решение обратной задачи невозможно, если $\lambda \geq s^n - 1$. Еще одно необходимое условие справедливо для двухуровневых планов.

Если для заданного множества эффектов существует регулярный двухуровневый план в 2^n опытах, то никакая линейная комбинация коэффициентов уравнений смежной системы не содержит $2^n - 2$ или $2^n - 3$ ненулевых коэффициентов.

Пример 7. Наиболее простым примером для двухфакторных эффектов взаимодействий, показывающим, что это условие не является достаточным, является задача построения регулярного геометрического плана в 2^4 опытах для шести двухуровневых факторов и следующих шести их взаимодействий (указаны только номера взаимодействующих факторов): 1—2, 1—3, 2—3, 4—5, 4—6, 5—6.

Литература к § 3: [6*, 95, 102].

§ 4. Частные методы построения

1. Критерии существования гиперкубов мощности t . Рассмотрим геометрический план D , задаваемый системой (2).

Необходимое и достаточное условие того, что s^{h-t} точек, удовлетворяющих системе из l линейно независимых уравнений (2), образуют гиперкуб мощности t , состоит в том, что не существует нетривиальной линейной комбинации уравнений (2), содержащей менее $t + 1$ ненулевых коэффициентов.

Следующие четыре утверждения эквивалентны:

1) *существует такая матрица $C = \{c_{ij}\}$ размера $k \times (k - l)$ ($c_{ij} \in GF(s)$, $s = p^h$, p — простое), что любая ее подматрица размера $t \times (k - l)$ имеет ранг t .*

2) *Существуют такие k точек в проективной геометрии $PG(k - l - 1, p^h)$, что никакие t из них не лежат в пространстве размерности не выше чем $t - 2$.*

3) *Существует такая система l уравнений вида (2), что не существует нетривиальной линейной комбинации уравнений, содержащей менее $t + 1$ ненулевых коэффициентов.*

4) *Существует такой геометрический план D , что среди определяющих пучков нет таких, которые содержат менее $t + 1$ ненулевых координат.*

Идея доказательства эквивалентности этих утверждений основана на получении общих псевдогенераторов. Ниже дан конструктивный план построения псевдогенераторов геометрического плана с использованием матрицы C .

Пусть выполняется утверждение 1), и пусть ранг матрицы $C = \{c_{ij}\}$ равен n' ($t \leq n' \leq n$). В матрице C выберем n' независимых строк (без ограничения общности будем считать, что этими строками являются последние n' строк C). Тогда каждая строка c_i ($i = 1, \dots, k - n'$) матрицы C представляется в виде линейной комбинации строк c_i ($i = k - n' + 1, \dots, k$) этой матрицы:

$$\begin{aligned} c_1 &= \lambda_{11}c_{k-n'+1} + \dots + \lambda_{1n'}c_k, \\ &\dots \\ c_{k-n'} &= \lambda_{k-n',1}c_{k-n'+1} + \dots + \lambda_{k-n',n'}c_k. \end{aligned}$$

Матрица $\Lambda = \{\lambda_{ij}\}$ ($i = 1, \dots, k - n'$; $j = 1, \dots, n'$) будет представлять собой матрицу псевдогенераторов геометрического плана. Как и в п. 2.2, можно указать более простую процедуру построения плана с помощью матрицы C . Геометрический план D , образующий гиперкуб мощности t , можно задать в этом случае следующим образом:

$$D = D_n^t C^T,$$

где D_n^t — матрица полного плана s^n размера $s^n \times n$.

2. Гиперкубы мощности 2. В этом пункте указан способ Фишера — Рао построения гиперкубов мощности 2. Пусть $s = p^h$ (p — простое). Тогда существует гиперкуб мощности 2 — ортогональная таблица $(s^n, (s^n - 1)/(s - 1), s, 2)$. Псевдогенераторами этого плана являются все точки конечной проективной геометрии $PG(n - 1, s)$, содержащие не менее двух ненулевых координат.

3. Проблема упаковки. Так же, как и в общем случае решения обратной задачи построения геометрического плана, для гиперкубов мощности t ($t > 2$) не существует достаточно общих методов построения. Решения для различных частных случаев получены в работах Р. Бозе, Б. Гулати, Е. Коуниаса, К. Рао, Дж. Сривастава, Р. Фишера и многих других авторов.

Ниже приведены несколько частных случаев, представляющих интерес для приложений.

Множество из k точек проективной геометрии $PG(n - 1, s)$ называется (k, t) -множеством, если никакие t из них не лежат в пространстве размерности не выше чем $t - 2$.

В соответствии с результатами п. 4.1 существование (k, t) -множества в $PG(n - 1, s)$ влечет за собой существование гиперкуба мощности t — ортогональной таблицы (s^n, k, s, t) .

(k, t) -множество называется *полным*, если не существует (k', t) -множества с $k' > k$. Число k , отвечающее полному (k, t) -множеству в $PG(n - 1, s)$, обозначается через $k_t(n, s)$.

Проблема нахождения полных (k, t) -множеств и значений $k_t(n, s)$ носит название *проблемы упаковки*.

В соответствии с результатами п. 2

$$k_2(n, s) = (s^n - 1)/(s - 1),$$

и псевдогенераторы соответствующего плана задаются строками матрицы G_s , представляющими собой все точки конечной проективной геометрии $PG(n-1, s)$, содержащие не менее двух ненулевых координат.

Для двухуровневых гиперкубов мощности 3 справедливо следующее равенство:

$$k_3(n, 2) = 2^{n-1}.$$

Псевдогенераторы соответствующего плана задаются матрицей

$$G = [G_2 \quad \xi],$$

где ξ — вектор-столбец, представляющий собой сумму единичного столбца и всех столбцов матрицы G_2 .

Для гиперкубов мощности 4 приведем три результата:

- 1) а) $k_4(4, 2) = 5$; б) $k_4(5, 2) = 6$; в) $k_4(6, 2) = 8$;
 г) $k_4(7, 2) = 11$.

Соответствующие множества псевдогенераторов есть:

- а) 1111; б) 11111;
 в) 111100, 110011;
 г) 1111000, 1100110, 0110101, 1111111.

2) $k_4(4, s) = \max(5, s + 1)$.

Для $s = 2, 3, 4$ один псевдогенератор имеет вид 1111; для $s > 4$ матрица C (см. п. 1), образующая соответствующий план, имеет вид

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & a & a^2 & a^3 \\ 1 & a^2 & a^4 & a^6 \\ 1 & a^3 & a^6 & a^9 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & a^{s-2} & a^{2s-4} & a^{3s-6} \end{bmatrix},$$

где a — примитивный элемент $GF(s)$.

3) $k_4(5, 3) = 11$.

Псевдогенераторы соответствующего плана задаются строками матрицы

$$G = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Проблема упаковки связана также с так называемой *задачей смешивания*, или *задачей разбиения факторного планирования на ортогональные блоки*.

Рассмотрим полный факторный план s^m и n независимых пучков параллельных плоскостей

$$P_i = P(a_{i1}, \dots, a_{im}), \quad i = 1, \dots, n. \quad (7)$$

Степени свободы, принадлежащие пучкам (7), будем интерпретировать как степени свободы, принадлежащие некоторым факторам Φ_1, \dots, Φ_n , уровни которых соответствуют различным плоскостям пучков (7).

Пучок

$$P(\lambda_1 a_{11} + \dots + \lambda_n a_{n1}, \dots, \lambda_1 a_{1m} + \dots + \lambda_n a_{nm})$$

обладает степенями свободы, соответствующими эффектам взаимодействия факторов $\Phi_{i_1}, \dots, \Phi_{i_r}$, принадлежащих множеству факторов Φ_1, \dots, Φ_n в том и только в том случае, если ненулевыми являются коэффициенты $\lambda_{i_1}, \dots, \lambda_{i_r}$ и только они. Все такие степени свободы можно трактовать как степени свободы, отвечающие главным эффектам некоторого s^n -уровневого блокового фактора \mathcal{F} . (Такой фактор может быть построен, например, с помощью операции восстановления, описываемой в п. 13.2.3.) Рассмотрим план D_s одним из факторов которого является блоковый фактор \mathcal{F} , а другие факторы порождаются различными пучками параллельных плоскостей.

Если какой-либо главный эффект или эффект взаимодействия для плана D представляется в виде линейной комбинации главных эффектов блокового фактора, то соответствующий эффект называется *смешанным* (с блоками). Остальные эффекты называются *несмешанными* (с блоками).

Регулярный план в s^m опытах, разбитый описанным образом с помощью фактора \mathcal{F} на s^n ортогональных блоков каждый размером s^{m-n} , обозначается через (s^m, s^n) .

Максимальное число факторов в плане вида (s^m, s^n) при заданном размере блоков s^{m-n} при условии смешивания всех главных эффектов и эффектов взаимодействий вплоть до t -факторных включительно равно максимальному числу таких точек конечной проективной геометрии $PG(m-n-1, s)$, что никакие t из них не лежат в пространстве размерности не выше чем $t-2$.

Это максимальное число равно $t_1(m-n, s)$ и соответствует полному (k, t) -множеству в $PG(m-n-1, s)$.

Аналогичная постановка задачи возможна и для несимметричных факторных планов. Задача смешивания рассматривалась в работах Р. Бозе, К. Кишена, К. Непра, К. Рао, Дж. Сривастава, Р. Фишера и многих других авторов. Одними из последних в этой области являются работы [130], [180], [190].

Литература к § 4: [6*, 117, 118, 130, 180, 182, 190].

НЕГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПЛАНЫ

В этой главе рассматриваются достаточно общие способы построения различных планов, которые не являются геометрическими.

§ 1. Симметричные регулярные планы

1. Ортогональные таблицы мощности t . В этом и следующем пунктах указывается ряд условий, при которых существуют некоторые виды ортогональных таблиц, и приводятся результаты, касающиеся нахождения максимального числа $f(N, s, t)$ факторов, которые могут входить в ортогональную таблицу (N, k, s, t) .

Первые два результата относятся к существованию ортогональных таблиц индекса 1 (методы их построения описаны в работе [124]).

Пусть $s = p^h$ (p — простое, h — целое). Тогда при $s > t$ существует ортогональная таблица $(s^t, s + 1, s, t)$ и при $s \leq t$ существует ортогональная таблица $(s^t, t + 1, s, t)$. При этом

$$s + 1 \leq f(s^t, s, t) \leq s + t - 1, \text{ если } s = 2^h > t;$$

$$s + 1 \leq f(s^t, s, t) \leq s + t - 2, \text{ если } s = p^h > t > 3, p > 2;$$

$$f(s^t, s, t) = t + 1, \text{ если } s \leq t;$$

$$f(s^3, s, 3) = s + 1, \text{ если } s = p^h.$$

Пусть $s = 2^h$ ($h > 1$); тогда существует ортогональная таблица $(s^3, s + 2, s, 3)$. При этом $f(s^3, s, 3) = s + 2$.

Следующий результат показывает, как может быть построена ортогональная таблица мощности t из ортогональной таблицы мощности $t - 1$.

Пусть S — упорядоченное множество из s элементов, которые обозначаются через $0, 1, \dots, s - 1$. Для любого t рассмотрим s^t различных упорядоченных t -мерных вектор-строк из элементов множества S . Эти векторы могут быть разделены на s^{t-1} множеств, каждое из которых состоит из s t -мерных векторов, представляющих собой полное множество циклических перестановок элементов S . Обозначим эти множества через S_i ($i = 1, \dots, s^{t-1}$).

Пусть существует такая матрица из r столбцов с элементами из S

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nr} \end{bmatrix} \quad (n = \lambda s^{t-1}), \quad (1)$$

что в каждой подматрице размера $n \times t$ число строк, принадлежащих каждому S_i , равно λ . Тогда можно построить ортогональную таблицу $(\lambda s^t, r, s, t)$. Если матрица (1) к тому же есть ортогональная таблица мощности $t-1$, то можно построить ортогональную таблицу $(\lambda s^t, r+1, s, t)$.

Ниже приведено конструктивное доказательство этого утверждения. Множества S_i ($i = 1, \dots, s^{t-1}$) могут быть, в частности, определены следующим образом. Рассмотрим s^{t-1} различные $(t-1)$ -мерные вектор-строки из элементов множества S . Пусть первые t -мерные вектор-строки каждого множества S_i есть (j, i_1, \dots, i_{t-1}) , где (i_1, \dots, i_{t-1}) — одна из s^{t-1} различных $(t-1)$ -мерных строк, и j — фиксированный произвольный элемент множества S . Остальные $(s-1)$ -мерные строки каждого множества S_i образуются из первой циклической перестановки элементов множества S .

Ортогональная таблица $(\lambda s^t, r, s, t)$ строится следующим образом. Первые ее λs^{t-1} строк образуются из матрицы (1). К матрице (1) присоединяются еще $s-1$ матриц, образованных из (1) циклическими перестановками элементов множества S . Если матрица (1) — ортогональная таблица мощности $t-1$, то можно добавить к полученной таблице $(\lambda s^t, r, s, t)$ дополнительный столбец, в котором первые λs^{t-1} элементов равны 0, вторые λs^{t-1} элементов равны 1 и т. д. Таким образом будет построена ортогональная таблица $(\lambda s^t, r+1, s, t)$.

2. Ортогональные таблицы мощности 2. В этом пункте приведены два результата, относящиеся к существованию ортогональных таблиц мощности 2 для случая, когда $s = p^n$, где p — простое (методы их построения описаны в работах [103, 118]). Случай, когда s не является простым числом или степенью простого числа, традиционно рассматривается в терминах ортогональных латинских квадратов (см. п. 3). Случай $s = 2$ также рассматривается отдельно (в п. 4).

Пусть $s = p^v$, $\lambda = p^u$ (p — простое, v, u — целые). Тогда существует ортогональная таблица $(\lambda s^2, k, s, 2)$, где

$$k = \frac{\lambda (s^{c+1} - 1)}{s^c - s^{c+1}} + 1, \quad c = \left[\frac{u}{v} \right].$$

Пусть $s = p^h$ (p — простое, h — целое). Тогда существует ортогональная таблица $(2s^n, k, s, 2)$, где

$$k = \frac{2(s^n - 1)}{s - 1} - 1.$$

Приведенные результаты относятся к случаям, наиболее важным для приложений. Более частные случаи рассматриваются в работах Б. Гулати, С. Коуниаса, М. Масуяма, Е. Сейдена, Дж. Сриваставы, Р. Чакраварти и др.

3. Ортогональные латинские квадраты. Как следует из результатов п. 11.3.3, существование множества из n попарно ортогональных латинских квадратов размера s эквивалентно существованию ортогональной таблицы $(s^2, n+2, s, 2)$ мощности 2. В п. 12.4.2 был дан способ построения ортогональной таблицы $(s^2, s+1, s, 2)$ (что эквивалентно полному множеству попарно ортогональных латинских квадратов размера s) при $s = p^h$ (p — простое). В случае, когда s не является простым числом или степенью простого числа, неизвестно, существует ли полное множество ортогональных латинских квадратов в общем случае. Известно, в частности, что не существует полного множества ортогональных латинских квадратов, когда $s = 6, 14, 21, 22$. Более того, известно, что не существует даже двух ортогональных латинских квадратов размера 2 и 6. Однако, за исключением этих двух случаев, греко-латинские квадраты существуют для любого s . Проблема построения ортогональных латинских квадратов в случае, когда $s \neq p^h$ (p — простое), рассматривалась в работах Е. Паркера, Е. Сейдена и других авторов. Многие конструкции выполнены с помощью ЭВМ. Однако не построено ни одного множества ортогональных латинских квадратов, близкого к полному.

4. Двухуровневые планы. Для ортогональной таблицы $(\lambda 2^k, k, 2, 2)$ мощности 2 рассмотрим матрицу

$$[JF_1F_2 \dots F_k], \quad (2)$$

где F_i — вектор-столбец главного эффекта фактора \mathcal{F}_i . Умножением на константу любой вектор F_i можно привести к такому виду, чтобы все его элементы были равны -1 или $+1$. Будем далее считать, что все столбцы матрицы (2) удовлетворяют этому условию. В том случае, когда $\lambda = 2^n$, т. е. ортогональная таблица представляет собой гиперкуб, можно построить ортогональную таблицу $(2^{n+2}, 2^{n+2} - 1, 2, 2)$ геометрическим методом. Тогда матрица (2) будет представлять собой квадратную матрицу с ортогональными столбцами и состоять из -1 и $+1$.

Квадратная матрица H_N порядка N с элементами -1 и $+1$ называется *матрицей Адамара*, если $H_N^T H_N = N I_N$. Любая матрица Адамара путем умножения соответствующих строк и столбцов на -1 (что опять приводит к матрице Адамара) может быть приведена к нормализованному виду, т. е. к матрице, у которой первый столбец и первая строка состоят только из $+1$. Очевидно, что нормализованная матрица Адамара H_{k+1} будет соответствовать матрице (2) при $N = k + 1$ и, следовательно, будет эквивалентна ортогональной таблице $(k + 1, k, 2, 2)$. Поскольку $N = \lambda \cdot 2^2$, для матрицы Адамара H_N (при $N > 2$) выполняется условие $N \equiv 0 \pmod{4}$. При $N = 2$ нормализованная

матрица Адамара имеет вид

$$\begin{bmatrix} +1 & +1 \\ +1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Проблема построения матриц Адамара рассматривалась в работах Л. Бомера, Дж. Виллиамсона, К. Гольдберга, Р. Пэли, М. Холла и многих других авторов (см. [142]).

Далее будут приведены основные результаты, относящиеся к построению матриц Адамара порядка $N \neq 2^n$. Пусть $H_{N_1} = \{h'_{ij}\}$ и $H_{N_2} = \{h''_{ij}\}$ — матрицы Адамара соответственно порядков N_1 и N_2 . Тогда их прямое произведение

$$H_{N_1} \times H_{N_2} = \begin{bmatrix} h'_{11}H_{N_2} & h'_{12}H_{N_2} & \dots & h'_{1N_1}H_{N_2} \\ \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ h'_{N_11}H_{N_2} & h'_{N_12}H_{N_2} & \dots & h'_{N_1N_1}H_{N_2} \end{bmatrix}$$

есть матрица Адамара порядка N_1N_2 .

Следующие два результата позволяют конструктивно строить матрицы Адамара. Совместное их использование с остальными результатами этого пункта дает матрицы Адамара вплоть до порядка 88 (при $N \equiv 0 \pmod{4}$).

Пусть $N = v + 1 = p^h + 1 \equiv 0 \pmod{4}$, где p — простое. Тогда существует матрица Адамара H_N порядка N :

$$H_N = \{h_{ij}\},$$

$$h_{ij} = +1, \quad i = v \text{ или } j = v, \quad h_{ii} = -1, \quad 0 \leq i \leq v-1,$$

$$h_{ij} = \left(\frac{j-i}{v}\right), \quad 0 \leq i \leq v-1, \quad 0 \leq j \leq v-1, \quad i \neq j,$$

где $0, 1, \dots, v-1$ — элементы поля Галуа $GF(v)$ и $\left(\frac{j-i}{v}\right)$ означает символ Лежандра.

Пусть $N = 2(v+1) = 2(p^h+1) \equiv 0 \pmod{4}$, где p — простое. Тогда существует матрица Адамара H_N порядка N . Ниже дан способ построения такой матрицы. Будем считать, что $p^h \equiv 1 \pmod{4}$ (в остальных случаях последнее утверждение реализуется с помощью предыдущих результатов этого раздела). Рассмотрим матрицу

$$S = \begin{bmatrix} 0 & J_v^T \\ J_v & Q \end{bmatrix},$$

где J_v — вектор-столбец из $+1$ размерности v ; $Q = \{q_{ij}\}$ ($i, j = 0, 1, \dots, v-1$); $q_{ii} = 0$; $q_{ij} = \left(\frac{i-j}{v}\right)$ ($i \neq j$); $0, 1, \dots, v-1$ — элементы поля Галуа $GF(v)$. Искомая матрица H_N получается теперь с помощью подстановки в матрицу S вместо $+1, -1, 0$ соответственно матриц

$$\begin{bmatrix} +1 & +1 \\ +1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Ортогональные таблицы $(4\lambda, 4\lambda - 1, 2, 2)$, построенные выше, обладают максимальным числом факторов (при фиксированных остальных параметрах таблицы). С помощью идей п. 4.1 можно построить на основе этих таблиц ортогональные таблицы мощности 3 также с максимальным числом факторов. Метод построения заключается в следующем.

Пусть $D_2 = \{a_{ij}\}$ ($a_{ij} \in GF(2)$) — ортогональная таблица $(4\lambda, 4\lambda - 1, 2, 2)$. Тогда

$$D_3 = \begin{bmatrix} D_2 & O_{4\lambda} \\ D_2 + J_{(4\lambda-1), 4\lambda} & J_{4\lambda} \end{bmatrix}$$

есть ортогональная таблица $(8\lambda, 4\lambda, 2, 3)$, где $J_{4\lambda}$, $O_{4\lambda}$ и $J_{(4\lambda-1), 4\lambda}$ соответственно единичный и нулевой (4λ) -мерные векторы и матрица размера $(4\lambda - 1) \times 4\lambda$ из +1.

Пример 1. Рассмотрим ортогональную таблицу $(4, 3, 2, 2)$ мощности 2 с максимальным числом факторов, равным 3:

$$D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

Тогда

$$D_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

есть ортогональная таблица $(8, 4, 2, 3)$ мощности 3 с максимальным числом факторов, равным 4.

Литература к § 1: [6*, 71*, 103, 118, 121, 124, 131, 142, 170, 179].

§ 2. Несимметричные регулярные планы

В этом параграфе рассматриваются различные преобразования симметричных регулярных планов, с помощью которых получают несимметричные регулярные планы. В большинстве случаев эти преобразования оставляют планы не только регулярными, но и равномерными. И только в п. 1 получающиеся планы будут неравномерными. Однако даже в этом случае степень неравномерности для практических задач не очень большая и планы довольно близки к оптимальным (в смысле критериев § 11.2), а в остальных случаях — оптимальны.

1. Сжатие. Для фиксированного плана D с k факторами $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ рассмотрим еще один план D' , в котором число опытов и число факторов совпадают с числом опытов и числом фак-

торов в плане D . Пусть в плане D' все факторы, кроме \mathcal{F}_i (обозначения для факторов и их уровней оставим прежние), имеют такое же количество уровней, что и в плане D , и каждый фактор, кроме \mathcal{F}_i , в плане D' поддерживается во всех опытах на тех же уровнях, что и соответствующий фактор в плане D . Фактор \mathcal{F}_i в плане D' во всех опытах поддерживается на тех же уровнях, за исключением уровней j' и j'' . В этих случаях фактор \mathcal{F}_i поддерживается на одном и том же уровне (отличном от остальных уровней), который обозначим через j . Рассмотренная операция замены двух уровней фактора на один общий уровень называется *сжатием фактора*.

Если в плане D для факторов $\mathcal{F}_{i_1}, \dots, \mathcal{F}_{i_k}$ выполняется условие пропорциональности частот, то это же условие выполняется для тех же факторов в плане D' , полученном с помощью операции сжатия к одному или нескольким факторам плана D .

Из приведенного утверждения следует, что регулярность плана — инвариантное свойство относительно операции сжатия.

Пример 2. В качестве иллюстрации приведем регулярный план $2^2 \times 3^2/9$ главных эффектов, полученный с помощью двукратного применения операции сжатия к симметричному регулярному плану главных эффектов $3^4/9$:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad D' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

2. Расщепление. Пусть D_1 — регулярный факторный план мощности t_1 для k_1 факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}$ в N опытах. Пусть существует такой регулярный факторный план D_2 мощности t_2 в N опытах для k_2 факторов $\mathcal{F}_{k_1+1}, \dots, \mathcal{F}_{k_1+k_2}$, что каждому уровню некоторого фактора \mathcal{F}_i плана D_1 отвечает только одна комбинация факторов плана D_2 . Тогда замена фактора \mathcal{F}_i в плане D_1 множеством k_2 факторов $\mathcal{F}_{k_1+1}, \dots, \mathcal{F}_{k_1+k_2}$ плана D_2 называется *расщеплением фактора \mathcal{F}_i на k_2 факторов плана D_2* .

Расщепление фактора \mathcal{F}_i в регулярном факторном плане D_1 мощности t_1 для k_1 факторов на k_2 факторов регулярного факторного плана D_2 мощности t_2 приводит к регулярному факторному плану D мощности $t = \min(t_1, t_2)$ для $k_1 + k_2 - 1$ факторов. При этом выполняется условие пропорциональности частот для любой группы факторов плана D , содержащей не более $t_1 - 1$ факторов плана D_1 и не более t_2 факторов плана D_2 .

Регулярный факторный план D_2 для расщепления фактора \mathcal{F}_i может быть построен, если существует регулярный факторный

план D_2' мощности t_2 в s_i опытах и если все уровни фактора \mathcal{F}_i появляются в плане D_1 одинаковое число раз λ_i . Тогда искомым план D_2 может быть получен составлением λ_i раз плана D_2' .

Пример 3. В регулярном равномерном факторном плане D_1 главных эффектов для факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ используем следующую операцию расщепления четырехуровневого фактора \mathcal{F}_1 на три двухуровневых:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Поскольку расщепление, задаваемое схемой (3), отвечает регулярному факторному плану главных эффектов, то и результирующий план также будет регулярным планом главных эффектов (мощности 2).

В том же регулярном плане D_1 используем следующую операцию расщепления четырехуровневого фактора \mathcal{F}_1 на два двухуровневых \mathcal{F}_{k+1} и \mathcal{F}_{k+2} :

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Поскольку расщепление, задаваемое схемой (4), отвечает регулярному факторному плану мощности 4, то результирующий план будет регулярным для следующего факторного множества $\omega: \mathcal{F}_2, \dots, \mathcal{F}_k, \mathcal{F}_{k+1}, \mathcal{F}_{k+2}, \mathcal{F}_{k+1}, \mathcal{F}_{k+2}$.

Таким образом, в линейно независимом множестве главных эффектов регулярного плана D_1 схема (3) заменяет главные эффекты четырехуровневого фактора на главные эффекты трех двухуровневых факторов, а схема (4) заменяет главные эффекты четырехуровневого фактора на главные эффекты двух двухуровневых факторов и эффект их взаимодействия.

Пример 4. Рассмотрим теперь другой регулярный равномерный факторный план главных эффектов для факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ и используем следующую операцию расщепления восьмиуровневого фактора \mathcal{F}_1 на семь двухуровневых:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 5 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 6 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 7 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Поскольку расщепление, задаваемое схемой (5), отвечает регулярному факторному плану мощности 2 (плану главных эффектов), то и результирующий план также будет регулярным планом главных эффектов.

В том же регулярном плане D_1 используем теперь следующую операцию расщепления восьмиуровневого фактора \mathcal{F}_i на три двухуровневых $\mathcal{F}_{k+1}, \mathcal{F}_{k+2}, \mathcal{F}_{k+3}$:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

Поскольку расщепление, задаваемое схемой (6), отвечает регулярному факторному плану мощности 6, то результирующий план будет регулярен для следующего факторного множества ω : $\mathcal{F}_2, \dots, \mathcal{F}_k, \mathcal{F}_{k+1}, \mathcal{F}_{k+2}, \mathcal{F}_{k+3}, \mathcal{F}_{k+1}\mathcal{F}_{k+2}, \mathcal{F}_{k+1}\mathcal{F}_{k+3}, \mathcal{F}_{k+2}\mathcal{F}_{k+3}, \mathcal{F}_{k+1}\mathcal{F}_{k+2}\mathcal{F}_{k+3}$.

Таким образом, в линейно пезависимом мпожестве главных эфффектов регулярного плана D_1 схема (5) заменяет главные эфффекты восьмиуровневого фактора на главные эфффекты семи двухуровневых факторов, а схема (6) заменяет главные эфффекты восьмиуровневого фактора на главные эфффекты трех двухуровневых факторов и все их эфффекты взаимодействий.

3. Восстановление. Операция, рассматриваемая в этом пункте, в некотором смысле является обратной по отношению к операции расщепления. Рассмотрим регулярный факторный план D_1 для факторного множества $\omega = \omega_1 \cup \omega_2$, где подмножество ω_1 содержит элементы $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}, \mathcal{F}_1\mathcal{F}_2, \dots, \mathcal{F}_{k-1}\mathcal{F}_k, \dots, \mathcal{F}_1\mathcal{F}_2, \dots, \mathcal{F}_k$, а подмножество ω_2 содержит различные элементы, содержащие все остальные факторы $\mathcal{F}_{k_1+1}, \dots, \mathcal{F}_k$ плана D_1 и не содержащие первых \mathcal{F}_{k_1} факторов. Образум теперь план D_2 , в котором факторы $\mathcal{F}_{k_1+1}, \dots, \mathcal{F}_k$ совпадают с соответствующими факторами плана D_1 , а вместо факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}$ плана D_1 стоит фактор \mathcal{F} с числом уровней $s = s_1 \dots s_k$. При этом одинаковым комбинациям уровней факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}$ соответствуют одинаковые уровни фактора \mathcal{F} и одинаковым уровням фактора \mathcal{F} соответствуют одинаковые комбинации уровней факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}$. Такая замена называется *операцией восстановления*.

Замена факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_{k_1}$ регулярного плана D для факторного множества $\omega = \omega_1 \cup \omega_2$ на фактор \mathcal{F} с помощью операции восстановления приводит к плану D_2 , регулярному для факторного множества $\omega' = \{\mathcal{F}\} \cup \omega_2$.

Таким образом, в противоположность операции расщепления операция восстановления заменяет в линейно независимом мпожестве эфффектов плана D_1 подмножество главных эфффектов и всех эфффектов взаимодействий некоторых факторов на главные

эффекты одного фактора. Схема (3) тогда интерпретируется и как схема операции восстановления (т. е. операции замены главных эффектов двух двухуровневых факторов и эффекта их взаимодействия на эффекты четырехуровневого фактора), и схема (5) — также как схема операции восстановления (т. е. замены главных эффектов трех двухуровневых факторов и всех их эффектов взаимодействий на главные эффекты восьмиуровневого фактора).

Пример 5. Рассмотрим пример построения различных не-симметричных планов главных эффектов в 64 опытах из ортогональной таблицы (64, 63, 2, 2). Пусть каждая точка полного плана $2^8/64$ рассматривается как точка конечного евклидова пространства $EG(6, 2)$. Имеется 63 пучка параллельных плоскостей в $EG(6, 2)$, образующие конечную проективную геометрию $PG(5, 2)$. Точкам этой геометрии в соответствии с результатом п. 11.4.2 отвечают 63 фактора ортогональной таблицы (64, 63, 2, 2). Точки $X_1, \dots, X_v \in PG(5, 2)$ ($v \leq 6$) называются *линейно независимыми*; если $\text{rg}[X_1, \dots, X_v] = v$. Обозначим точки $(1, 0, \dots, 0)^T, (0, 1, \dots, 0)^T, \dots, (0, 0, \dots, 1)^T \in PG(5, 2)$ соответственно через 1, 2, ..., 6. Эти точки являются линейно независимыми. Любая точка $(a_1, \dots, a_6)^T \in PG(5, 2)$ может быть представлена в виде линейной комбинации точек 1, 2, ..., 6:

$$(a_1, \dots, a_6) = \lambda_1(1, 0, \dots, 0) + \dots + \lambda_6(0, 0, \dots, 1), \quad (7)$$

где $\lambda_i = 0, 1$ и все λ_i не равны нулю одновременно. Точка (7) обозначается через $1^{\lambda_1} 2^{\lambda_2} \dots 6^{\lambda_6}$. Например, точка $(1, 1, 1, 0, 1, 0)$ обозначается также через 1235: В этих обозначениях все 63 точки $PG(5, 2)$ изображены на рис. 1. Эти точки разбиты на 9 групп по семь точек. Внутри каждой группы имеется только по три линейно независимых точки. Следовательно, эти семь точек лежат на двумерной плоскости (2-плоскости). В 2-плоскости семь точек лежат на семи прямых. На рис. 1 эти прямые, содержащие по три точки, в каждой 2-плоскости изображены шестью отрезками прямых и внутренним треугольником. Например, верхний левый треугольник на рис. 1 представляет собой 2-плоскость, содержащую семь точек: 5, 35, 3, 135, 13, 15, 1. В качестве линейно независимых можно выбрать, например, точки 1, 3, 5. Семь указанных точек лежат на семи прямых: 15—35—13, 13—3—1, 15—5—1, 13—135—5, 15—135—3, 1—135—35, 3—5—35.

Расположение точек $PG(5, 2)$ на рис. 1 обладает следующим дополнительным свойством. Рассмотрим три любые треугольника (2-плоскости), расположенные в одной и той же строке. Тогда три одинаково расположенные на этих треугольниках точки лежат на одной так называемой *горизонтальной прямой* (в 1-плоскости). Например, в трех треугольниках второй строки центральные точки 25, 124, 145 лежат на одной прямой.

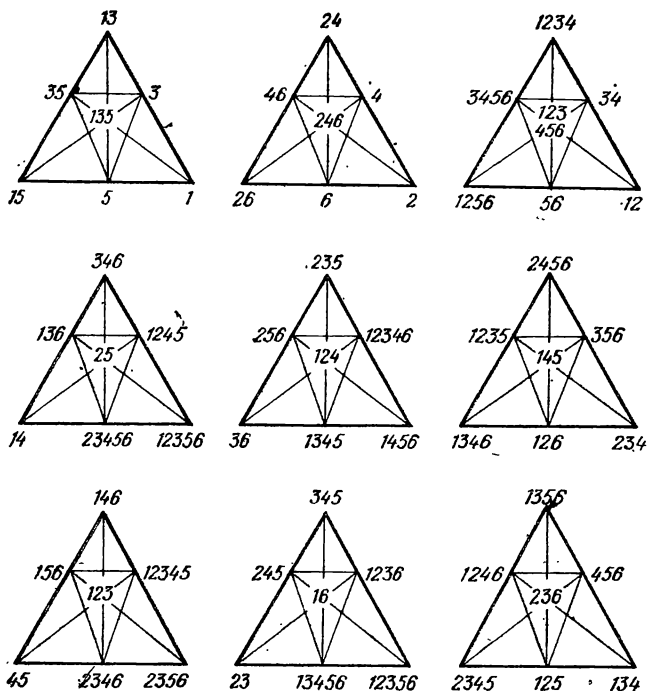


Рис. 1. Конечная проективная геометрия $PG(5, 2)$.

Любые три точки, лежащие на одной прямой в $PG(5, 2)$, соответствуют пучкам параллельных плоскостей, отвечающим главным эффектам двух факторов и эффекту их взаимодействия. Поэтому можно воспользоваться операцией восстановления для образования одного четырехуровневого фактора. Аналогично, любые семь точек, лежащие в одной 2-плоскости, могут быть использованы для образования одного восьмиуровневого фактора.

Таким образом, каждая точка на рис. 1 — это двухуровневый фактор, каждая прямая (1-плоскость) — четырехуровневый фактор, каждая 2-плоскость — восьмиуровневый фактор.

Этот метод дает следующие четыре плана главных эффектов: $4^{24} // 64$ (из 21 прямой), $4^{14} \times 8^3 // 64$ (из трех 2-плоскостей и 14 горизонтальных прямых), $4^7 \times 8^8 // 64$ (из шести 2-плоскостей и семи горизонтальных прямых) и $8^9 // 64$ (из девяти 2-плоскостей). Аналогичным образом могут быть построены различные планы вида $2^i \times 4^n \times 8^m // 64$. Однако любой из них может быть построен из планов $8^9 // 64$, $4^7 \times 8^8 // 64$, $4^{14} \times 8^3 // 64$ с помощью операции расщепления.

4. Произведение планов. Рассмотрим два плана D_1 и D_2 . Повторяя N_2 раз каждую строку плана D_1 , получим матрицу D'_1 . Повторяя N_1 раз план D_2 , получим матрицу D'_2 . План $D_{12} =$

$= [D_1' D_2']$ называется произведением планов D_1 и D_2 . Пусть существуют n регулярных факторных планов D_i ($i = 1, \dots, n$) мощности t_i в N_i опытах для k_i факторов \mathcal{F}_j^i ($j = 1, \dots, k_i$) соответственно с числами уровней $s_j^{(i)}$. Произведение этих планов D есть регулярный факторный план мощности $t = \min(t_1, \dots, t_n)$ в $N = \prod_{i=1}^n N_i$ опытах для $k = \sum_{i=1}^n k_i$ факторов \mathcal{F}_j^i с числами уровней $s_j^{(i)}$. В плане D выполняется условие пропорциональности частот для любого множества факторов, включающего не более t_i факторов из множества факторов \mathcal{F}_j^i . Поэтому указанный план D позволяет получать линейно независимые эффекты двух видов. К первому виду относятся главные эффекты и эффекты взаимодействий, которые входили в линейно независимые множества каждого из планов D_i . Ко второму виду относятся эффекты взаимодействий факторов, из которых плану D_i отвечают не более $[t_i/2]$ факторов.

Последовательное использование операций произведения планов и восстановления дает эффективный способ построения регулярных планов. Пусть D_1 и D_2 — два регулярных факторных плана мощности 2. Образует произведение D_{12} планов D_1 и D_2 , которое также будет представлять собой регулярный факторный план мощности 2. Кроме главных эффектов всех факторов, план D_{12} позволяет получить линейно независимые эффекты взаимодействий факторов, из которых один соответствует плану D_1 , а другой — плану D_2 . В соответствии с результатами п. 2.3 в этом случае может быть использована операция восстановления, заменяющая указанную пару факторов с числами уровней, скажем, s_1 и s_2 на фактор с числом уровней $s_1 s_2$. Операция восстановления может быть в такой ситуации использована многократно с тем ограничением, чтобы на каждой стадии не использовались факторы, принимавшие участие в предшествующих операциях восстановления.

Частным случаем указанного способа построения является случай, когда план D_1 однофакторный, т. е. содержит s уровней одного фактора \mathcal{F} . План D_{12} образуется повторением плана D_2 с каждым уровнем фактора \mathcal{F} . Операция восстановления, примененная к факторам \mathcal{F} и \mathcal{F}' (\mathcal{F}' — любой фактор из D_2), приводит к плану, образованному из следующих планов: D_2 ; D_2 с заменой уровней 0, 1, ..., $s' - 1$ фактора \mathcal{F}' соответственно на $s', s' + 1, \dots, 2s' - 1$; D_2 с заменой этих же уровней соответственно на $2s', 2s' + 1, \dots, 3s' - 1$ и т. д. Последний составляющий план образуется из D_2 с заменой уровней 0, 1, ..., $s' - 1$ фактора \mathcal{F}' соответственно на $(s - 1)s', (s - 1)s' + 1, \dots, ss' - 1$.

Другим частным случаем указанной процедуры является следующий способ построения регулярного факторного плана $r \times 2^n$ мощности 3 в $r(n + 1)$ опытах ($r = 2l$) при условии существования регулярного плана главных эффектов в $n + 1$ опытах для

n двухуровневых факторов. Пусть $D = \{a_{ij}\} (a_{ij} \in GF(2))$ — ортогональная таблица $(n+1, n, 2, 2)$. Используя способ построения двухуровневого плана мощности 3 (см. п. 12.4.3) и применяя изложенную процедуру, получим план

$$\begin{bmatrix} D & 0 \\ D + J_{n+1,n} & J \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ D + J_{n+1,n} & (r-1)J \end{bmatrix},$$

где $J_{n+1,n}$ — матрица из $+1$, представляющий собой искомый регулярный план $r \times 2^n$ мощности 3.

Пример 6. Рассмотрим два регулярных плана главных эффектов. Первый — план D_1 для четырех трехуровневых факторов $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \mathcal{F}_3, \mathcal{F}_4$ в девяти опытах. А второй — план D_2 для трех двухуровневых факторов $\mathcal{F}_5, \mathcal{F}_6, \mathcal{F}_7$ в четырех опытах. Произведение этих планов D_{12} дает возможность получить линейно независимые эффекты четырех трехуровневых и трех двухуровневых факторов (обозначения для которых оставим прежние), а также все двухфакторные эффекты взаимодействий, отвечающие одному трехуровневому и одному двухуровневому фактору. К парам факторов \mathcal{F}_1 и $\mathcal{F}_5, \mathcal{F}_2$ и $\mathcal{F}_6, \mathcal{F}_3$ и \mathcal{F}_7 можно применить операцию восстановления. В результате получим регулярный план главных эффектов $3 \times 6^3 // 36$.

Литература к § 2: [6*, 7, 102, 125, 163].

§ 3. Нерегулярные планы

Нерегулярные планы обладают меньшей эффективностью по сравнению с регулярными планами. Однако в общем случае они содержат меньшее число экспериментов и поэтому нередко являются более предпочтительными для приложений. Построению нерегулярных планов посвящено большое число работ. Различные виды так называемых сбалансированных планов рассматривали И. Чакраварти, К. Кишен, К. Рао, Д. Сривастава, Д. Чопра, Т. Ширакура и др. Отдельные частные случаи нерегулярных планов рассматривались в работах С. Аддельмана, С. Дэниела, П. Джона, В. Кошнора, Б. Марголица, Б. Рактое, В. Федерера и многих других авторов. В настоящем параграфе рассматриваются только общие методы построения нерегулярных планов с помощью преобразований регулярных планов, а также один класс планов, представляющий особый интерес для приложений.

1. Преобразование регулярных планов. В этом пункте дается метод получения нерегулярных планов из регулярных. Этот метод сравнительно просто может быть реализован на ЭВМ и дает планы, близкие по статистическим критериям к оптимальным.

Пусть \bar{D} — регулярный равномерный план главных эффектов в N опытах для k факторов $\mathcal{F}_1, \dots, \mathcal{F}_k$ соответственно с числа-

ми уровней s_1, \dots, s_k . Способ получения нового плана D для факторной модели M из плана \bar{D} для модели \bar{M} заключается в следующем. Вместо фактора \mathcal{F}_i с числом уровней s_i в плане \bar{D} рассмотрим такие факторы $\mathcal{F}_i^1, \dots, \mathcal{F}_i^{n_i}$ соответственно с числами уровней $s_i^{(1)}, \dots, s_i^{(n_i)}$, что для одинаковых уровней \mathcal{F}_i каждый из факторов $\mathcal{F}_i^1, \dots, \mathcal{F}_i^{n_i}$ имеет равные уровни и

$$1 + r + \sum_{j=1}^{n_i} (s_i^{(j)} - 1) = c_i \leq s_i, \quad (8)$$

где r — число двухфакторных эффектов взаимодействий двухуровневых факторов (из числа факторов $\mathcal{F}_1^1, \dots, \mathcal{F}_k^{n_k}$), входящих в новую модель. Множество чисел уровней факторов плана D называется *входным набором*.

В результате указанной замены фактора \mathcal{F}_i каждому его уровню ставится в соответствие строка вспомогательного плана D_i :

$$\begin{array}{c} \mathcal{F}_i \\ \left[\begin{array}{c} 0 \\ \vdots \\ s_i - 1 \end{array} \right] \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \mathcal{F}_i^1 \quad \dots \quad \mathcal{F}_i^{n_i} \\ \left[\begin{array}{ccc} F_i^1(0) & \dots & F_i^{n_i}(0) \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ F_i^1(s_i - 1) & \dots & F_i^{n_i}(s_i - 1) \end{array} \right] \end{array} = D_i.$$

Говорят, что для фиксированного плана \bar{D} заданы:

а) *скелет преобразования*, если для каждого фактора \mathcal{F}_i с s_i уровнями плана \bar{D} заданы уровни $s_i^{(1)}, \dots, s_i^{(n_i)}$ факторов $\mathcal{F}_i^1, \dots, \mathcal{F}_i^{n_i}$ при фиксированных их взаимодействиях в модели M ($i = 1, \dots, k$), т. е. заданы соответствия

$$\begin{aligned} s_1 &\rightarrow s_1^{(1)}, \dots, s_1^{(n_1)}, \\ s_k &\rightarrow s_k^{(1)}, \dots, s_k^{(n_k)}. \end{aligned} \quad (9)$$

б) *структура преобразования*, если задан скелет преобразования и для каждого фактора \mathcal{F}_i плана \bar{D} задан план D_i — i -я структура ($i = 1, \dots, k$);

в) *масштаб преобразования*, если для каждого плана D_i для любых уровней факторов \mathcal{F}_i^j ($j = 1, \dots, n_i$) заданы значения соответствующих количественных переменных X_i^j .

Скелет преобразования (9) называется *допустимым*, если выполняется неравенство (8) и набор $s_1^{(1)}, \dots, s_1^{(n_1)}, s_2^{(1)}, \dots, s_2^{(n_2)}, \dots, s_k^{(1)}, \dots, s_k^{(n_k)}$ совпадает с точностью до переупорядочивания с входным набором чисел уровней факторов.

Пусть D^j — полный план в $N^j = s_1^{(1)} \dots s_1^{(n_1)} \dots s_k^{(1)} \dots s_k^{(n_k)}$

опытах для факторов $\mathcal{F}_1^1, \dots, \mathcal{F}_1^{n_1}, \dots, \mathcal{F}_k^1, \dots, \mathcal{F}_k^{n_k}$; D_i^f — полный план в $n_i^f = s_i^{(1)} \cdot \dots \cdot s_i^{(n_i)}$ опытах для факторов $\mathcal{F}_i^1, \dots, \mathcal{F}_i^{n_i}$.

Таким образом, $N^f = \prod_{i=1}^n n_i^f$.

Вследствие результатов п. 10.4.2 дисперсия оценки регрессионной функции в точке полного плана D^f для модели M не зависит от типа этой модели (т. е. от качественной или количественной структуры факторов) и от значений, которые принимают переменные X_i в плане D (т. е. от масштаба преобразования). Обозначим через M_i факторную модель для плана D_i , содержащую главные эффекты факторов $\mathcal{F}_i^1, \dots, \mathcal{F}_i^{n_i}$ и двухфакторные эффекты взаимодействий некоторых из этих факторов с числами уровней 2 при условии выполнения неравенства (8). Обозначим через σ_{ia}^2 среднюю дисперсию по точкам полного плана D_i^f для модели M_i и плана D_i и через σ_a^2 — среднюю дисперсию по точкам полного плана D^f для модели M главных эффектов и плана D . Задача выбора оптимального допустимого скелета и структуры преобразования заключается в минимизации средней дисперсии σ_a^2 . Для средней дисперсии σ_a^2 при заданных скелете и структуре преобразования справедливо равенство

$$\sigma_a^2 = N^{-1}\sigma^2 \left(1 - k + \sum_{i=1}^k \sigma_{ia}^2 s_i / \sigma^2 \right),$$

поэтому минимум σ_a^2 достигается тогда и только тогда, когда обращаются в минимум σ_{ia}^2 для всех $i = 1, \dots, k$. Таким образом, при заданном скелете преобразования задача получения оптимального плана D сводится к задаче получения оптимальных (в смысле того же критерия) планов D_i , или к задаче получения оптимальных структур преобразования.

Функция эффективности — отношение дисперсии ошибки эксперимента и средней дисперсии по точкам полного плана, пормированной на одно наблюдение и на один параметр — имеет вид

$$\varphi = \lambda \sigma^2 / N \sigma_a^2,$$

где

$$\lambda = 1 - k + \sum_{i=1}^n c_i.$$

А эффективность плана D_i (или структуры D_i) определяется так:

$$\varphi_i = c_i \sigma^2 / s_i \sigma_a^2.$$

Эффективность плана D выражается через эффективности каждого из планов D_i , соответствующих плану D , следующим об-

разом:

$$\varphi = \frac{\lambda}{1 - k + \sum_{i=1}^k c_i / \varphi_i}.$$

Оптимальные структуры преобразований могут быть легко получены численным образом, поскольку даже прямой перебор не требует большого количества машинного времени.

Задача нахождения оптимального скелета преобразования плана \bar{D} сводится к задаче линейного целочисленного программирования введением для данного плана D_i параметра

$$\Delta_i = \frac{\sigma_{ia}^2}{\sigma^2} s_i - c_i.$$

Тогда

$$\varphi_i = \frac{c_i}{c_i + \Delta_i}, \quad \varphi = \frac{\lambda}{\lambda + \sum_{i=1}^k \Delta_i},$$

где $\Delta_i \geq 0$. При этом $\Delta_i = 0$ тогда и только тогда, когда $\varphi_i = 1$.

Занумеруем все использованные оптимальные структуры в порядке возрастания величин s_i . Пусть x_i — число структур с номером i в данном скелете преобразования (9). Обозначим через k_s^i количество s -уровневых факторов, получающихся после преобразования с i -й структурой. Для допустимого скелета преобразования

$$\sum_{i=1}^l k_s^i x_i = n_s^{\text{BX}}, \quad (10)$$

где n_s^{BX} — число входных s -уровневых факторов, l — номер последней структуры.

Учет количества s -уровневых факторов m_s в преобразуемом плане приводит к неравенству

$$\sum_{i=l_s-1+1}^{l_s} x_i \leq m_s, \quad (11)$$

где l_s — номер последней структуры для s -уровневого фактора ($l_1 = 0$). Оптимальный скелет преобразования определяется минимизацией функционала

$$K = \sum_{i=1}^k \Delta_i = \sum_{i=1}^l x_i \Delta_i$$

при условии выполнения равенств (10) и неравенств (11), что является задачей линейного неотрицательного, целочисленного программирования.

Оптимальный масштаб преобразования с вычислительной точки зрения легко определяется с помощью критерия D -оптимальности. Информационная матрица плана, получаемого преобразованием регулярного плана, для модели главных эффектов может быть приведена к блочно-диагональному виду. Поэтому задача нахождения оптимального масштаба преобразования сводится к задаче нахождения оптимального масштаба планов D_i .

2. Планы взвешивания. В этом пункте рассматривается задача построения эффективных нерегулярных двухуровневых факторных планов главных эффектов для модели истинных эффектов для количественных факторов. Эта задача эквивалентна задаче построения планов первого порядка, т. е. невырожденных планов для модели

$$E y = b_0 + b_1 X_1 + \dots + b_k X_k \quad (12)$$

на множестве

$$X_i = \pm 1. \quad (13)$$

В такой формулировке эта задача известна под названием *проблемы взвешивания* по оцениванию весов k предметов. Различают две постановки задачи о взвешивании; взвешивание на двухчашечных весах (взвешивание типа 2) и взвешивание на одночашечных весах (взвешивание типа 1).

Взвешивание типа 2 соответствует матрице плана $D = \{d_{iu}\}$ с элементами $-1, 0, +1$. При этом u -я строка D отвечает u -му взвешиванию на весах, а i -й столбец отвечает i -му предмету. Элемент $d_{iu} = -1$, если в u -м взвешивании i -й предмет положен на левую чашку весов; $d_{iu} = 0$, если i -й предмет не участвует в u -м взвешивании; $d_{iu} = +1$, если i -й предмет в u -м взвешивании положен на правую чашку весов.

Для взвешивания типа 2 возможны два вида модели: с неизвестным свободным членом, т. е. модель (12), и с известным свободным членом, который в последнем случае без ограничения общности можно положить равным нулю, т. е. модель

$$E y = b_1 X_1 + \dots + b_k X_k. \quad (14)$$

Модель (14) не является факторной и рассматривается здесь из-за того, что результаты по построению планов для моделей (14) и (12) взаимосвязаны. Неизвестный свободный член в модели соответствует взвешиванию с невыверенным нулем, или со смещением. Известный свободный член в модели соответствует взвешиванию на весах с выверенным нулем или без смещения. В последнем случае известно показание весов без ошибки, когда на одной чашке нет предметов.

План взвешивания типа 2 — факторный план в том случае, когда матрица плана взвешивания не содержит нулей. Ниже рассматриваются именно такие эффективные планы взвешивания в случае двухчашечных весов. При этом планы для моделей (12)

или (14) будут обладать свойством оптимальности не только на множестве (13), но и на множестве

$$X_i = -1, 0, +1. \quad (15)$$

План взвешивания типа 1 соответствует матрице плана $D = \{d_{iu}\}$ с элементами $-1, +1$: $d_{iu} = -1$, или $d_{iu} = +1$, если i -й предмет в u -м взвешивании соответственно не участвует или участвует во взвешивании. Таким образом, задача взвешивания типа 1 эквивалентна задаче построения факторных планов для модели (12) на множестве (13). Здесь коэффициент b_i ($i = 1, \dots, k$) модели (12) представляет собой вес половины i -го предмета, в отличие от взвешивания типа 2, где коэффициент представляет собой вес всего предмета.

Для взвешивания типа 1 также возможны два случая. Первый случай — это планы на множестве (13) для модели (12) без ограничений. Второй случай — это планы на множестве (13) для модели (12) с ограничением $b_0 = \sum_{i=1}^k b_i + c$. Второй случай соответствует известному показанию одночашечных весов (это показание есть c), когда ни один из предметов не участвует во взвешивании. Без ограничения общности можно положить $c = 0$. Первый и второй случай называются соответственно *случаями со смещением и без смещения*.

Для любого плана D_1 на множестве (13) и модели (12) матрица коэффициентов X равна $[JD_1]$, а для плана D на множестве (13) и модели (14) матрица коэффициентов X равна D . Вследствие этого умножение в плане D для модели (14) любой строки на -1 не меняет матрицы $X^T X$. Поэтому без ограничения общности по отношению к критериям оптимальности, зависящим только от вида $X^T X$, можно считать, что соответствующими умножениями на -1 план D приведен к виду $D = [JD_1]$.

Рассмотрим план D_1 для модели

$$Ey = b_0 + b_1 X_1 + \dots + b_{k-1} X_{k-1}. \quad (16)$$

Матрица коэффициентов плана D_1 для модели (16) есть $[JD_1]$, т. е. совпадает с матрицей коэффициентов плана D для модели (14). Поэтому, если план D обладает оптимальными свойствами по отношению к модели (14), то аналогичными свойствами будет обладать план D_1 по отношению к модели (16). В частности, справедлив следующий результат.

Если план D на множестве (13) есть A - (D, E) -оптимальный план для модели (14) с N наблюдениями, то план на множестве (10) есть A - (D, E) -оптимальный план модели (16) с N наблюдениями.

Аналогичный результат справедлив, если на множество рассматриваемых планов наложены дополнительные ограничения, например ограничения на вид матрицы моментов, насыщенности и т. п.

Ниже приведены способы построения эффективных планов взвешивания типа 2 для модели без смещения (14). Поскольку эти планы будут сосредоточены на множестве (13), они будут обладать свойствами оптимальности для планов типа 2 со смещением для модели (12), и, следовательно, для планов взвешивания типа 1 со смещением для модели (12) без ограничений.

Из результатов п. 1.4 следует, что эффективные планы легко могут быть построены в том случае, когда число наблюдений есть число Адамара, т. е. когда существует матрица Адамара порядка N . Таким образом, для приложений эта задача легко решается для значений N , удовлетворяющих сравнению $N \equiv 0 \pmod{4}$.

Ниже рассматриваются методы построения оптимальных планов для $N = k \neq 4l$ на множестве планов с матрицей моментов

$$X^T X = \begin{bmatrix} r & \lambda & \cdots & \lambda \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \lambda & \lambda & \cdots & r \end{bmatrix} = (r - \lambda) E_k + \lambda J_{k,k},$$

где E_k , $J_{k,k}$ — соответственно единичная матрица и матрица из $+1$ порядка k . Такие планы обозначаются через (k, v, λ) , где v — число нулей в каждом столбце. Для получения факторных планов особый интерес представляют планы вида $(k, 0, \lambda)$.

Пусть $X = D$ — матрица коэффициентов плана D для модели (14), k нечетно и

$$X^T X = (k - 1)E_k + J_{k,k}.$$

Тогда D есть A -, D - и E -оптимальный план типа $(k, 0, 1)$ на множестве насыщенных планов (k, v, λ) с областью измерений (15).

Пусть $D = X$ — матрица коэффициентов плана D для модели (14), $k \equiv 2 \pmod{4}$, $k \neq 2$ и

$$X^T X = (k - 2)E_k + 2J_{k,k}.$$

Тогда D есть D -оптимальный план типа $(k, 0, 2)$ на множестве насыщенных планов (k, v, λ) с областью измерений (15).

Пусть $D = X$ — матрица коэффициентов плана D для модели (14), $k \equiv 3 \pmod{4}$ и

$$X^T X = (k - 3)E_k + 3J_{k,k}.$$

Тогда D есть A - и E -оптимальный план типа $(k, 0, 3)$ на множестве насыщенных планов (k, v, λ) с областью измерений (15).

Пусть $X = D$ — матрица коэффициентов плана D для модели (14) и $k \equiv 3 \pmod{4}$. И пусть либо

$$X^T X = (k - 3)E_k + 3J_{k,k}, \quad k > 15,$$

либо

$$X^T X = (k + 1)E_k - J_{k,k}, \quad k \leq 15.$$

Тогда D есть D -оптимальный план на множестве насыщенных планов (k, v, λ) с областью измерений (15).

Пусть $X = D$ — матрица коэффициентов плана D для модели

(14), $k \equiv 1 \pmod{4}$, $k > 5$ и

$$X^T X = (k - 5)E_k + J_{kk}.$$

И пусть план $(k, 0, 1)$ не существует. Тогда D есть A -, D - и E -оптимальный план типа $(k, 0, 5)$ на множестве насыщенных планов (k, v, λ) с областью измерений (17).

Общий метод построения планов $(k, 0, \lambda)$ состоит в получении их из сбалансированных неполноблочных планов. Здесь рассматривается только один конструктивный результат для небольших размерностей.

Пусть $X = D$ — матрица коэффициентов плана D для модели (14), $k = 3, \dots, 9$. Тогда:

а) На множестве планов $(k, 0, \lambda)$ не существует A - и E -оптимальных планов для $k = 6$.

б) План $(7, 0, -1)$ является D -оптимальным планом для $k = 7$.

в) План $D = H_k$, задаваемый матрицей Адамара, является A -, D - и E -оптимальным для $k = 8$.

г) Во всех остальных случаях план

$$S_k = 2E_k - J_{kk}$$

является A -, D - и E -оптимальным.

План $(7, 0, -1)$, как и любой другой план $(k, 0, -1)$, где $k + 1$ — число Адамара, можно получить, вычеркивая первый столбец и первую строку из нормализованной матрицы Адамара соответствующего порядка.

Различные частные случаи построения планов взвешивания рассматривались К. Бенержи, А. Деем, X. Элихом и др.

Результаты по построению D -оптимальных планов на множестве планов с другими ограничениями на вид матрицы моментов можно найти в [139]. Одной из последних работ по построению D -оптимальных планов взвешивания без ограничений на вид матрицы моментов является статья [138*].

Литература к § 3: [6*, 10*, 116, 133, 138*, 139, 158, 164, 168, 177—179*, 181].

ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Экстремальными экспериментами называются эксперименты, направленные на отыскание экстремума функции регрессии. При выборе метода экстремального планирования решающим фактором является стоимость экспериментов. Если стоимость экспериментов высока и их допустимое количество невелико, то наиболее целесообразным может оказаться априорный (статический) план, согласно которому эксперименты проводятся в точках некоторой (возможно, равномерной) сетки в заданной подобласти факторного пространства. Если эксперименты дешевле, то в качестве плана проведения экспериментов часто используют последовательные планы, описанные в настоящей главе. При некоторых предположениях эти планы обладают асимптотическим свойством сходимости получаемой последовательности точек к точке локального экстремума функции регрессии.

Иногда в практике экстремального планирования встречаются ситуации, когда в любой точке факторного пространства с небольшими вычислительными затратами может быть измерен (со случайной ошибкой) градиент функции регрессии. В этих ситуациях для построения плана экспериментов могут быть использованы результаты, приведенные в § 3 и п. 4.1. Если же измерение градиента невозможно или требует больших вычислительных затрат, от план проведения экспериментов может быть выбран на основании результатов, изложенных в пп. 4.2—4.8. § 1 посвящен общей теории сходимости и скорости сходимости алгоритмов экстремального планирования, а § 2 — вопросам сходимости некоторых алгоритмов планирования экстремальных экспериментов при наличии ограничений.

Значительная часть математической теории планирования экстремальных экспериментов является частью теории адаптивного управления, и поэтому большинство приведенных в настоящей главе результатов являются результатами теории адаптивного управления.

§ 1. Сходимость и скорость сходимости итеративных алгоритмов

1. Постановка задачи. Предположим, что X — k -мерное евклидово пространство, \mathcal{B} — σ -алгебра борелевских подмножеств множества X , η — \mathcal{B} -измеримая функция, заданная на X . Пред-

положим, что в любой точке $x \in X$ можно вычислять (измерять) независимую реализацию случайной величины

$$y(x) = \eta(x) + \varepsilon(x),$$

где $\varepsilon(x)$ — случайная величина, причем $E\varepsilon(x) = 0$ для всех $x \in X$, и при различных вычислениях $y(x)$ случайные величины $\varepsilon(x)$ независимы.

Задача планирования экстремальных экспериментов, которая рассматривается в настоящей главе, состоит в конструировании последовательности точек

$$x_0, x_1, \dots, x_n, \dots, x_n \in X, n = 0, 1, \dots,$$

сходящейся (в смысле, уточняемом ниже) к точке $x^* \in X$, в которой $\eta(x^*) = \sup_{x \in X} \eta(x)$ или такой, что $\eta(x_n) \rightarrow \sup_{x \in X} \eta(x)$ ($n \rightarrow \infty$).

Задачи планирования экстремальных экспериментов обычно формулируются как задачи максимизации; задача минимизации очевидным образом сводится к сформулированной задаче максимизации.

Если при построении точек x_n ($n = 0, 1, \dots$), используются только значения величин

$$n; x_0, \dots, x_{n-1}; y(x_0), \dots, y(x_{n-1}),$$

то алгоритм экстремального планирования называется *поисковым*.

Иногда доступно измерение (со случайными ошибками) градиента $\nabla \eta$ функции η в точке $x = (x^{(1)}, \dots, x^{(k)})^T$:

$$z(x) = \nabla \eta(x) + \zeta(x), \nabla \eta(x) = \left(\frac{\partial \eta(x)}{\partial x^{(1)}}, \dots, \frac{\partial \eta(x)}{\partial x^{(k)}} \right)^T,$$

где $z(x)$, $\zeta(x)$ — реализации случайного вектора размерности k , $E\zeta(x) = 0$, при различных вычислениях $z(x)$ случайные векторы $\zeta(x)$ независимы.

Если при построении точек x_n ($n = 0, 1, \dots$) используются реализации случайных величин $z(x_0), \dots, z(x_{n-1})$, то алгоритм экстремального планирования называется *регулярным*.

В настоящей главе рассматриваются итеративные алгоритмы экстремального планирования, которые имеют следующий вид:

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} s_n, \quad (1)$$

где $n \geq 0$ — номер итерации, $x_n \in X$, $\gamma_{n+1} \geq 0$ — детерминированные скалярные множители (длина шага), s_n — случайные k -мерные векторы (направление движения), x_0 — некоторая точка из X (начальное приближение).

2. Основные предположения. Для изучения сходимости алгоритма (1) введем вспомогательную функцию $V(x)$ — функцию Ляпунова. На эту функцию наложим следующее условие.

Условие 1. $V: X \rightarrow [0, \infty)$, $\inf_{x \in X} V(x) = 0$, функция $V(x)$ дифференцируема, а ее градиент удовлетворяет условию

Гёльдера:

$$\|\nabla V(x) - \nabla V(x')\| \leq L\|x - x'\|^\delta, \quad 0 < \delta \leq 1, \quad 0 < L < \infty.$$

Пример 1. Пусть функция $\eta(x)$ дифференцируема, а ее градиент удовлетворяет условию Гёльдера. Тогда в качестве $V(x)$ можно выбрать функцию

$$V(x) = \sup_{x' \in X} \eta(x') - \eta(x),$$

при этом у функции $\eta(x)$ не обязательно существует точка $x^* \in X$, в которой достигается $\sup_{x \in X} \eta(x)$, под сходимостью случай-

ных векторов x_0, x_1, \dots , определяемых алгоритмом (1), в этом случае понимается сходимость значений $V(x_0), V(x_1), \dots$ к $\inf_{x \in X} V(x) = 0$.

Пример 2. Предположим, что дисперсии компонент случайного вектора s_n ограничены, а множество

$$X^* = \{x \in X \mid E s_n(x) = 0 \quad \forall n = 0, 1, \dots\}$$

выпукло. Тогда в качестве $V(x)$ можно выбрать $\rho^2(x, X^*)$, где $\rho(x, X^*)$ — расстояние от точки x до множества X^* . Таким образом определенная функция $V(x)$ удовлетворяет условию 1, но не является дважды непрерывно дифференцируемой.

Пример 3. Если хотя бы одна из компонент случайного вектора s_n ($n = 0, 1, \dots$) имеет бесконечную дисперсию, но все они имеют ограниченные центральные моменты порядка r ($1 < r < 2$), то в качестве $V(x)$ может быть выбрана функция $\|x - x_*\|^r$, где x_* — точка из X , в которой $E s_n(x_*) = 0$ при всех $n = 0, 1, \dots$. Так определенная $V(x)$ удовлетворяет условию 1 с $\delta = r - 1$.

Второе предположение заключается в требовании марковости последовательности (1).

Условие 2. Распределение случайного вектора s_n зависит только от n и от x_n , т. е. $s_n = s_n(x_n)$, причем при любых $n \geq 0$ и фиксированных x_0, \dots, x_n из X компоненты случайных векторов $s_i(x_i)$ ($i = 0, \dots, n$) взаимно независимы.

При выполнении условия 2 алгоритм (1) представляет собой цепь Маркова.

Одно из наиболее важных понятий в рассматриваемой ниже теории — понятие псевдоградиентности. Алгоритм (1) называется *псевдоградиентным*, если выполнено формулируемое ниже условие 3'.

Условие 3'. Для всех $n \geq 0, x \in X$ выполняется неравенство

$$-(\nabla V(x))^T E s_n \geq 0.$$

Это условие означает, что случайный вектор $-s_n$ ($n \geq 0$) в среднем направлен под острым углом к градиенту, или, что то же самое, направление s_n в среднем — направление убывания

функции V . Условие псевдоградиентности иногда бывает слишком жестким, для сходимости алгоритмов (1) часто достаточным оказывается следующее более гибкое условие.

Условие 3. Для всех $n \geq 0$, $x \in X$ выполняется неравенство

$$-(\nabla V(x))^T E s_n \geq \theta_n V(x) - \beta_n, \quad \theta_n > 0, \quad \beta_n \geq 0.$$

Введем естественное условие на начальное приближение x_0 .

Условие 4. $EV(x_0) < \infty$.

В частности, это условие выполнено, если x_0 — детерминированный вектор.

Сформулируем требования на рост детерминированной и случайной составляющих вектора s_n .

Условие 5. Для всех $n \geq 0$, $x \in X$ выполняется неравенство

$$E \|s_n(x)\|^{\delta+1} \leq \sigma_n^{\delta+1} + \tau_n V(x), \quad \sigma_n \geq 0, \quad \tau_n \geq 0.$$

Это условие означает, что у помехи $\kappa_n = s_n - Es_n$ существует момент порядка $\delta + 1$, который растет не слишком быстро. Также не слишком быстро должна расти и функция $Es_n(x)$.

Помехой (в точке $x \in X$) называется случайный вектор

$$\kappa_n(x) = s_n(x) - Es_n(x).$$

Аддитивной помехой называется помеха, для которой

$$\inf_{x \in X} E \|\kappa_n(x)\|^2 \geq \sigma^2, \quad \sigma^2 > 0.$$

Помеха κ_n называется мультипликативной, если

$$E \|\kappa_n(x)\|^2 \geq \sigma^2 \|x - x^*\|, \quad \sigma^2 > 0.$$

Если $\delta = 1$, то условие 5 принимает вид

$$\|Es_n(x)\|^2 + E \|\kappa_n(x)\|^2 \leq \sigma_n^2 + \tau_n V(x).$$

В этом случае величина σ_n характеризует уровень аддитивных помех; случай $\sigma_n = 0$ соответствует задаче поиска максимума дифференцируемой функции без помех или с мультипликативными помехами. При поиске максимума недифференцируемой функции даже при отсутствии помех ($\kappa_n(x) = 0$ при всех $n \geq 0$, $x \in X$) выполнено неравенство: $\sigma_n > 0$, поскольку $Es_n(x)$ не стремится к нулю при $V(x) \rightarrow \infty$.

Требования на параметры алгоритма (1) формулируются следующим образом.

Условие 6. $0 \leq v_n \leq 1$, $\sum_{n=0}^{\infty} v_n = \infty$, где

$$v_n = \gamma_{n+1} [\theta_n - L \gamma_{n+1}^{\delta} \tau_n / (\delta + 1)].$$

Требование $v_n \geq 0$ накладывает ограничения на длину шага γ_n сверху (при больших шагах последовательность (1) может

расходиться), а требование $\sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n = \infty$ — на γ_n снизу (при малых шагах последовательность (1) может остановиться, не достигнув минимума функции $V(x)$).

Если $\delta = 1$ и при всех $n \geq 0$ выполнены равенства $\theta_n = \theta$, $\beta_n = 0$, $\tau_n = \tau$, то условие 6 может быть заменено на более простое.

Условие 6'. Для всех $n \geq 0$ и некоторого ε ($0 < \varepsilon < \theta$) справедливо

$$0 \leq \gamma_{n+1} \leq 2(\theta - \varepsilon)/(L\tau), \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty.$$

В этом параграфе будут встречаться следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \varphi_n &= \gamma_{n+1}\beta_n + L\gamma_{n+1}^{\delta+1}\sigma_n^{\delta+1}/(\delta + 1), \quad \lambda_n = \varphi_n/\nu_n, \\ \rho_n &= (\lambda_n/\lambda_{n+1} - 1)/\nu_n, \quad \rho'_n = (1 - \lambda_{n+1}/\lambda_n)/\nu_{n+1}. \end{aligned}$$

3. Сходимость в среднем. В данном пункте приводятся условия, достаточные для сходимости в среднем величин $V(x_n)$ к нулю при $n \rightarrow \infty$ (т. е. $EV(x_n) \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$)), где x_0, x_1, \dots — последовательность случайных векторов, получаемая с помощью (1).

Теорема 1. Пусть выполнены условия 1—6 и $\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \lambda_n \leq \lambda$, $\lambda \geq 0$. Тогда $\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} EV(x_n) \leq \lambda$. Если при этом $\lambda_n \leq \lambda$ для всех n , то

$$EV(x_n) \leq EV(x_0) \prod_{i=0}^{n-1} (1 - \nu_i) + \lambda \left[1 - \prod_{i=0}^{n-1} (1 - \nu_i) \right].$$

В этой теореме утверждается, что при выполнении условий 1—6 имеет место сходимость в среднем в область малых значений $V(x)$, причем дается оценка скорости сходимости. Для случая, когда длина шага γ_n в алгоритме (1) постоянна, утверждение, аналогичное теореме 1, выглядит несколько иначе.

Пусть выполнены условия 1—5 и

$$\begin{aligned} \delta &= 1, \quad \beta_n = 0, \quad \theta_n = \theta, \quad \sigma_n = \sigma, \quad \tau_n = \tau, \\ \gamma_{n+1} &= \gamma, \quad 0 < \gamma < 2\theta/(L\tau). \end{aligned}$$

Тогда

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} EV(x_n) \leq v, \quad EV(x_n) \leq q^n EV(x_0) + (1 - q^n)v,$$

где $v = L\sigma^2\gamma/(2\theta - L\gamma\tau)$, $q = 1 - \gamma(\theta - L\gamma\tau/2)$.

Сформулированное утверждение означает, что при выполнении указанных условий последовательность (1) сходится в среднем со скоростью геометрической прогрессии в область, где $V(x) \leq v$, причем v мало при малых σ^2 (слабые аддитивные помехи) и малых γ (маленький шаг). Если $\sigma = 0$ (аддитивные помехи отсутствуют), то $v = 0$ и $EV(x_n) \leq q^n EV(x_0)$. Следовательно,

если присутствуют только мультипликативные помехи или помехи вообще отсутствуют, то длину шага в алгоритме (1) можно выбрать равной $\gamma_n = \gamma$ ($0 < \gamma < 2\theta L^{-1}\tau^{-1}$) и имеет место сходимость случайных величин $V(x_n)$ к нулю в среднем со скоростью геометрической прогрессии.

В следующей теореме приведены условия, достаточные для сходимости $EV(x_n)$ к нулю для случая, когда аддитивные помехи могут присутствовать.

Теорема 2. Пусть выполнены условия 1–6 и $\lambda_n \rightarrow 0$. Тогда $EV(x_n) \rightarrow 0$. Если, кроме того:

а) $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n \leq \rho < 1$, то

$$EV(x_n) \leq \lambda_n / (1 - \rho) + o(\lambda_n);$$

б) $\rho_n \leq \rho < 1$ для всех n , то

$$EV(x_n) \leq \lambda_n \left[(1 - \rho)^{-1} + \max\{0, \lambda_0^{-1} EV(x_0)\} - (1 - \rho)^{-1} \prod_{i=0}^{n-1} (1 - \nu_i (1 - \rho)^{-1}) \right];$$

в) $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho'_n \geq \rho > 1$, то

$$EV(x_n) = O\left(\prod_{i=0}^{n-1} (1 - \nu_i)\right);$$

г) $\rho'_n \geq \rho > 1$ для всех n , то

$$EV(x_n) \leq \left(EV(x_0) + \lambda_0 (\rho - 1)^{-1} \prod_{i=0}^{n-1} (1 - \nu_i) \right).$$

Важным отличительным свойством сформулированной теоремы является то, что в ней приводятся асимптотические (утверждения а) и в)) и справедливые при всех n (утверждения б) и г)) оценки скорости сходимости $EV(x_n)$ к нулю. Как следствие теоремы 2 можно рассматривать следующее утверждение.

Пусть выполнены условия 1–5 б') и $\beta_n = \theta$, $\theta_n = \theta$, $\sigma_n = \sigma$, $\tau_n = \tau$, $\gamma_n \rightarrow 0$. Тогда $EV(x_n) \rightarrow 0$. Если, кроме того:

а) $n\gamma_{n+1}$ монотонно возрастает, $\lim_{n \rightarrow \infty} n\gamma_{n+1} = \gamma$ ($\theta^{-1} < \gamma \leq \infty$), то

$$EV(x_n) \leq \frac{1}{2} L\sigma^2 (\theta - \gamma^{-1})^{-1} \gamma_{n+1} + o(\gamma_{n+1});$$

б) $n\gamma_{n+1}$ монотонно убывает, $\lim_{n \rightarrow \infty} n\gamma_{n+1} = \gamma$ ($0 \leq \gamma < \theta^{-1}$), то

$$EV(x_n) = O\left(\exp\left\{-\theta \sum_{i=0}^{n-1} \gamma_i\right\}\right).$$

В сформулированном предложении утверждается, по существу, что при наличии аддитивной случайной помехи для сходимости

сти в среднем случайных величин $V(x_n)$ к нулю достаточно выполнения условий

$$\gamma_n \rightarrow 0, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty.$$

Скорость сходимости зависит от скорости убывания γ_n . Если γ_n стремится к нулю медленнее, чем $[\theta n]^{-1}$, то $EV(x_n) = O(\gamma_n)$ (это будет, например, если $\gamma_n = \gamma/(n+a)$ ($\gamma > \theta^{-1}$), или $\gamma_n = \gamma n^{-r}$ ($0 < r < 1$), или $\gamma_n = \gamma/\ln n$). Если же γ_n стремится к нулю быстрее, чем $[\theta n]^{-1}$ (но так, что $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty$), то оценка скорости сходимости иная и приводится в утверждении б). Так, если $\gamma_n = \gamma/(n+a)$ ($\gamma < \theta^{-1}$), то $EV(x_n) = O(n^{-r\theta})$, а если $\gamma_n = \gamma[n \ln(n+1)]^{-1}$, то $EV(x_n) = O((\ln n)^{-r\theta})$. Из приведенных примеров видно, что во всех случаях оценка для $EV(x_n)$ не лучше чем $O(n^{-1})$.

Выше сформулированы результаты о сходимости в среднем величин $V(x_n)$. Если функция $V(x)$ имеет единственную точку минимума x^* , причем для некоторого $r \geq 1$

$$V(x) \geq l_r \|x - x^*\|^r, \quad l_r > 0, \quad \forall x \in X,$$

то из сходимости $EV(x_n)$ к нулю следует сходимость x_n к x^* в среднем порядка r : $E\|x_n - x^*\|^r \rightarrow 0$; оценки скорости сходимости могут быть переформулированы очевидным образом. В частности, если $V(x)$ сильно выпукла, то r можно выбирать равным 2 и сформулированные выше утверждения можно рассматривать как утверждения о сходимости в среднем квадратическом.

4. Сходимость почти наверное. Ниже приведены условия, достаточные для сходимости алгоритма (1) почти наверное (п. н.). Эти условия являются несколько более жесткими, чем условия, приведенные в п. 3. Это связано с тем, что из сходимости почти наверное x_n к x^* следует сходимость в среднем величин $V(x_n)$ к нулю.

Теорема 3. Пусть выполнены условия 1–6 и $\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n < \infty$. Тогда $V(x_n) \rightarrow 0$ п. н. (т. е. $P\{V(x_n) \rightarrow 0\} = 1$) при $n \rightarrow \infty$. При этом для любых $\varepsilon > 0$, $n_0 \geq 0$ имеет место неравенство

$$P\{V(x_n) \leq \varepsilon \quad \forall n \geq n_0\} \geq 1 - \left[EV(x_0) + \sum_{n=n_0}^{\infty} \varphi_n \right] \varepsilon^{-1}.$$

Если, кроме того, $\rho'_n \geq \rho > 1$ для всех n , то для любого $c > 0$

$$\begin{aligned} P\left\{V(x_n) \leq \left(c + EV(x_0) + \frac{\lambda_0}{\rho - 1}\right) \prod_{i=0}^{n-1} (1 - \nu_i) \quad \forall n\right\} &\geq \\ &\geq 1 - c^{-1} EV(x_0) - c^{-1}(\rho - 1)\lambda_0. \end{aligned}$$

Следствием теоремы 3 является следующее утверждение.

Пусть выполнены условия 1—5, 6', пусть $\delta = 1$, $\theta_n = \theta$, $\beta_n = 0$, $\tau_n = \tau$ и, кроме того, либо $\sigma = 0$, либо $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < \infty$. Тогда $V(x_n) \rightarrow 0$ п. н. В частности, если $\gamma_n = \gamma n^{-1}$, $\gamma_0 < 1$, то для любой $c > 0$

$$P\{V(x_n) \leq c n^{-\gamma_0} \quad \forall n \geq 1\} \geq 1 - c^{-1} E V(x_1) - L \sigma^2 \gamma^2 \theta [c(2\theta - L\gamma\tau)(1 - \gamma\theta)]^{-1}.$$

Из сформулированного утверждения следует, что при отсутствии аддитивных помех ($\sigma = 0$) и выполнении указанных условий алгоритм (1) сходится с вероятностью 1 для $\gamma_n = \gamma$ ($0 < \gamma < 2\theta L^{-1}\tau^{-1}$). При наличии аддитивных помех ($\sigma^2 > 0$) сходимость с вероятностью 1 гарантируется лишь при выполнении условия $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < \infty$, которое является более жестким, чем условие $\gamma_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$), требующееся для сходимости в среднем.

Если функция $V(x)$ имеет единственную точку минимума x^* : $V(x^*) = 0$, и $\inf_{\|x-x^*\| \geq \varepsilon} V(x) > 0$ при любом $\varepsilon > 0$, то из сходимости $V(x_n) \rightarrow 0$ п. н. следует, что $x_n \rightarrow x^*$ п. н.

Для псевдоградиентных алгоритмов вида (1) имеет место следующая теорема.

Теорема 4. Предположим, что выполнены условия 1, 3' и $\delta = 1$. Пусть существуют такие числа $c_1 \geq 0$, $c_2 \geq 0$ и последовательность чисел $v_n \geq 0$ (возможно, $v_n \rightarrow \infty$), что

$$E \|s_n\|^2 \leq v_n + c_1 V(x_{n-1}) - c_2 [\nabla V(x_{n-1})]^T E s_n,$$

и пусть числа γ_{n+1} , v_n удовлетворяют соотношениям

$$\gamma_{n+1} \geq 0, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_{n+1}^2 v_n < \infty.$$

Тогда, если выполнено любое из условий $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < \infty$ или $v_n = 0$ ($n = 0, 1, \dots$), $c_1 = 0$, $\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \gamma_n < 2L^{-1}c_2^{-1}$, то при любом x_0 последовательность (1) почти наверное такова, что существует предел $V(x_n)$ и с вероятностью 1

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [\nabla V(x_n)]^T E s_n = 0.$$

Утверждение теоремы 4 остается справедливым, если вместо условия псевдоградиентности (условие 3') потребовать более слабое: для всех $n \geq 0$, $x \in X$

$$-[\nabla V(x)]^T E s_n \geq -\beta_n, \quad \beta_n \geq 0, \quad \beta_n \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty,$$

а другие условия теоремы заменить на условия 1, 2, 4, 5 и условия

$$\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \Phi_n < \infty, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_{n+1}^{\delta+1} \tau_n < \infty.$$

Сделанные в теореме 4 предположения не позволяют утверждать, что $V(x_n) \rightarrow 0$ п. н.; например, все условия теоремы выполняются при $s_n = 0$. Если же в условии псевдоградиентности потребовать строгого неравенства для всех x_n , отличных от точек минимума, то можно получить более сильные утверждения.

Пусть в дополнение к условиям теоремы 4 для всех $n \geq 0$, $\varepsilon > 0$

$$-[\nabla V(x_n)]^T E s_n \geq c(\varepsilon) > 0$$

при $V(x_n) \geq \varepsilon$. Тогда $V(x_n) \rightarrow 0$ п. н.

Другим следствием теоремы 4 является следующее утверждение.

Пусть в дополнение к условиям теоремы 4 множество X^* точек минимума функции $V(x)$ не пусто и

$$\inf_x V(x) > 0 \text{ при } \rho(x, X^*) \geq \varepsilon,$$

$$-[\nabla V(x_n)]^T E s_n \geq c(\varepsilon) > 0 \text{ при } \rho(x, X^*) \geq \varepsilon$$

для всех $\varepsilon > 0$. Тогда с вероятностью 1

$$\rho(x_n, X^*) \rightarrow 0, \quad V(x_n) \rightarrow 0.$$

В частности, если X^* состоит из единственной точки $x^* \in X$, то $x_n \rightarrow x^*$ п. н.

Важной особенностью теоремы 4 и ее следствий является то, что эти утверждения остаются справедливыми и для того случая, когда X является сепарабельным гильбертовым пространством.

5. Неасимптотические оценки скорости сходимости. При практическом использовании итеративных алгоритмов возникает задача определения минимального числа итераций, необходимых для определения экстремума с заданной точностью. Эта задача может решаться в том случае, когда имеются неасимптотические, т. е. справедливые на каждом шаге алгоритма, оценки скорости сходимости. Две оценки приведены в теореме 2. Ниже приводятся еще несколько неасимптотических оценок скорости сходимости, справедливых, вообще говоря, при более общих предположениях о параметрах алгоритма (4).

Далее будем предполагать, что выполнены условия 1, 4 и еще несколько условий.

Условие 3". Для всех $n \geq 0$

$$-[\nabla V(x_n)]^T E (s_n | x_0, x_1, \dots, x_n) \geq \theta_n V^p(x_n) - \beta_n - \beta'_n V^{c_1}(x_n),$$

где $\theta_n > 0$, $\beta_n \geq 0$, $\beta'_n \geq 0$, $p \geq 1$, $0 \leq c_1 \leq 1$.

Условие 5'. Для всех $n \geq 0$

$$E(\|s_n\|^{1+\delta} | x_0, x_1, \dots, x_n) \leq \sigma_n^{1+\delta} + \tau_n V^{c_2}(x_n),$$

где $\sigma_n \geq 0$, $\tau_n \geq 0$, $c_2 > 0$.

Используя формулу конечных приращений, имеем

$$V(x_{n+1}) \leq V(x_n) + \gamma_{n+1} s_n^T \nabla V(x_n) + \frac{\gamma_{n+1} \delta}{1+\delta} \|s_n\|^{1+\delta}.$$

Отсюда и из условий 3'', 5' получаются неравенства вида

$$v_{n+1} \leq (1 + \alpha_n) v_n - \gamma_{n+1} u_n v_n^p + \gamma_{n+1} \omega_n,$$

где $v_n = EV(x_n)$, $\alpha_n \geq 0$, $u_n > 0$, $\omega_n \geq 0$, $n \geq 0$, $p \geq 1$.

Если (что и предполагается дальше) выполнены условия

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n \gamma_{n+1} = 0, \quad \sum_{n=0}^{\infty} u_n \gamma_{n+1} = \infty, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \omega_n u_n^{-1} = 0, \quad \prod_{n=0}^{\infty} (1 + \alpha_n) \leq \leq c_3 < \infty,$$

то алгоритм (1) сходится по функционалу: $v_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$).

Пусть $u_n \gamma_{n+1} (1 + \alpha_n)^{-1} \geq c_4 (n + n_0)^{-1}$, $c_4 > 0$, $n_0 \geq 1$, $\gamma_{n+1} \omega_n \leq c_5 (n + n_0)^{-t}$, $c_5 > 0$, $t > c_6$, $0 \leq c_6 \leq 1$, $n \geq 0$. Если, кроме того:

а) $c_6 = 1$, $c > 1$ выбирается из условия $f(c) \leq 0$, где $f(c) = (1 - c^{-1}) c_4 [c_5 + (c_5 c_4^{-1} c)^{1/p}]^{p-1} - p^{-1} (t - c_6) n_0^{c_6 - 1 + p^{-1}(t - c_6)(p-1)}$, или $c_6 = 1$, $p = 1$, $v_0 > c_9$, $t - 1 < c_4$, $c > c_4 / (c_4 + 1 - t)$, то при всех $n \geq 1$ справедливо

$$v_n \leq c_3 c_7 c_8(n),$$

где

$$c_7 = \max\{v_0, c_9\}, \quad c_9 = c_{10} n_0^{(c_6 - 1)/p}, \\ c_{10} = c_5 + (c_5 c_4^{-1} c)^{1/p}, \quad c_{11} = c_4 (1 - c^{-1}),$$

$$c_8(n) = \begin{cases} n_0^{c_{11}} (n + n_0 - 1)^{-c_{11}} & \text{при } p = 1; \\ [1 + (p-1) c_7^{p-1} c_{11} \ln(n_0^{-1}(n + n_0 - 1))]^{-1/(p-1)} & \text{при } p > 1; \end{cases}$$

б) $0 \leq c_6 \leq 1$, $(t - c_6)(p - 1) < p(1 - c_6)$, $v_0 \leq c_9$, $f(c) \geq 0$

или $c_6 = 1$, $p = 1$, $v_0 \leq c_9$, то при всех $n \geq 1$ справедливо

$$v_n \leq c_3 c_{10} (n + n_0 - 1)^{(c_6 - 1)/p};$$

в) $p > 1$, $0 \leq c_6 < 1$, $(t - c_6)(p - 1) \geq p(1 - c_6)$, $c \geq 1$, $f(c) \leq 0$, то при всех $n \geq 1$ справедливо

$$v_n \leq c_3 c_7 \left\{ 1 + c_7^{p-1} (1 - c_6)^{-1} (p - 1) c_{11} [(n + n_0 - 1)^{1 - c_6} - n_0^{1 - c_6}]^{-c_6/(p-1)} \right\}.$$

Характер приведенных оценок качественно различен при $p = 1$ и $p > 1$. В частности, при прочих равных условиях асимп-

тотические выражения для $p > 1$ дают меньшую скорость сходимости, чем для $p = 1$. При этом различны и рекомендации о выборе параметра c_0 . При $p = 1$ наибольшая асимптотическая скорость сходимости регулярных алгоритмов и алгоритма Кифера — Вольфовица (см. §§ 3, 4) достигается при $c_0 = 1$. Из приведенных оценок следует, что в случае $p > 1$ асимптотическая скорость сходимости при $c_0 < 1$ выше, чем при $c_0 = 1$. При уменьшении c_0 увеличивается скорость сходимости при всех p на начальном этапе, если v_0 достаточно велико, $v_0 > c_0$ (это по существу означает, что неопределенность априорной информации о положении экстремума превосходит неопределенность за счет помех). Наибольшая скорость сходимости достигается в этом случае при $c_0 = 0$, что соответствует, в частности, поиску с постоянной длиной шага γ_n . Отметим, что целесообразность использования неубывающего шага на начальном этапе поиска эвристически давно обоснована.

Литература к § 1: [68, 76, 78].

§ 2. Сходимость итеративных алгоритмов в задачах условной оптимизации

В § 1 была рассмотрена задача поиска максимума функции η , заданной на $X = \mathbf{R}^k$ ($k \geq 1$). В настоящем параграфе предполагается, что X есть подмножество \mathbf{R}^k и задано с помощью некоторых ограничений.

1. Использование операции проектирования. Обозначим через $\pi_X(x)$ оператор проектирования точки x на множество X . По определению, $\pi_X(x)$ — это точка из множества X , для которой при всех $x' \in X$

$$\|x' - \pi_X(x)\| \leq \|x' - x\|.$$

Другими словами, $\pi_X(x)$ представляет собой решение следующей экстремальной задачи:

$$\pi_X(x) = \arg \min_{x' \in X} \|x' - x\|.$$

Если X — замкнутое выпуклое подмножество \mathbf{R}^k ($k \geq 1$), то оператор π_X определяется однозначно. В частности, если

$$X = \{x = (x^{(1)}, \dots, x^{(k)})^T, a_i \leq x^{(i)} \leq b_i, i = 1, \dots, k\},$$

то

$$\pi_X(x) = (\pi^{(1)}, \dots, \pi^{(k)})^T,$$

$$\pi^{(i)} = \begin{cases} a_i, & x^{(i)} \leq a_i, \\ x^{(i)}, & a_i < x^{(i)} < b_i, \\ b_i, & x^{(i)} \geq b_i. \end{cases}$$

Если операция проектирования на X легко осуществляется, то для поиска максимума функции η может быть использована мо-

дификация алгоритма (1), что обосновывается следующим утверждением.

Все результаты о сходимости и скорости сходимости, сформулированные в § 1 относительно алгоритма (1), справедливы и для алгоритма (в обозначениях § 1)

$$x_{n+1} = \pi_X(x_n + \gamma_{n+1}s_n).$$

Рассмотрим несколько иную схему обоснования итеративных стохастических алгоритмов решения задачи поиска максимума функции η , заданной на $X \subset \mathbb{R}^k$ ($k \geq 1$). Будем предполагать, что X — выпуклое и замкнутое, а η — вогнутая на X функция.

Вектор $\hat{\eta}(x)$ называется *обобщенным градиентом функции* η в точке $x \in X$, если для всех $x' \in X$ выполняется неравенство

$$\eta(x') - \eta(x) \leq [\hat{\eta}(x)]^T(x' - x).$$

Обозначим за X^* множество точек из X , в которых функция η достигает максимума, а за \mathcal{F}_n — σ -алгебру, порожденную набором случайных векторов

$$(x_0, x_1, \dots, x_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

Теорема 5. Пусть χ_n — такие \mathcal{F}_n -измеримые случайные величины ($n = 0, 1, \dots$), что для любого $L > 0$ существуют: такое число $C_L > 0$, что при $\|x_i\| \leq L$ ($i = 0, 1, \dots, n$) выполняется

$$E(\|s_n\|^2 | x_0, \dots, x_n) \leq \chi_n^2 \leq C_L;$$

такая последовательность s_n ($n = 0, 1, \dots$), что

$$E(s_n | x_0, \dots, x_n) = a_n \hat{\eta}(x_n) + b_n,$$

где a_n — последовательность \mathcal{F}_n -измеримых случайных величин, b_n — последовательность \mathcal{F}_n -измеримых случайных векторов, $\hat{\eta}(x_n)$ — обобщенный градиент функции η в точке x_n ; такая последовательность положительных чисел $\gamma_1, \gamma_2, \dots$, что для некоторых γ_*, γ^*

$$0 < \gamma_* \leq \gamma_{n+1}(\chi_n + \tau_n \|x_n\|) \leq \gamma^* < \infty,$$

где $\tau_n = 1$, если $\|b_n\| > 0$, и $\tau_n = 0$, если $\|b_n\| = 0$; и пусть последовательности случайных величин ρ_n, a_n и векторов b_n удовлетворяют условиям

$$\rho_n \geq 0, \quad a_n \geq 0, \quad \sum_{n=0}^{\infty} E(\rho_n \|b_n\| + \rho_n^2) < \infty$$

и с вероятностью 1 $\sum_{n=0}^{\infty} \rho_n a_n = \infty$.

Тогда последовательность $(E\|x_n\| < \infty)$

$$x_{n+1} = \pi_X(x_n + \rho_n \gamma_{n+1} s_n), \quad n = 0, 1, \dots$$

n. сходится к некоторой точке x^* локального максимума функции η .

Важным свойством приведенного алгоритма является то, что он может быть использован и в том случае, когда функция η не является дифференцируемой во всем множестве X .

2. Методы штрафных функций. Методы штрафных функций являются одними из наиболее простых и широко применяемых методов решения экстремальных задач с ограничениями. Суть метода внешних штрафных функций заключается в сведении исходной задачи поиска инфимума функции $V_0(x)$ (например, $V_0(x) = -\eta(x)$) на множестве X к последовательности задач поиска инфимума некоторых функций $V_j(x)$ ($j = 1, 2, \dots$) на множестве X_0 , где множество X_0 содержит X , а вспомогательные функции $V_j(x)$ подбираются так, чтобы с ростом номера j они мало отличались от исходной функции $V_0(x)$ на множестве X и быстро возрастали на множестве $X_0 \setminus X$. Естественно ожидать, что быстрый рост функции $V_j(x)$ вне X приведет к тому, что при больших j нижняя грань этой функции на X_0 будет достигаться в точках, близких к множеству X , и решение вспомогательной задачи будет приближаться к решению исходной.

Последовательность функций $P_j(x)$ ($j = 1, 2, \dots$), определенных и неотрицательных на множестве X_0 , содержащем множество X , называют *последовательностью (внешних) штрафных функций* множества X на множестве X_0 , если

$$\lim_{j \rightarrow \infty} P_j(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x \in X, \\ +\infty & \text{при } x \in X_0 \setminus X. \end{cases}$$

Из этого определения видно, что при больших номерах j за нарушение условия $x \in X$ приходится «платить» большой штраф, в то время как при $x \in X$ штрафная функция представляет собой бесконечно малую величину при $j \rightarrow \infty$.

Для любого множества $X \subset \mathbb{R}^h$ существует и может быть построено сколько угодно много штрафных функций. Например, если X замкнуто, то можно положить

$$P_j(x) = A_j \rho(x, X), \quad x \in \mathbb{R}^h = X_0, \quad j = 1, 2, \dots,$$

где A_j — какая-либо положительная последовательность чисел ($\lim_{j \rightarrow \infty} A_j = +\infty$).

Как правило, при решении конкретных задач оптимизации множество X имеет вид

$$X = \{x \in \mathbb{R}^h \mid x \in X_0, g_i(x) \leq 0, i = 1, \dots, l, g_i(x) = 0, i = l+1, \dots, m\},$$

где X_0 — заданное подмножество \mathbb{R}^h простой структуры (возможно, $X_0 = \mathbb{R}^h$), функции $g_i(x)$ ($i = 1, \dots, m$) определены на X_0 . В качестве последовательности штрафных функций для так определенного множества X естественно взять

$$P_j(x) = A_j P(x), \quad A_j > 0, \quad j = 1, 2, \dots, \quad \lim_{j \rightarrow \infty} A_j = +\infty,$$

$$P(x) = \sum_{i=1}^l (\max\{0, g_i(x)\})^p + \sum_{i=l+1}^m |g_i(x)|^p, \quad x \in X_0,$$

где $p \geq 1$ — фиксированное число. Если функции $g_i(x)$ r раз непрерывно дифференцируемы на множестве X_0 , то при любом $p > r$ функция $P(x)$ также r раз непрерывно дифференцируема на X_0 . Если X_0 — выпуклое множество, функции $g_i(x)$ ($i = 1, \dots, l$) выпуклы на X_0 , а при $i = l+1, \dots, m$ функции $g_i(x)$ линейны, то $P(x)$ выпукла на X_0 .

Пусть некоторое множество X_0 , содержащее X , а также последовательность штрафных функций $P_j(x)$ множества X на X_0 выбрана. Предполагая, что функция $V_0(x)$ определена на X_0 , положим

$$V_j(x) = V_0(x) + P_j(x), \quad x \in X_0, \quad j = 1, 2, \dots$$

При решении детерминированных задач методом штрафных функций обычно считают, что на j -м шаге метода ищется точка, в которой с некоторой точностью достигается минимум $V_j(x)$, а искомая точка находится как предельная для указанной последовательности точек. При решении стохастических задач оптимизации такой подход неприменим вследствие сложности вспомогательных задач. Нецелесообразно также ограничиваться рассмотрением какой-либо одной функции $V_j(x)$, поскольку нельзя определить точность получаемого приближения. При решении стохастических задач на n -й итерации делается один шаг градиентного метода минимизации функции $V_n(x)$.

Предположим, что требуется минимизировать $V_0(x)$ на множестве X_0 , где X_0 — выпуклое, замкнутое, ограниченное подмножество \mathbb{R}^k ($k \geq 1$), $V_0(x)$ — выпуклая функция, заданная как предел некоторой последовательности $V_j(x)$, т. е. $V_0(x) = \lim_{j \rightarrow \infty} V_j(x)$

для всех $x \in X_0$.

Теорема 6. Пусть $V_j(x)$ — выпуклые при всех $j = 1, 2, \dots$ функции; последовательности $V_j(x)$ сходятся равномерно на X_0 ; s_n — случайные векторы, условное математическое ожидание которых равно

$$E(s_n | x_1, \dots, x_n) = \hat{V}_n(x_n) + b_n,$$

где $\hat{V}_n(x)$ — обобщенный градиент функции $V_n(x)$, случайный вектор b_n измерим относительно \mathcal{B}_n — σ -алгебры, порожденной (x_1, \dots, x_n) ; случайные величины ρ_n ($n = 1, 2, \dots$) \mathcal{B}_n -измеримы, с вероятностью 1

$$\rho_n \geq 0, \quad \rho_n \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \rho_n = \infty, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \rho_n \|b_n\| < \infty,$$

$$\|s_n\| + \|\hat{V}_n(x_n)\| + \|b_n\| \leq c < \infty, \quad n = 1, 2, \dots$$

и $\sum_{n=1}^{\infty} E \rho_n^2 < \infty$.

Тогда с вероятностью 1 предельные точки последовательности

$$x_{n+1} = \pi_0(x_n - \rho_n s_n)$$

принадлежат множеству точек минимума функции $V_0(x)$ и

$$\lim_{n \rightarrow \infty} V_n(x_n) = \min_{x \in X_0} V_0(x),$$

где $\pi_0(x)$ обозначает оператор проектирования на множество X_0 .

Приведенная теорема может быть переформулирована для случая, когда множество X задается в следующем виде:

$$X = \{x \in \mathbb{R}^k \mid x \in X_0, g_i(x) = EG_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, l\},$$

где случайные величины $G_i(x)$ ($i = 1, \dots, l$) при всех $x \in X_0$ взаимно независимы (так называемая *задача стохастического программирования*). Параллельно с вычислением случайного вектора x_{n+1} ($n = 0, 1, \dots$), согласно алгоритму, приведенному в теореме 6, следует вычислять значение случайного вектора v_{n+1} размерности l по формуле

$$v_{n+1} = \pi_W(v_n + \delta_n(\tau_n - v_n)),$$

где W — ограниченное множество значений вектор-функции $(g_1(x), \dots, g_l(x))^T$, v_0 — произвольная точка из W , случайная величина δ_n ($n \geq 0$) измерима относительно σ -алгебры, порожденной $\{(v_0, x_0), \dots, (v_n, x_n)\}$; с вероятностью 1 справедливо $\delta_n \geq 0$, $\sum_{n=0}^{\infty} \delta_n = \infty$ и $\sum_{n=0}^{\infty} E\delta_n^2 < \infty$; для всех $n = 0, 1, \dots$

$$E(\tau_n \mid (x_0, v_0), \dots, (x_n, v_n)) = (g_1(x_n), \dots, g_l(x_n))^T.$$

При вычислении x_{n+1} в функцию штрафа $P_n(x)$ следует вместо $g_i(x_n)$ ($i = 1, \dots, l$) подставлять значения v_n .

Метод штрафных функций сходится с вероятностью 1 и в данном случае.

Описанный метод штрафных функций (называемый *методом внешних штрафных функций*) несколько отличается от следующего метода.

Предположим, что X замкнуто, имеет внутренние точки, и замыкание его внутренней $\text{Int } X$ совпадает с X , т. е. $\overline{\text{Int } X} = X$, и существует такая точка $z \in X$, что множество $\{x \in X \mid V_0(x) \leq V_0(z)\}$ компактно.

Последовательность непрерывных функций $q_i: \text{Int } X \rightarrow \mathbb{R}^1$ ($i = 0, 1, \dots$) называется *последовательностью внутренних штрафных функций* для множества X , если выполнено: а) $0 < q_{i+1}(x) < q_i(x)$ для всех $x \in \text{Int } X$, $i = 0, 1, \dots$; б) $q_i(x) \rightarrow 0$ при $i \rightarrow \infty$ для всех $x \in \text{Int } X$; в) $q_i(x_j) \rightarrow \infty$ при $j \rightarrow \infty$ для любой последовательности $x_j \in \text{Int } X$, для которой $x_j \rightarrow x_* \in X \setminus \text{Int } X$ при $j \rightarrow \infty$, $i = 0, 1, \dots$

Метод внутренних штрафных функций определяется по последовательности $q_i(x)$ аналогично методу внешних штрафных функций; аналогичны и результаты о сходимости метода внутренних штрафных функций.

3. Метод множителей Лагранжа. Рассмотрим задачу поиска минимума функции $V_0(x)$ на множестве

$$X = \{x \in \mathbb{R}^k \mid x \in X_0, \quad g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, l, \\ g_i(x) = 0, \quad i = l+1, \dots, m\},$$

где функции $V_0(x), g_1(x), \dots, g_m(x)$ заданы на множестве X_0 . *Функцией Лагранжа* называется функция

$$L(x, \lambda) = V_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x),$$

$$x \in X_0, \quad \lambda = (\lambda_{(1)}, \dots, \lambda_{(m)})^T \in \Lambda_0 = \{\lambda \in \mathbb{R}^m \mid \lambda_{(1)} \geq 0, \dots, \lambda_{(m)} \geq 0\}.$$

Точка $(x^*, \lambda^*) \in X_0 \times \Lambda_0$ представляет собой *седловую точку* функции Лагранжа, $L(x, \lambda)$, если для всех $x \in X_0, \lambda \in \Lambda_0$

$$L(x^*, \lambda) \leq L(x^*, \lambda^*) \leq L(x, \lambda^*).$$

При определенных условиях выпуклости и регулярности исходной задачи минимизации необходимым и достаточным условием того, что в точке $x^* \in X$ достигается $\min_{x \in X} V(x)$, является существование такого $\lambda^* \in \Lambda_0$, что (x^*, λ^*) является седловой точкой функции Лагранжа $L(x, \lambda)$.

При решении детерминированных задач под методом множителей Лагранжа обычно понимают следующий метод ($g = (g_1, \dots, g_m)^T$):

$$x_{n+1} = \arg \min_{x \in X_0} L(x, \lambda_n), \quad \lambda_{n+1} = \pi_{\Lambda_0}(\lambda_n + \alpha_n g(x_{n+1})).$$

При решении стохастических задач на каждой итерации делается один шаг градиентного метода в направлении убывания функции $L(x, \lambda_n)$ (так же, как в методе штрафных функций).

Рассмотрим случай $l = m$. Для того чтобы не требовать строгой выпуклости функции $V_0(x)$, будем использовать регуляризованную функцию Лагранжа:

$$L_n(x, \lambda) = V_0(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \frac{1}{2} \alpha_n \|x\|^2 - \frac{1}{2} \alpha_n \|\lambda\|^2$$

на n -м шаге итеративного метода.

Предположим, что $V_0(x), g_i(x)$ ($i = 1, \dots, m$) — выпуклые непрерывные функции; X_0 — выпуклое замкнутое ограниченное множество; выполнено условие Слейтера, т. е. существует такая точка $x \in X_0$, что для всех $i = 1, \dots, m$ $g_i(x) < 0$; случайные ошибки

$$G_0(x) - V_0(x), \quad G_i(x) - g_i(x), \quad \nabla G_0(x) - \nabla V_0(x), \quad \nabla G_i(x) - \nabla g_i(x)$$

имеют нулевое среднее, ограниченную дисперсию и независимы при их вычислениях в различных точках;

$$\begin{aligned} \gamma_n \alpha_n^{-1} \rightarrow 0, \quad \alpha_n \rightarrow 0, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n \alpha_n = \infty, \\ \gamma_n^{-1} \alpha_n^{-2} (\alpha_{n+1} - \alpha_n) \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Тогда для метода

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= \pi_{X_0} [x_n - \gamma_{n+1} (\nabla G_0(x_n) + [\nabla G(x_n)]^T \lambda_n + \alpha_{n+1} x_n)], \\ \lambda_{n+1} &= \lambda_n + \gamma_{n+1} (G(x_n) - \alpha_n \lambda_{n+1}) \end{aligned}$$

выполняется

$$E \|x_n - x^*\|^2 \rightarrow 0, \quad E \|\lambda_n - \lambda^*\| \rightarrow 0,$$

где x^* — решение исходной задачи минимизации $V(x)$ с наименьшей нормой, λ^* — множители Лагранжа с наименьшей нормой.

Последовательности γ_n и α_n могут быть выбраны, например, в виде

$$\gamma_n = \gamma n^{-r}, \quad \alpha_n = \alpha n^{-t}, \quad 0 < t < r, \quad t + r < 1.$$

Литература к § 2: [47, 30, 77].

§ 3. Оптимальность итеративных алгоритмов

1. Потенциальные возможности псевдоградиентных алгоритмов. Из результатов, приведенных в § 1, следует, что при выполнении условия псевдоградиентности

$$[\nabla \eta(x)]^T E s_n \geq 0$$

и некоторых других имеет место сходимость в различных смыслах последовательности (1) к x^* при $n \rightarrow \infty$; в том же параграфе приведены некоторые оценки скорости сходимости. Ниже приведены результаты о достижимой точности алгоритма (1), т. е. о максимально возможной скорости сходимости x_n к x^* ; при этом качество приближения x_n к x^* будет измеряться величиной

$$w_n = E \|x_n - x^*\|^2.$$

Предположим, что выполнены условия 2 и 3' из § 1 для

$$V(x) = \sup_{x' \in X} \eta(x') - \eta(x)$$

(т. е. алгоритм (1) псевдоградиентный и представляет собой цепь Маркова), а относительно псевдоградиента выполнено условие линейного роста

$$E s_n(x) \leq L \|x - x^*\|, \quad x \in X, \quad n = 0, 1, \dots$$

Если помеха $\kappa_n = s_n - E s_n$ аддитивна, т. е. (см. п. 1.2)

$$\sup_{x \in X} E \|\kappa_n(x)\|^2 \geq \sigma^2 > 0,$$

то для всех $n = 1, 2, \dots$

$$w_n \geq [w_0^{-1} + nL^2\sigma^{-2}]^{-1}.$$

Это соотношение представляет собой формулировку принципа неопределенности для алгоритмов вида (1). Из него следует, что для любого алгоритма (1) при наличии аддитивных помех погрешность w_n убывает не быстрее, чем $[c_1 + nc_2]^{-1}$, где $c_1 = w_0^{-1}$, $c_2 = L^2\sigma^{-2}$.

Если погрешность мультипликативна, т. е. если для всех $n = 0, 1, \dots$, $x \in X$ выполняется

$$E \|x_n(x)\|^2 \geq \sigma_0^2 \|x - x^*\|, \quad \sigma_0 > 0,$$

то при $n = 1, 2, \dots$

$$w_n \geq w_0(1 + L^2\sigma_0^{-2})^{-n}.$$

Другими словами, при наличии мультипликативных помех погрешность w_n алгоритма (1) убывает не быстрее геометрической прогрессии со знаменателем $(1 + L^2\sigma_0^{-2})^{-1} < 1$.

2. Оптимальные псевдоградиентные алгоритмы. Разнообразие псевдоградиентных алгоритмов поиска экстремума ставит вопрос о выборе среди них наилучших в том или ином смысле. Приведенные выше результаты о потенциальных возможностях алгоритмов вида (1) позволяют решить вопрос об их оптимальности лишь в некоторых частных случаях. Ниже приведены результаты, с помощью которых в достаточно общей ситуации можно строить асимптотически оптимальные алгоритмы. Сначала приводятся условия сходимости для широкого класса алгоритмов (1) и даются асимптотические оценки скорости сходимости. На их основе строится алгоритм, имеющий максимальную асимптотическую скорость сходимости.

Как и в § 1, рассматривается задача поиска максимума функции η , заданной на $X = \mathbb{R}^k$ ($k \geq 1$), и точки

$$x^* = \arg \max_{x \in X} \eta(x),$$

в которой этот максимум достигается. Предположим, что в произвольной точке $x \in X$ доступна реализация независимого случайного вектора

$$z(x) = \nabla \eta(x) + \xi(x),$$

где $\xi(x) \in \mathbb{R}^k$ — погрешность наблюдения градиента.

Для решения поставленной задачи воспользуемся алгоритмом (1), в котором $s_n = \Phi(z(x_n))$, где Φ — некоторое отображение из X в X . Решаемая ниже задача заключается в оптимальном (в смысле асимптотического поведения алгоритма (1)) выборе скалярных множителей γ_n ($n \geq 1$) и отображения Φ .

Теорема 7. Пусть выполнены следующие условия:

а) $\eta(x)$ дифференцируема, градиент $\nabla\eta(x)$ удовлетворяет условию Липшица, $\eta(x) \rightarrow -\infty$ при $\|x\| \rightarrow \infty$ и x^* — единственная стационарная точка функции $\eta(x)$,

б) Помехи $\xi(x)$ — взаимно независимые случайные векторы.

в) Отображение Φ — \mathcal{B} -измеримо, нечетно и равномерно монотонно, т. е. $\Phi(x) = -\Phi(-x)$, и для всех $\varepsilon > 0$, $x, x' \in X$ выполнено

$$[\Phi(x) - \Phi(x')]^T (x - x') \geq h(\|x - x'\|),$$

$$\inf_{\varepsilon \leq t \leq \varepsilon^{-1}} h(t) > 0.$$

г) Либо $\|\Phi(x)\| \leq c$, либо

$$\|\Phi(x)\| \leq c(1 + \|x\|), \quad E\|\xi(x)\|^2 \leq c(1 - \eta(x) + \eta(x^*)),$$

где c — некоторая константа. Тогда при

$$\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < \infty'$$

алгоритм (1) с $s_n = \Phi(z(x_n))$ сходится с вероятностью 1, т. е. $x_n \rightarrow x^*$ п. н.

При выполнении условий теоремы точка x^* , в которой достигается максимум функции $\eta(x)$, единственна, а алгоритм (1) является псевдоградиентным. Теорема 7 — следствие более общих результатов, сформулированных в п. 1.4.

Далее рассматривается случай $\gamma_n = n^{-1}$ ($n \geq 1$). Из результатов § 1 следует, что другие типы зависимости γ_n от n (например, $\gamma_n = n^{-r}$ ($1/2 < r < 1$, $n \geq 1$)) приводят к более медленной сходимости и не представляют интереса с точки зрения оптимизации асимптотической скорости сходимости.

В следующей теореме приведены условия, при выполнении которых величина $\sqrt{n}(x_n - x^*)$ асимптотически нормальна со средним 0 и некоторой матрицей ковариаций D . Этот результат позволяет сравнивать различные алгоритмы вида (1) с $\gamma_n = n^{-1}$ по соответствующим матрицам D (в смысле упорядочения неотрицательно определенных матриц).

Теорема 8. Пусть в дополнение к условиям теоремы 7 $\gamma_n = n^{-1}$; функция $\eta(x)$ дважды дифференцируема в точке x^* и $\nabla^2\eta(x^*) < 0$, а помехи $\xi(x)$ имеют общее распределение $P(dx)$; отображение

$$\Psi: X \rightarrow X, \quad \Psi(x) = \int_X \Phi(x + x') P(dx')$$

дифференцируемо в 0; матрица

$$A = \int_X \Phi(x) \Phi^T(x) P(dx) > 0,$$

а матрица

$$B = \frac{1}{2} I_n + \Psi'(0) \nabla^2\eta(x^*)$$

устойчива (т. е. все ее собственные числа имеют отрицательные вещественные части). Тогда для алгоритма (1) с $s_n = \Phi(z(x_n))$ величина $\sqrt{n}(x_n - x^*)$ асимптотически нормальна: $\sqrt{n}(x_n - x^*) \sim \mathcal{N}(0, D)$, где матрица $D = D(P, \Phi)$ является решением матричного уравнения $BD + DB^T = -A$.

Таким образом, асимптотическая скорость сходимости алгоритма (1) измеряется величиной D и зависит от свойств помехи, отображения Φ и матрицы вторых производных функции η в точке x^* .

Рассмотрим некоторые частные случаи.

Пример 4. Градиентный алгоритм имеет вид

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} z(x_n), \quad z(x_n) = \nabla \eta(x_n) + \zeta(x_n).$$

Если $\gamma_n = \gamma n^{-1}$, $\gamma I_k > -\frac{1}{2} [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1}$ и выполнены условия теоремы 8, то имеет место асимптотическая нормальность, а матрица ковариаций D является решением матричного уравнения

$$\left(\frac{1}{2} I_k + \gamma \nabla^2 \eta(x^*) \right) D + D \left(\frac{1}{2} I_k - \gamma \nabla^2 \eta(x^*) \right) = \gamma^2 M, \\ M = \int_X x x^T P(dx).$$

В частности, если матрица ковариаций помехи ζ пропорциональна единичной: $M = E \zeta \zeta^T = \sigma^2 I_k$, то

$$D = \gamma^2 \sigma^{-2} (-2\gamma \nabla^2 \eta(x^*) - I_k)^{-1}.$$

Заметим, что если $\eta(x)$ — квадратичная функция, то та же скорость сходимости имеет место для обычной (не асимптотической) матрицы ковариаций:

$$E(x_n - x^*)(x_n - x^*)^T = n^{-1} \gamma^2 \sigma^{-2} (-2\gamma \nabla^2 \eta(x^*) - I_k)^{-1} + o(n^{-1}),$$

Пример 5. Общий линейный алгоритм имеет вид

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} \Gamma z(x_n),$$

где Γ — симметричная положительно определенная матрица. Условия сходимости для этого алгоритма те же, что и для градиентного. Асимптотическая скорость сходимости этого алгоритма при $\gamma_n = n^{-1}$ определяется решением матричного уравнения

$$\left(\Gamma \nabla^2 \eta(x^*) + \frac{1}{2} I_k \right) D + D \left(\Gamma \nabla^2 \eta(x^*) + \frac{1}{2} I_k \right) = \Gamma M \Gamma.$$

В частности, для алгоритма пьютоновского типа

$$x_{n+1} = x_n - \gamma_{n+1} [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} z(x_n)$$

имеем

$$D = [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} M [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1}, \quad M = E \zeta \zeta^T.$$

В следующем утверждении показано, какой алгоритм является асимптотически оптимальным в классе алгоритмов вида (1) с $\gamma_n = n^{-1}$, $s_n = \Phi(z(x_n))$.

Теорема 9. Предположим, что распределение $P(dx)$ имеет плотность $p(x)$ по мере Лебега μ_k , т. е. $P(dx) = p(x)\mu_k(dx)$, и для $p(x)$ существует конечная положительно определенная информационная матрица (по Фишеру)

$$I(p) = \int_X \nabla \ln p(x) [\nabla \ln p(x)]^T p(x) \mu_k(dx).$$

Пусть, кроме того, выполнены условия теоремы 8 для $\Phi = \Phi_0$,
 $\Phi_0(x) = -[\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} [I(p)]^{-1} \nabla \ln p(x)$.

Тогда для алгоритма (1) с $\gamma_n = n^{-1}$, $s_n = \Phi_0(z(x_n))$ имеет место соотношение

$$\sqrt{n}(x_n - x^*) \sim \mathcal{N}(0, D^*), \quad D^* = [\nabla^2 \eta(x^*) I(p) \nabla^2 \eta(x^*)]^{-1},$$

а для любого другого отображения Φ , удовлетворяющего условиям теоремы 8, $\sqrt{n}(x_n - x^*) \sim \mathcal{N}(0, D(\Phi))$, $D(\Phi) \geq D^*$.

Таким образом, алгоритм

$$x_{n+1} = x_n - (n+1)^{-1} [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} [I(p)]^{-1} \nabla \ln p(z(x_n))$$

является асимптотически оптимальным в рассматриваемом классе алгоритмов.

Пример 6. Если помеха распределена нормально, $\xi \sim \mathcal{N}(0, S)$, $S > 0$, то оптимальный алгоритм является алгоритмом ньютоновского типа:

$$x_{n+1} = x_n - (n+1)^{-1} [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} z(x_n), \quad D^* = [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} S [\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1}.$$

Пример 7. В одномерном случае ($k=1$) оптимальный алгоритм выглядит так:

$$x_{n+1} = x_n + \gamma(n+1)^{-1} \frac{p'(z(x_n))}{p(z(x_n))}, \quad \gamma = -\frac{1}{\eta''(x^*) I(p)},$$

$$I(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(p'(x))^2}{p(x)} dx.$$

Условия теоремы 9 выполнены, если $p > 0$, $p(x)$ симметрична и дифференцируема при почти всех $x \in X$, $0 < I(p) < \infty$, $\ln p(x)$ — выпуклая функция, растущая не быстрее квадратичной, функция

$\varphi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \ln p(x-t) p(x) dx$ дифференцируема в 0.

3. Робастные псевдоградиентные алгоритмы. Для того чтобы воспользоваться оптимальным алгоритмом, рассмотренным в предыдущем пункте, нужно знать закон распределения помехи $\xi(x) = z(x) - \nabla \eta(x)$. Обычно этот закон распределения неизвестен или известен приближенно. Использование оптимального алгоритма в ситуациях, когда фактическое распределение отличается от предполагаемого, может привести к потере точности, а иногда и к расходимости алгоритма.

Приведем пример. Пусть $k = 1$, предполагаемое распределение помехи имеет плотность

$$p_0(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp\{-x^2/2\},$$

и поэтому применяется алгоритм (1) с $\gamma_n = n^{-1}$, $s_n = -z(x_n)/\eta^n(x^*)$. Пусть на самом деле распределение помехи «загрязненное» нормальное с плотностью

$$p_1(x) = 0,9p_0(x) + 0,01(2\pi)^{-1/2} \exp\{-x^2/200\}.$$

Тогда асимптотическая дисперсия применяемого алгоритма приблизительно в девять раз хуже, чем для оптимального относительно p_1 алгоритма. Если фактическое распределение помехи имеет бесконечную дисперсию, то рассматриваемый алгоритм вообще не сходится. Заметим, что помехи с бесконечной дисперсией часто возникают при приближении градиента с помощью конечно-разностной аппроксимации. Например, если значения функции вычисляются с нормальной помехой, а длина пробного шага случайна и нормально распределена, то ошибки конечно-разностной аппроксимации градиента распределены по закону Коши.

Ниже приведены результаты о выборе оптимального алгоритма при неполной информации о законе распределения помехи. Сущность излагаемого ниже подхода тесно связана с идеологией робастного оценивания, впервые сформулированной Хубером, и заключается в том, что предполагается известным некоторый класс \mathcal{P} распределений помех ξ , а наилучшим алгоритмом экстремального планирования считается асимптотически минимаксный на данном классе.

Асимптотическая оптимальность алгоритма (1) с $s_n = \Phi^*(z(x_n))$ на классе \mathcal{P} понимается следующим образом: для всех таких $P \in \mathcal{P}$ и Φ , что пары (P, Φ^*) , (P^*, Φ) удовлетворяют условиям теоремы 8, имеют место неравенства

$$D(P, \Phi^*) \leq D(P^*, \Phi^*) \leq D(P^*, \Phi),$$

где $D(P, \Phi)$ — асимптотическая матрица ковариаций нормального распределения, соответствующая P и Φ и определяемая в теореме 9.

Теорема 10. Пусть \mathcal{P} — выпуклый класс распределений $P(dx)$ на \mathcal{B} , имеющих плотность p , причем $I(p) < \infty$ для всех $P \in \mathcal{P}$, и пусть существует такое $P^ \in \mathcal{P}$, что $0 < I(p^*) < I(p)$ для всех $P \in \mathcal{P}$. Положим*

$$\Phi^*(x) = -[\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} [I(p^*)]^{-1} \nabla \ln p^*(x).$$

Пусть выполнены условия теоремы 8 для $P = P^$, $\Phi = \Phi^*$.*

Тогда алгоритм (1) с $\gamma_n = n^{-1}$, $s_n = \Phi^(z(x_n))$ является асимптотически оптимальным на классе \mathcal{P} среди алгоритмов вида (1) с $\gamma_n = n^{-1}$, $s_n = \Phi(z(x_n))$.*

Таким образом, чтобы построить оптимальный на \mathcal{P} алгоритм, нужно найти «наименее благоприятное» распределение $P^* \in \mathcal{P}$ и для него, используя теорему 9, построить оптимальный алгоритм.

В одномерном случае для наиболее интересных и важных классов распределений \mathcal{P} задача отыскания «наименее благоприятных» распределений принципиально решена, и, следовательно, в зависимости от имеющейся априорной информации о помехах может быть построен оптимальный алгоритм. Ниже приведены три примера.

А. Класс \mathcal{P}_1 невырожденных распределений с такими плотностями p , непрерывными в 0, что

$$p(0) \geq c > 0, \quad I(p) < \infty.$$

«Наименее благоприятным» в данном случае является распределение Лапласа с плотностью $p^*(x) \leq c \exp\{-2c|x|\}$, а оптимальный на \mathcal{P}_1 алгоритм является «знаковым»:

$$x_{n+1} = x_n - [2(n+1)\eta''(x^*)c]^{-1} \text{sign}[z(x_n)], \\ D(P^*, \Phi^*) = (2c\eta''(x^*))^{-2}.$$

Б. Класс распределений с ограниченной дисперсией:

$$\mathcal{P}_2 = \left\{ P = p\mu_1, \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx \leq \sigma^2, \quad I(p) < \infty \right\}.$$

«Наименее благоприятным» является нормальное распределение со средним 0 и дисперсией σ^2 , а оптимальный на \mathcal{P}_2 алгоритм линейный:

$$x_{n+1} = x_n - [(n+1)\eta''(x^*)]^{-1} z(x_n), \quad D(P^*, \Phi^*) = (\eta''(x^*))^{-2} \sigma^2.$$

В. Класс приближенно нормальных распределений:

$$\mathcal{P}_3 = \{P = p\mu_1, p = (1-\varepsilon)p_0 + \varepsilon p_1, p_0(x) = (2\pi)^{-1/2} \sigma^{-1} \exp\{-x^2 \sigma^{-2}/2\},$$

$$p_1 - \text{такая произвольная плотность, что } I(p) < \infty\}.$$

Параметр $\varepsilon > 0$ характеризует «степень загрязнения» нормального распределения. В этом случае

$$p^*(x) = \begin{cases} (1-\varepsilon)\sigma^{-1}(2\pi)^{-1/2} \exp\{-x^2 \sigma^{-2}/2\} & \text{при } |x| \leq \Delta, \\ (1-\varepsilon)\sigma^{-1}(2\pi)^{-1/2} \exp\{\Delta \sigma^{-2}(\Delta/2 - |x|)\} & \text{при } |x| > \Delta, \end{cases}$$

где величина Δ находится из уравнения

$$\Delta = (1-\varepsilon)\Delta \int_{-\Delta}^{\Delta} p_0(x) dx + 2p_0(\Delta)\sigma^2(1-\varepsilon).$$

Оптимальным на \mathcal{P}_3 является линейный алгоритм с насыщением (т. е. $\Phi^*(x)$ при $x \geq 0$ пропорционально $\min\{x, \Delta\}$).

В многомерном случае задача отыскания «наименее благоприятных» распределений может быть решена лишь для некото-

рых классов распределений \mathcal{P} . Это связано в первую очередь с тем, что $I(P)$ — матрица, и задача ее минимизации, вообще говоря, не имеет решения. Приведем два примера, в которых рассматриваемая задача решается.

Г. Компоненты помехи ξ независимы, $P(dx) = \prod_{i=1}^k P_i(dx^{(i)})$, где $P_i(dx^{(i)})$ — распределение i -й компоненты ($i = 1, \dots, k$),

$$\mathcal{P} = \{P | P_i \in \mathcal{P}^{(i)}, \dots, P_k \in \mathcal{P}^{(k)}\},$$

где $\mathcal{P}^{(i)}$ — классы одномерных распределений. Задача отыскания «наименее благоприятного» распределения сводится к одномерным задачам, а оптимальный на \mathcal{P} алгоритм имеет вид

$$x_{n+1}^{(i)} = x_n^{(i)} - (n+1)^{-1} \sum_{j=1}^k h_{ij} [I(p_j^*)]^{-1} (\ln p_j^*(z^{(i)}(x_n)))',$$

$$i = 1, \dots, k, \quad x_n = (x_n^{(1)}, \dots, x_n^{(k)})^T, \quad z = (z^{(1)}, \dots, z^{(k)})^T,$$

$$[\nabla^2 \eta(x^*)]^{-1} = [h_{ij}]_{i,j=1}^k,$$

$$I(p_j) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(p_j'(x))^2}{p_j(x)} dx, \quad p_j^* = \arg \min_{p_j \in \mathcal{P}^{(j)}} I(p_j).$$

Д. Класс k -мерных распределений с ограниченной матрицей ковариаций:

$$\mathcal{P}_S = \{P = p\mu_k, \int_X x^T x p(x) \mu_k(dx) \leq S\}.$$

Здесь $S > 0$ — заданная матрица. «Наименее благоприятным» является нормальное распределение $\mathcal{N}(0, S)$, а оптимальный на \mathcal{P}_S алгоритм существует и является алгоритмом ньютоновского типа:

$$x_{n+1} = x_n - (n+1)^{-1} (\nabla^2 \eta(x^*))^{-1} z(x_n).$$

Асимптотически оптимальным на \mathcal{P}_S является также алгоритм из [70], в котором вместо матрицы $\nabla^2 \eta(x^*)$ на n -й итерации используется оценка для $\nabla^2 \eta(x_n)$, получаемая аналогично оценке $\nabla \eta(x_n)$ в алгоритме Кифера — Вольфовица (см. п. 4.2).

Литература к § 3: [68, 70, 79, 80, 97].

§ 4. Некоторые алгоритмы планирования экстремальных экспериментов

1. Регулярные алгоритмы. Под *регулярным алгоритмом* понимается алгоритм вида (1), в котором при вычислении направления движения s_n используется случайная реализация градиента функции η в точке x_n , т. е. значение случайного вектора

$$z(x_n) = \nabla \eta(x_n) + \xi(x_n),$$

где $\xi(x)$ — случайная ошибка измерения градиента в точке x ($x \in X = \mathbf{R}^k$). Ниже рассмотрен случай, когда помехи аддитивные и для всех $x \in X$ выполнено $E\|\xi(x)\| \leq \sigma^2 < \infty$.

Приведенные ниже результаты о сходимости с вероятностью 1 регулярных алгоритмов являются следствиями теоремы 4. Для удобства ссылок основные предположения сформулированы в виде следующего условия.

Условие А. $\eta(x) \leq \eta^* < \infty$, $x \in X = \mathbf{R}^k$, $k \geq 1$; множества вида $\{x \in X | \eta(x) \geq \text{const}\}$ ограничены; при всех $x, x' \in X$

$$\|\nabla\eta(x + x') - \nabla\eta(x)\| \leq L\|x'\|;$$

$$\gamma_n \geq 0, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = \infty, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < \infty.$$

Под *сходимостью алгоритма с вероятностью 1* в данном пункте будем понимать следующее: с вероятностью 1 найдутся такие точка $x^* \in X$ ($\nabla\eta(x^*) = 0$) и последовательность n_i , что с вероятностью 1 $x_{n_i} \rightarrow x^*$ и $\eta(x_{n_i}) \rightarrow \eta(x^*)$ ($i, n \rightarrow \infty$); если точка x^* , в которой $\nabla\eta(x^*) = 0$, единственна, то с вероятностью 1 $x_n \rightarrow x^*$ ($n \rightarrow \infty$).

Наиболее простым регулярным алгоритмом является градиентный алгоритм (многомерный алгоритм стохастической аппроксимации Роббинса — Монро)

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1}z(x_n).$$

Если выполнено условие А, то градиентный алгоритм сходится с вероятностью 1.

Непосредственным обобщением градиентного алгоритма является алгоритм, в котором скалярные множители γ_n заменены на матрицы Γ_n .

Если выполнено условие А для $\gamma_n = \|\Gamma_n\|$, и для всех $x \in X$, $n \geq 1$

$$x^T \Gamma_n x \geq c \|\Gamma_n\| \cdot \|x\|,$$

то алгоритм

$$x_{n+1} = x_n + \Gamma_{n+1}z(x_n)$$

сходится с вероятностью 1 (норма матриц и векторов евклидова).

Определенный интерес может также представлять алгоритм, в котором градиент преобразуется по несколько иному закону. Пусть

$$\xi(x) + \nabla\eta(x) = A(x)q(x),$$

где $A(x)$ — некоторый линейный оператор из X в X , а измерению доступен случайный вектор $q(x)$.

Предположим, что выполнено условие А и для всех $x, x' \in X$

$$x^T A(x')x \geq c\|x'\|, \quad c > 0, \quad \|A(x)\| \leq c_1 < \infty.$$

Тогда алгоритм

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} q(x_n)$$

сходится с вероятностью 1.

Одним из типичных алгоритмов, в которых компоненты градиента подвергаются нелинейному преобразованию, является «знаковый» алгоритм.

Предположим, что выполнено условие А и для всех $x \in X$, $\varepsilon > 0$

$$P\{\zeta(x)^{(i)} > 0\} = P\{\zeta(x)^{(i)} < 0\}, \quad i = 1, \dots, k,$$

$$P\{0 \leq \zeta(x)^{(i)} \leq \varepsilon\} \geq \delta(\varepsilon) > 0, \quad P\{-\varepsilon \leq \zeta(x)^{(i)} \leq 0\} \geq \delta(\varepsilon)$$

(индекс сверху у вектора обозначает его соответствующую компоненту). Тогда алгоритм

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} \text{sign } z(x_n)$$

сходится с вероятностью 1, где

$$\text{sign} [(a^{(1)}, \dots, a^{(k)})^T] = (\text{sign } a^{(1)}, \dots, \text{sign } a^{(k)})^T,$$

$$\text{sign } a = \begin{cases} 1, & \text{если } a > 0, \\ -1, & \text{если } a < 0, \\ 0, & \text{если } a = 0. \end{cases}$$

Далее рассматривается алгоритм, в котором на n -й итерации ($n = 0, 1, \dots$) случайно и независимо от реализации градиента выбирается вектор q_n , а шаг делается либо по направлению q_n , либо по направлению $-q_n$ в зависимости от того, какой из этих векторов составляет острый угол с реализацией градиента.

Предположим, что выполнено условие А и для всех $x \in X$, $n \geq 0$

$$|E(q_n^T x)| \geq c \|x\|, \quad c > 0,$$

$$E[q_n^T \zeta(x)] = 0, \quad E\|q_n\|^4 \leq c_1 < \infty.$$

Тогда алгоритм

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} q_n (z(x_n))^T q_n$$

сходится с вероятностью 1.

«Знаковый» аналог этого алгоритма

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} q_n \text{sign} \{(z(x_n))^T q_n\}$$

сходится при дополнительных предположениях, сформулированных для «знакового» аналога градиентного алгоритма.

Если в сформулированных выше результатах под сходимостью с вероятностью 1 понимать, что почти наверное существует $\lim_{n \rightarrow \infty} \eta(x_n)$ и $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\nabla \eta(x_n)\| = 0$, то эти результаты справедливы для случая, когда X — сепарабельное гильбертово пространство.

Все приведенные утверждения о сходимости регулярных алгоритмов справедливы и для случая, когда помехи мультипликативные (см. п. 1.2), причем во всех случаях, кроме утверждений о сходимости «знаковых» алгоритмов, условие $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < \infty$ можно заменить на условие $\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \gamma_n < 2L^{-1}c_2^{-1}$ из теоремы 4.

Ниже рассмотрен еще один регулярный алгоритм, отличающийся от приведенных выше тем, что на каждом его шаге направление движения s_n вычисляется на основе проведенного измерения $z(x_n) = \nabla \eta(x_n) + \zeta_n$ и всех ранее вычисленных значений s_0, \dots, s_{n-1} .

Предположим, что выполнено условие А,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \beta_n^2 < \infty, \quad \gamma_{n+1}/\beta_n \rightarrow 0,$$

$$E \|\zeta_n\|^2 \leq C < \infty, \quad E \{\|\zeta_n\| \mid \mathcal{B}_n\} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty,$$

где \mathcal{B}_n ($n=0, 1, \dots$) — σ -алгебры, порожденные случайными векторами $x_0, \zeta_0, \dots, x_n, \zeta_n$. Тогда с вероятностью 1 предельные точки последовательности x_0, x_1, \dots , определяемой по формулам ($s_0 = z(x_0)$)

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1}s_n, \quad s_{n+1} = s_n + \beta_n(z(x_n) - s_n)$$

(x_0 — произвольная точка из X), принадлежат множеству $\{x \in X \mid \nabla \eta(x) = 0\}$.

В приведенном алгоритме на каждом шаге используется операция усреднения для вычисления направления движения, что позволяет уменьшить влияние случайных помех на процесс поиска и обеспечить инерционность процесса. На начальной стадии поиска это часто оказывается выгодным, а вблизи решения, как показывают численные эксперименты, инерционность замедляет сходимость.

2. Поисквые алгоритмы. *Поисквыми* называются алгоритмы вида (1), в которых для вычисления направления движения s_n используются только реализации случайных величин $y(x_{(i)})$ ($i = 1, \dots, l+1$) для некоторых точек $x_{(1)}, \dots, x_{(l+1)}$ ($l=0, 1, \dots$) (возможно, l зависит от n).

Рассмотрим общий алгоритм, который охватывает большинство известных поисковых алгоритмов. На n -м шаге этого алгоритма случайным или детерминированным образом выбирается l векторов q_{n1}, \dots, q_{nl} и в точках

$$x_n, x_n + \alpha_{n+1}q_{n1}, \dots, x_n + \alpha_{n+1}q_{nl}$$

вычисляются значения случайной величины y .

Предположим, что выполнено условие А, сформулированное в п. 1,

$$\alpha_n \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 \alpha_n^{-2} < \infty,$$

$$E \sum_{i=1}^l (x^T q_{ni})^2 \geq c \|x\|^2, \quad c > 0, \quad x \in X, \quad n = 0, 1, \dots,$$

$$E \sum_{i=1}^l \|q_{ni}\|^8 \leq c_1 < \infty, \quad E \varepsilon (x_n + \alpha_{n+1} q_{ni}) q_{ni} = 0.$$

Тогда для алгоритма

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} \alpha_{n+1}^{-1} \sum_{i=1}^l [y(x_n + \alpha_{n+1} q_{ni}) - y(x_n)] q_{ni}$$

с вероятностью 1 имеет место равенство $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\nabla \eta(x_n)\| = 0$.

Ниже приведены некоторые частные случаи рассмотренного алгоритма.

А. Несимметричный вариант алгоритма Кифера — Вольфовица: $l = k$, $q_{ni} = e_i$ — орты ($i = 1, \dots, k$).

Б. Симметричный вариант алгоритма Кифера — Вольфовица: $l = 2k$, $q_{ni} = e_i$ ($i = 1, \dots, k$), $q_{ni} = -e_i$ ($i = k+1, \dots, 2k$).

При реализации несимметричного варианта алгоритма Кифера — Вольфовица требуется приблизительно в два раза меньше значений случайных величин $y(x)$ на каждом шаге, чем при реализации симметричного варианта, но оценка градиента, получаемая на каждом шаге последнего, точнее.

В. Метод крутого восхождения (см. пп. 5—7): $l > k$, q_{ni} — детерминированные векторы, не лежащие в одном подпространстве.

Г. Случайный поиск с односторонней пробой: $l = 1$, q_{n1} равномерно распределен на единичной сфере.

Д. Случайный поиск с парной пробой: $l = 2$, q_{n1} равномерно распределен на единичной сфере, $q_{n2} = -q_{n1}$.

Е. Алгоритм стохастического m -градиента: $1 \leq l = m \leq k$, q_{ni} — случайные ортонормированные векторы, которые обычно получают с помощью процедуры ортогонализации из независимых равномерно распределенных на единичной сфере случайных векторов. Достоинства алгоритма стохастического m -градиента при малых m наиболее ярко проявляются в тех задачах, в которых k велико.

Ж. Случайный покоординатный подъем: $l = 1$, $q_{n1} = e_i$ ($i = 1, \dots, k$) с вероятностью $p_{ni} \geq \delta > 0$.

Подобно градиентному алгоритму, рассмотренные поисковые алгоритмы могут быть подвергнуты некоторым преобразованиям. Так, вектор, определяющий направление движения, можно умножить на произвольную положительно определенную матрицу единичной нормы. Можно осуществлять изменение x_n лишь в том случае, когда значение $y(x_{n+1})$ больше, чем вновь измеренное $y(x_n)$ («случайный поиск с возвратом при неудачном шаге»). Можно из векторов q_{n1}, \dots, q_{nl} выбирать один: тот, для которого величина $y(x_n + \alpha_{n+1} q_{ni}) - y(x_n)$ максимальна («случайный поиск с наилучшей пробой»). Можно вместо разности $y(x_n + \alpha_{n+1} q_{ni}) -$

— $y(x_n)$ учитывать только ее знак. Для доказательства сходимости такого алгоритма нужно делать дополнительные предположения, аналогичные предположениям, сделанным при формулировке сходимости «знакового» алгоритма в п. 1.

При построении поисковых алгоритмов можно, так же как и при построении регулярных, использовать операцию сглаживания, т. е. вместо направления движения s_n , вычисленного по одной из приведенных формул, использовать в алгоритме (1) направление \tilde{s}_n , вычисляемое рекуррентно:

$$\tilde{s}_{n+1} = \tilde{s}_n + \beta_n (s_{n+1} - \tilde{s}_n).$$

Для сходимости получающихся алгоритмов необходимо выполнение условий

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \beta_n \leq 1, \quad \gamma_{n+1}/\beta_n \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

3. Локальное поведение алгоритмов. Многие регулярные и поисковые алгоритмы могут быть записаны в следующем виде:

$$x_{n+1} = x_n + \kappa_n (\nabla \eta(x_n) + \psi_n(x_n)) + \beta_n \xi_n(x_n), \quad (2)$$

где κ_n , β_n — детерминированные последовательности коэффициентов, $\psi_n(x)$ — детерминированное смещение при оценивании $\nabla \eta(x)$, равное нулю для регулярных алгоритмов, ξ_n — случайные ошибки, которые в простейших случаях считаются независимыми одинаково распределенными векторами с $E\xi_n = 0$ и невырожденной ковариационной матрицей.

При выполнении условия А последовательность x_0, x_1, \dots сходится с вероятностью 1 к одной из точек множества

$$X^* = \{x \in X \mid \nabla \eta(x) = 0\}$$

или к границе одной из его связных компонент, если только последовательность $q_n = \max_{x \in X} \psi_n(x)$ достаточно быстро стремится

к нулю. Однако такой результат неудовлетворителен с точки зрения практики, поскольку множество X^* состоит не только из точек максимума функции $\eta(x)$, но и из точек минимума, седловых точек и др. При выполнении некоторых предположений траектория x_n не может с положительной вероятностью сходить к точкам минимума функции η . Для этого достаточно требовать, например, чтобы матрица вторых производных функции η в окрестности точки минимума была невырождена, а последовательности κ_n , β_n , q_n удовлетворяли условиям $\kappa_n \leq C\beta_n$ при некотором $C > 0$; ряды

$$\sum_{n=0}^{\infty} \beta_n^2, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \kappa_n q_n \Phi_n^{-1/2}, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \beta_n^3 \Phi_n^{-3/2}$$

сходятся, где $\Phi_n = \sum_{i=n}^{\infty} \beta_i^2$.

Иногда бывает известно, что изолированная точка максимума x^* функции η принадлежит заданной области D и является единственной в D стационарной точкой непрерывного поля $\nabla\eta(x)$. В этом случае алгоритм (2) можно модифицировать так, чтобы «усекать» траектории, покинувшие область D :

$$x_{n+1} = x_n + F_D(\kappa_n(\nabla\eta(x_n) + \psi_n(x_n)) + \beta_n \xi_n), \quad (3)$$

где $F_D(x) = x$ при $x \in D$ и $F_D(x) = x_0$ при $x \notin D$, x_0 — произвольная заданная точка из области D .

Ниже приведены результаты о сходимости алгоритма (3) и асимптотическом (при $n \rightarrow \infty$) поведении его траекторий.

Предположим, что $\Phi(x) = P\{\|\xi_n\| > x\}$ убывает степенным образом с показателем p , т. е. при всех достаточно больших $x > 0$ выполнено

$$c_1 x^{-p} \leq \Phi(x) \leq c_2 x^{-p}$$

с некоторыми постоянными $0 < c_1 \leq c_2 < \infty$.

Замечание. Для того чтобы функция $\Phi(x)$ убывала степенным образом с показателем p , достаточно, чтобы $E\|\xi_n\|^p < \infty$.

Пусть функция $\Phi(x)$ убывает степенным образом с показателем $p > 2$ и выполнены следующие условия:

1) $\kappa_n \rightarrow 0$, $\beta_n^2/\kappa_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$ и $\sum_{n=0}^{\infty} \kappa_n = \infty$.

2) Для заданного $p > 2$ и для любого $T > 0$ найдутся такие постоянные U и V , что если $\sum_{n=n_1}^{n_2} \kappa_n \leq T$, то $\left(\sum_{n=n_1}^{n_2} \beta_n^2\right)^U \leq V \sum_{n=n_1}^{n_2} \beta_n^p$.

Тогда для сходимости алгоритма (3) необходимо и достаточно, чтобы сходился ряд $\sum_{n=0}^{\infty} \beta_n^p$.

Условия 1), 2) легко проверить, например, в случае

$$\kappa_n = n^{-a}, \quad \beta_n = n^{-b}, \quad n \geq 1, \quad 0 < a \leq 1, \quad b < a/2,$$

причем условие 2) в этом случае выполнено для любого $p > 2$.

Если случайный вектор ξ_n имеет все моменты, то вопрос об условиях сходимости алгоритма (3) решается следующим образом.

Введем предположение.

3) Функция

$$G(z) = \ln E \exp\{(z, \xi_n)\}, \quad z \in \mathbb{R}^h,$$

дважды непрерывно дифференцируема и $G(z)/\|z\| \rightarrow \infty$ при $\|z\| \rightarrow \infty$.

Например, если ξ_n имеет гауссовское распределение с ковариационной матрицей C , то $G(z) = \frac{1}{2} z^T C z$.

Алгоритм (3) при $\kappa_n = \beta_n$ и при $\lim_{n \rightarrow \infty} \kappa_n/\beta_n = 0$ называется соответственно *модифицированным алгоритмом Роббинса — Монро* и *модифицированным алгоритмом Кифера — Вольфовица*.

Последовательности κ_n и β_n называются *регулярными*, если для любого $T > 0$ найдется такая постоянная $r = r(T) < +\infty$, что из условия $\sum_{n=n_1}^{n_2} \kappa_n \leq T$ следуют неравенства

$$\max_{n_1 < n < n_2} \kappa_n / \min_{n_1 < n < n_2} \kappa_n < r, \quad \max_{n_1 < n < n_2} \beta_n / \min_{n_1 < n < n_2} \beta_n < r.$$

Пусть выполнены условия 1), 3) и последовательности κ_n, β_n в модифицированном алгоритме Кифера — Вольфовица регулярны. Тогда для сходимости этого алгоритма необходимо и достаточно, чтобы для любого $\lambda > 0$ сходился ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty} \kappa_n \exp \{ -\lambda \kappa_n / \beta_n^2 \}. \quad (4)$$

При тех же условиях для сходимости модифицированного алгоритма Роббинса — Монро необходимо и достаточно, чтобы для любого $\lambda > 0$ сходился ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp \{ -\lambda / \kappa_n \}$$

(сходимость этого ряда означает, что $\kappa_n = \omega_n / \ln n$, где $\omega_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$)), т. е. модифицированный алгоритм Роббинса — Монро может сходиться при логарифмически медленном убывании последовательности κ_n (ср. с условием $\sum_{n=0}^{\infty} \kappa_n^2 < +\infty$).

Предположим, что матрица ковариации случайных векторов ζ_n — единичная. Если ряд (4) сходится при $\lambda > \mu$ и расходится при $\lambda < \mu$ и если область

$$\{x | 2(\eta(x^*) - \eta(x)) < 3\mu\}$$

содержится в области D , то траектории модифицированного алгоритма Кифера — Вольфовица заматают при $n \rightarrow \infty$ всюду плотно область

$$D_\mu = \{x | 2(\eta(x^*) - \eta(x)) < \mu\}.$$

Свойство заметания означает, что сколь угодно малая окрестность любой точки $x \in D_\mu$ бесконечно много раз посещается траекторией алгоритма, и при всех достаточно больших n каждая траектория остается в области $D_{\mu+\delta}$ при сколь угодно малых $\delta > 0$.

Аналогичное утверждение имеет место и для модифицированного алгоритма Роббинса — Монро, а также для ковариационной матрицы, отличной от единичной, однако форма заметаемой области в этом случае определяется несколько сложнее.

4. Планирование экстремальных экспериментов для недифференцируемой функции регрессии; использование рандомизации и сглаживания. Если функция $\eta(x)$ недифференцируема (и, возможно, разрывна), то большая часть алгоритмов поиска ее мак-

сумма, рассмотренных в настоящей главе, не обязана сходиться. Тем не менее иногда можно так выбрать функцию Ляпунова $V(x)$ (см. п. 1.2), чтобы она была достаточно гладкой функцией, а алгоритм поиска максимума функции η рассматривать как алгоритм поиска минимума функции V , для исследования которого могут быть использованы результаты, сформулированные выше. Другой подход к построению и исследованию алгоритмов поиска максимума недифференцируемой функции основан на понятии обобщенного градиента и описан в п. 2.1.

Рассмотрим еще один подход к построению алгоритмов поиска максимума недифференцируемой функции η . Этот подход основан на сглаживании исходной функции путем рандомизации переменных. Приведем ряд определений.

Оператором усреднения порядка a ($a \geq 0$) называется интегральный оператор, переводящий функцию η , заданную на $X = \mathbf{R}^h$, в функцию $\hat{\eta}$, заданную на \mathbf{R}^{2h} и определяемую по формуле

$$\hat{\eta}(x, \beta) = \int_X h(x') \eta(x - \beta x') \mu_h(dx')$$

(где $\beta = (\beta^{(1)}, \dots, \beta^{(h)})^T$ — вектор параметров усреднения, $\beta x = (\beta^{(1)}x^{(1)}, \dots, \beta^{(h)}x^{(h)})^T$ — вектор), если ядро этого оператора $h(x)$ удовлетворяет условиям

$$\int_X h(x) \mu_h(dx) = 1, \quad \int_X h(x) (x^{(1)})^{n_1} \dots (x^{(h)})^{n_h} \mu_h(dx) = 0,$$

$$0 < \sum_{j=1}^h n_j \leq a.$$

Будем, кроме того, предполагать, что функция $h(x)$ $a+1$ раз непрерывно дифференцируема.

Дифференцирующим оператором усреднения оценки градиента порядка a ($a \geq 1$) называется оператор, переводящий функцию η , заданную на $X = \mathbf{R}^h$ в вектор-функцию $\hat{\eta}'$, заданную на \mathbf{R}^{2h} по формуле

$$\hat{\eta}'(x, \beta) = \beta^{-1} \int_X g(x') \eta(x - \beta x') \mu_h(dx'),$$

где

$$\hat{\eta}'(x, \beta) = (\hat{\eta}'_1(x, \beta), \dots, \hat{\eta}'_h(x, \beta))^T,$$

$$\beta^{-1}g(x) = \left(\frac{g_1(x)}{\beta^{(1)}}, \dots, \frac{g_h(x)}{\beta^{(h)}} \right)^T,$$

если выполнены условия

$$\int_X g_i(x) x^{(j)} \mu_h(dx) = -\delta_{ij},$$

$$\int_X \bar{g}_i(x) (x^{(1)})^{n_1} \dots (x^{(h)})^{n_h} \mu_h(dx) = 0, \quad 0 \leq \sum_{j=1}^h n_j \leq a, \quad \sum_{j=1}^h n_j \neq 1.$$

Будем, кроме того, предполагать, что функции $g_i(x)$ ($i = 1, \dots, \dots, k$) а раз непрерывно дифференцируемы.

Свойства $\hat{\eta}(x, \beta)$ и $\hat{\eta}'(x, \beta)$ существенно зависят от величины параметра усреднения β . Так, асимптотически (при $\beta \rightarrow 0$) в точках непрерывности функции η

$$|\eta(x) - \hat{\eta}(x, \beta)| = O(\|\beta\|^{\alpha+1}),$$

а в точках дифференцируемости $\eta(x)$

$$\|\nabla \eta(x) - \hat{\eta}'(x, \beta)\| = O(\|\beta\|^\alpha).$$

С другой стороны, увеличение параметра β приводит к усилению сглаживающего действия операторов усреднения.

Если $g(x) = \nabla h(x)$ и, следовательно, $\hat{\eta}'(x, \beta) = \nabla_x \hat{\eta}(x, \beta)$, то дифференцирующий оператор называется *потенциальным*. Далее будем предполагать, что это условие выполнено.

Можно было бы вместо поиска максимума функции $\eta(x)$ использовать тот или иной регулярный или поисковый алгоритм поиска максимума функции $\hat{\eta}(x, \beta)$ при некотором $\beta > 0$, но прямое вычисление $\hat{\eta}(x, \beta)$ или $\nabla_x \hat{\eta}(x, \beta)$ потребовало бы многократного вычисления функции η . Более целесообразно использовать несмещенную статистическую оценку $\hat{\eta}'(x, \beta)$:

$$\hat{\eta}'(x, \beta, N) = \frac{1}{N\beta} \sum_{j=1}^N \frac{g(x_j)}{p(x_j)} \eta(x - \beta x_j),$$

где $N \geq 1$, x_j ($j = 1, \dots, N$) — независимые реализации случайного вектора, имеющего распределение с плотностью $p(x)$:

$$p(x) > 0 \text{ при всех } x \in \left\{ x \in X \mid \sum_{i=1}^k g_i^2(x) > 0 \right\}.$$

Для сходимости с вероятностью 1 алгоритма

$$x_{n+1} = x_n + \gamma_{n+1} \hat{\eta}'(x_n, \beta_n, N)$$

достаточно требовать выполнения условия А, сформулированного в п. 1, для функции $\hat{\eta}(x, \beta)$ и условия $\beta_n \rightarrow \beta$ ($n \rightarrow \infty$), а сходится этот алгоритм к точке x_β , в которой $\nabla_x \hat{\eta}(x_\beta, \beta) = 0$. Из свойств операторов усреднения вытекает, что при малых β точка x_β достаточно хорошо оценивает одну из точек x^* : $\nabla \eta(x^*) = 0$.

Если в рассмотренном алгоритме положить $\|\beta_n\| \rightarrow 0$, то этот алгоритм становится поисковым алгоритмом отыскания точки x^* : $\nabla \eta(x^*) = 0$, и для его исследования можно применить результаты, сформулированные в п. 2. Заметим, что в этом случае, для того чтобы обеспечить сходимость алгоритма, приходится налагать условия гладкости на $\eta(x)$.

Кроме рассмотренной задачи планирования экспериментов по поиску экстремума недифференцируемой функции регрессии,

сглаживание функций путем рандомизации переменных используется при построении алгоритмов поиска максимума многоэкстремальной функции (см. § 4.4) и функции, определенной на дискретном подмножестве, являющемся подмножеством \mathbf{R}^k (последняя задача заменяется на задачу поиска экстремума гладкой функции, заданной на \mathbf{R}^k ; полученное решение рассматривается как приближенное).

5. Метод крутого восхождения. Метод крутого восхождения (Метод Бокса — Уилсона) разрабатывался и применялся для решения задач оптимизации реальных объектов и процессов, и поэтому имеет специфические особенности, хотя и может быть рассмотрен с общих позиций (см. п. 2). Суть этого метода состоит в том, что последовательно проводятся небольшие серии экспериментов (вычисляются значения случайной величины y в специальном образом определенных точках факторного пространства X), которые организуются так, чтобы по результатам проведенных экспериментов можно было легко оценить градиент функции регрессии в некоторой точке. В направлении оценки градиента проводится еще несколько экспериментов, после чего выбираются условия проведения следующей серии. Так достигается область экстремума, в которой обычно планируется серия экспериментов с целью оценивания коэффициентов квадратичной модели истинной зависимости η в окрестности точки экстремума.

Предположим, что выбрана точка $x_0 \in X$, которую без ограничения общности можно считать началом координат ($x_0 = 0$), и в окрестности этой точки строится линейная модель

$$b_0 + x^T \nabla \eta(x_0) = b_0 + b_1 x^{(1)} + \dots + b_k x^{(k)}$$

$$(x^T = (x^{(1)}, \dots, x^{(k)})).$$

Необходимо оценить градиент $\nabla \eta(x_0) = (b_1, \dots, b_k)^T$.

Если проведены эксперименты в точках x_1, \dots, x_N ($N \geq k + 1$), то оценка МНК $\hat{b} = (\hat{b}_0, \dots, \hat{b}_k)$ коэффициентов $b = (b_0, \dots, b_k)$ имеет вид (см. § 1.2)

$$\hat{b} = (F^T F)^{-1} F^T Y,$$

где

$$F = \begin{bmatrix} 1 & x_1^{(1)} & & x_1^{(k)} \\ 1 & x_2^{(1)} & \dots & x_2^{(k)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_N^{(1)} & & x_N^{(k)} \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} y(x_1) \\ y(x_2) \\ \vdots \\ y(x_N) \end{bmatrix}.$$

В методе крутого восхождения план проведения серии экспериментов выбирается таким образом, чтобы он был симметричен относительно центра проведения эксперимента, т. е.

$$\sum_{j=1}^N x_j^{(i)} = 0, \quad i = 1, \dots, k,$$

и ортогонален, т. е.

$$\sum_{j=1}^N x_j^{(i)} x_j^{(l)} = 0, \quad i \neq l, \quad i, l = 1, \dots, k.$$

Если план $\xi = \{x_1, \dots, x_N\}$ выбран в таком виде, то информационная матрица $F^T F$ диагональна, и вычисление вектора \hat{b} не представляет затруднений.

Если каждый фактор $x^{(1)}, \dots, x^{(k)}$ варьировать на двух уровнях: $x^{(i)} = \pm a_i$ ($a_i > 0$ выбираются из априорных соображений), то

$$\hat{b}_0 = N^{-1} \sum_{j=1}^N y(x_j), \quad \hat{b}_i = N^{-1} \sum_{j=1}^N a_i^{-2} x_j^{(i)} y(x_j), \quad i = 1, \dots, k.$$

В качестве плана экспериментов в каждой серии обычно выбирают полный факторный эксперимент или дробные реплики от него [67].

После того как построена линейная по параметрам модель, можно с помощью F -критерия проверить ее адекватность (см. § 1.2). Естественно, это можно делать лишь в предположении, что при любых x_1, x_2, \dots из X случайные величины $y(x_i)$ ($i = 1, 2, \dots$) взаимно независимы и нормально распределены со средними $\eta(x_i)$ и одинаковыми дисперсиями $\sigma^2 < \infty$.

Для того чтобы определить центр проведения новой серии экспериментов, в методе крутого восхождения обычно (см. также пп. 6, 7) в направлении оценки градиента $\nabla \eta(x_0)$ выбирается последовательность точек $v_i \in X$ ($i = 1, 2, \dots$), расположенных на равном и достаточно малом расстоянии друг от друга, вычисляются $y(v_i)$ ($i = 1, 2, \dots$) до тех пор, пока не выполнится неравенство $y(v_j) \leq y(v_{j-1})$. Точку v_{j-1} принимают за центр проведения новой серии экспериментов.

Решение о том, что достигнута область экстремума, обычно (см. также п. 7) принимается на основании построенной квадратичной модели и малости нормы оценки градиента.

Поскольку метод крутого восхождения является типичным поисковым алгоритмом, для анализа его сходимости можно использовать общие утверждения, сформулированные в §§ 1, 2 и п. 2.

6. Выбор длины шага в поисковых алгоритмах. Предположим, что проведена серия экспериментов в окрестности точки $x_n = 0$ и выбрано направление дальнейшего подъема из этой точки. Полупрямую, на которой будет выбираться $\tilde{x} = x_{n+1}$, запишем в параметрическом виде: $x = \lambda t$, где

$$\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_k)^T, \quad t \geq 0, \quad \|\lambda\| = \left[\sum_{i=1}^k \lambda_i^2 \right]^{1/2} = 1.$$

Если производится движение в направлении оценки $\hat{b} = (\hat{b}_1,$

... \hat{b}_i)^T градиента функции η в точке $x_n = 0$, то $\lambda_i = \hat{b}_i / \|\hat{b}_i\|$, t — расстояние от x до 0.

Пусть задана некоторая возрастающая последовательность чисел t_i ($i = 1, 2, \dots$), зависящая, возможно, от номера серии экспериментов. Обозначим $y(i) = y(\lambda t_i)$, $\eta(i) = \eta(\lambda t_i)$ ($i = 1, 2, \dots$).

Самое простое и наиболее распространенное при расчетах на ЭВМ правило выбора нового центра \tilde{x} экспериментов состоит в том, что полагают $\tilde{x} = \lambda t_1$ (см. п. 2). При использовании метода крутого восхождения обычно используют другое правило: вычисляют $y(i)$ ($i = 1, 2, \dots$) до тех пор, пока не выполнится $y(j+1) < y(j)$ и полагают $\tilde{x} = \lambda t_j$. Далее рассмотрен несколько более сложный, но и более естественный способ выбора длины шага в поисковых алгоритмах.

Предположим, что для любых \tilde{x}_i ($i = 1, 2, \dots$) из X случайные величины $\varepsilon(\tilde{x}_i) = y(\tilde{x}_i) - \eta(\tilde{x}_i)$ взаимно независимы и имеют одинаковое распределение с непрерывной функцией распределения $F(u)$ ($u \in \mathbb{R}^1$).

Положим

$$i_1 = \min\{i = 1, 2, \dots | y(i+1) < y(i)\}.$$

Требуется определить: уменьшение вычисленного значения y произошло из-за случайной ошибки или вследствие того, что $\eta(\lambda t_{i+1}) < \eta(\lambda t_i)$. Другими словами, требуется дискриминировать две гипотезы:

$$H_0^{(1)} : \eta(\lambda t) \geq \eta(t_1),$$

$$H_1^{(1)} : \eta(\lambda t) \leq m_1,$$

где $t > t_{i_1}$, m_1 — такое, что $m_1 - \eta(t_1) = \Delta$ ($\Delta < 0$). Для дискриминации этих гипотез проводится еще несколько экспериментов на прямой $x = \lambda t$ ($t > t_{i_1+1}$). Положим

$$u_i = y(i_1 + i) - y(i_1).$$

При каждом $i = 1, 2, \dots$ гипотеза $H_0^{(1)}$ принимается, если $u_i \geq b$, отвергается, если $u_i \leq a$ и проводится новое наблюдение в точке λt_{i_1+i+1} , если $a < u_i < b$. Здесь $a < 0$, $b > 0$ — числа, значения которых будут определены ниже.

Если гипотеза $H_0^{(1)}$ отвергается (это означает: считаем, что функция η в выбранном направлении начала убывать), то полагаем $x = \lambda t_{i_1}$. Если гипотеза $H_0^{(1)}$ принимается, то считаем, что $y(i_1 + 1) < y(i_1)$ благодаря случайной ошибке, а функция η в выбранном направлении пока увеличивается, и поэтому продолжаем наблюдать $y(i)$ до тех пор, пока не выполнится неравенство

$$y(i_2 + 1) < y(i_2), \quad i_2 > i_1.$$

Теперь нужно провести дискриминацию двух новых гипотез:

$$H_0^{(2)} : \eta(\lambda t) \geq \eta(i_2),$$

$$H_1^{(2)} : \eta(\lambda t) \leq m_2,$$

где $t > t_{i_2}$, $m_2 - \eta(i_2) = \Delta$. Процедура проверки гипотезы $H_0^{(2)}$ совершенно такая же, как и гипотезы $H_0^{(1)}$.

Последовательная проверка гипотез и проведение экспериментов в выбранном направлении продолжается до тех пор, пока для некоторого $j = 1, 2, \dots$, не будет отвергнута гипотеза $H_0^{(j)}$ (определяемая аналогично гипотезам $H_0^{(1)}$, $H_0^{(2)}$).

При заданных значениях a и b вероятность ошибки первого рода (отвергнуть гипотезу $H_0^{(j)}$, когда она верна) не больше чем $\alpha(a, b) = P\{u_1 < a | H_0^{(j)}, u_1 < 0\} +$

$$+ \sum_{i=2}^{\infty} P\{a < u_i < b, i = 1, \dots, l-1, a < u_l | H_0^{(j)}, u_1 < 0\} =$$

$$= F * \bar{F}(a) / F * F(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{[F(v) - F(v+a)] F(v+a)}{1 - F(v+b) + F(v+a)} dF(v),$$

где $F * F(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{F}(v-u) dF(u)$.

Аналогично, вероятность ошибки второго рода (принять гипотезу $H_0^{(j)}$, когда она неверна) не меньше чем

$$\beta(a, b) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{[F(v) - F(v+a)] [1 - F(v+b)]}{1 - F(v+b) + F(v+a)} dF(v).$$

Пусть N_j ($j = 1, 2, \dots$) — число экспериментов, необходимых для проверки гипотезы $H_0^{(j)}$, N — общее число экспериментов, требуемых для принятия при некотором $j = 1, 2, \dots$ гипотезы $H_1^{(j)}$.

Предположим, что $EN_i = EN_1$ при всех $i = 1, 2, \dots$, и распределение случайной величины $\varepsilon(x) = \varepsilon$ симметричное, т. е. $P\{\varepsilon < -u\} = P\{\varepsilon > -u\}$ для всех $u > 0$.

При возрастании $|a|$ и b вероятности ошибок первого и второго родов уменьшаются, но увеличивается среднее число экспериментов, необходимых для проверки гипотез.

Если в качестве критериев для выбора величин a и b выбрать следующие:

А) $E \left\{ N \left| \bigcap_{i=1}^{\infty} H_0^{(i)} \right. \right\} \geq \gamma,$

Б) $E \left\{ N \left| \bigcap_{i=1}^{\infty} H_1^{(i)} \right. \right\}$ минимально при выполнении А),

где число $\gamma > 0$ произвольно и задается априори, то следует положить $a = -b$, где

$$b = \min \{d > 0 \mid F * F(\frac{1}{\gamma}d) \geq (2\gamma)^{-1}\},$$

Условие А) состоит в требовании проведения в среднем не менее γ экспериментов в выбранном направлении при условии, что функция η в этом направлении возрастает. С другой стороны, если η убывает, то число экспериментов, необходимых для выявления этого (для принятия гипотезы $H_1^{(j)}$ при некотором $j = 1, 2, \dots$), должно быть минимальным. В этом состоит условие Б). При решении реальных задач в зависимости от имеющихся вычислительных ресурсов следует выбирать γ от 10 до 30.

7. Выбор направления подъема в методе крутого восхождения. Критерий для определения почти стационарной области. Предположим, что проведена серия экспериментов и с помощью метода наименьших квадратов построена оценка $\hat{b} = (\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_k)^T$ градиента функции η в точке x . Обычно при использовании метода крутого восхождения в качестве направления подъема из точки x выбирают направление, совпадающее с этой оценкой. Это обосновано тем, что в указанном направлении функция η в среднем возрастает наиболее быстро. Однако за счет наличия случайных ошибок функция η в этом и любом другом выбранном направлении может не только медленно возрастать, но и убывать. Поэтому представляет интерес и другой критерий выбора оптимального направления подъема: максимизация вероятности того, что в выбранном направлении функция η возрастает.

Пусть $e = (e_1, \dots, e_k)^T$ — вектор единичной длины ($e^T e = 1$), а функция η в точке x непрерывно дифференцируема. Тогда η в направлении вектора e возрастает в том и только в том случае, когда $e^T \nabla \eta(x) > 0$. Поэтому вероятность того, что в точке x функция η в направлении e возрастает, будем записывать как $P\{e^T \nabla \eta(x) > 0\}$.

Предположим, что для любых x_i ($i = 1, 2, \dots$) из X случайные величины $\varepsilon(x_i) = y(x_i) - \eta(x_i)$ независимы и имеют нормальное распределение со средним 0 и одинаковой дисперсией σ^2 . Предположим также, что градиент $\nabla \eta(x)$ оценивался по результатам $N \geq n + 1$ экспериментов в точках с координатами $x_i^{(j)}$ ($i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, k$) и информационная матрица Фишера M с элементами

$$m_{ej} = \sigma^{-2} \sum_{i=1}^N x_i^{(j)} x_i^{(l)}, \quad j, l = 1, \dots, k,$$

невыврождена. Тогда

$$P\{e_*^T \nabla \eta(x) > 0\} = \max_{e: e^T e = 1} P\{e^T \nabla \eta(x) > 0\} = T \left(\sqrt{\hat{b}^T M \hat{b}} \sigma_0^{-1} \right),$$

где $e_* = M \hat{b} / \|M \hat{b}\|$, e_* — вектор, на котором достигается

максимальное значение,

$$T(t) = \frac{\Gamma((N-k)/2)}{\sqrt{\pi(N-k-1)} \Gamma((N-k-1)/2)} \int_{-\infty}^t \left(1 + \frac{u^2}{N-k-1}\right)^{-(N-k)/2} du$$

есть функция распределения Стьюдента с $N-k-1$ степенями свободы,

$$\sigma_0^2 = N^{-1} \sum_{j=1}^N \left(y(x_j) - \sum_{i=1}^k \hat{b}_i x_j^{(i)} - \hat{b}_0 \right)^2$$

есть оценка остаточной дисперсии.

Таким образом, вектор $e_* = \|M\hat{b}\|^{-1}M\hat{b}$ определяет направление подъема из точки x , наилучшее в том смысле, что вероятность возрастания функции η в этом направлении максимальна.

Получающийся алгоритм экстремального планирования является псевдоградиентным, а условия его сходимости те же, что и условия сходимости обычного метода крутого восхождения (см. п. 2).

При планировании экстремальных экспериментов важно уметь вовремя определять то множество $X_0 \subset \tilde{X} \subset \mathbb{R}^k$, в котором достигается искомый локальный максимум функции η .

Если гипотеза о том, что в точке $x \in \tilde{X}$ функция η стационарна (т. е. $\nabla\eta(x) = 0$), справедлива, то распределение статистики

$$G(x) = \sigma_0^{-2} \hat{b}^T(x) M(x) \hat{b}(x)$$

есть F -распределение Фишера со степенью свободы числителя — единица и $N-k-1$ степенями свободы знаменателя. Поэтому множество X_0 можно считать почти стационарным, если

$$\max_{x \in X_0} G(x) < F_{1, N-k-1, \alpha},$$

где $0 < \alpha < 1$, $F_{1, N-k-1, \alpha} = 100(1-\alpha)$ -процентное значение F -распределения с 1 и $N-k-1$ степенями свободы, α — заданный уровень доверия.

Почти стационарное множество можно определять также на основе построения полиномиальной модели второго или третьего порядков изучаемой зависимости в некоторой подобласти X [67].

8. Симплексный метод. Симплексный метод широко используется при экспериментальной оптимизации. Его суть состоит в том, что движение к точке максимума функции η , заданной на $X = \mathbb{R}^k$ ($k \geq 1$), осуществляется последовательным отражением вершин симплекса.

k-мерным симплексом называется многогранник, образованный $(k+1)$ -й точкой (вершиной), не принадлежащей одновременно ни одному подпространству меньшей размерности. Симплекс называется *регулярным*, если расстояния между его вершинами равны.

Регулярные симплексы с длиной ребра $L > 0$ строятся следующим образом. Введем матрицу размера $k \times (k + 1)$:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ p_h & q_h & q_h \\ q_h & p_h & q_h \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ q_h & q_h & p_h \end{bmatrix},$$

где

$$q_h = \frac{L}{k\sqrt{2}}(\sqrt{k+1}-1), \quad p_h = \frac{L}{k\sqrt{2}}(\sqrt{k+1}+k-1).$$

Координаты x_{ji} ($i = 1, \dots, k$, $j = 1, \dots, k + 1$) вершин x_j ($j = 1, \dots, k + 1$) регулярного симплекса с вершиной x_1 в начале координат определяются строками матрицы A . Координаты вершин регулярного симплекса с центром в начале координат определяются строками матрицы

$$\begin{bmatrix} -r_1 & -r_2 & -r_3 & \dots & -r_{k-1} & -r_k \\ R_1 & -r_2 & -r_3 & \dots & -r_{k-1} & -r_k \\ 0 & R_2 & -r_3 & \dots & -r_{k-1} & -r_k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & R_k \end{bmatrix},$$

где $r_i = L(2i(i+1))^{-1/2}$, $R_i = Li^{1/2}(2(i+1))^{-1/2}$, $i = 1, \dots, k$,

r_i , R_i — радиусы вписанной и описанной сфер для i -мерного регулярного симплекса с длиной ребра L .

Наиболее простым симплексным методом является последовательный симплексный метод, в основе которого лежит зеркальное отражение регулярных симплексов относительно граней, противоположных вершинам, в которых значение случайной величины y наименьшее.

Основные правила работы этого метода на n -м шаге ($n \geq 1$) состоят в следующем.

1°. Отобрать наименьшее значение y_i из y_1, \dots, y_{k+1} , измеренных в вершинах симплекса S_{n-1} . Построим новый симплекс S_n , заменив точку x_i , в которой было вычислено y_i , новой точкой x'_i , координаты которой пересчитываются по формуле

$$x'_i = 2k^{-1} \sum_{j=1}^{k+1} x_{ji} - (1 + 2k^{-1}) x_{ii}, \quad i = 1, \dots, k.$$

2° Если результаты применения правила 1° приводят к тому, что последовательность симплексов начинает вращаться вокруг точки, соответствующей некоторому наибольшему значению y_m (возможно, обусловленному ошибкой), то после $k + 1$ опытов надо прекратить применение правила 1° и повторить опыт в указанной точке.

3° Если значение случайной величины y'_i , вычисленной в новой точке симплекса S_n , оказалось снова наименьшим, то надо

прекратить применение правила 1° и вернуться к симплексу S_{n-1} ; отобразить вершину x_j со вторым наименьшим значением y и зеркально отразить симплекс S_{n-1} относительно грани, противоположной x_j (для этого надо воспользоваться формулой из правила 1°).

Теоретически последовательный симплексный метод не сходится к точке максимума функции η . Богатый же практический опыт по использованию этого метода для поиска максимума одноэкстремальных функций показывает, что с его помощью удается достаточно быстро отыскивать область максимума (и отслеживать ее, если функция η нестационарна) при решении многих задач (в том числе при проведении промышленных экспериментов), в которых измерение контролируемых переменных $x \in X$ может проводиться с ошибкой, а случайные величины y , вычисленные в разных точках x , могут быть зависимы между собой и зависеть от времени.

Ограничения типа неравенств при проведении симплексного поиска учитываются очень просто: вершины, не удовлетворяющие ограничениям, отбрасываются.

Важным свойством регулярного k -мерного симплекса с координатами x_{ij} ($i = 1, \dots, k+1, j = 1, \dots, k$) является то, что он может быть легко достроен до регулярного $(k+1)$ -мерного по следующему правилу: $x_{i, n+1} = x_{0, k+1}$ ($i = 1, \dots, k+1$), $x_{0, n+1}$ — заданное значение нового $(k+1)$ -го параметра,

$$x_{k+2, j} = x_{0j} = (k+1)^{-1} \sum_{i=1}^{k+1} x_{ij}, \quad x_{k+2, k+1} = x_{0, k+1} + h_{k+1},$$

где x_{0j} ($j = 1, \dots, k$) — координаты центра исходного симплекса в момент его достройки, $h_{k+1} = R_{k+1} + r_{k+1} = L(k+2)^{1/2} \times \times (2(k+1))^{-1/2}$. Указанное свойство позволяет в ходе оптимизации новые управляемые параметры без потери полученных результатов.

Длина шага поиска в последовательном симплексном методе равна расстоянию между центрами соседних симплексов и равна $L\sqrt{2}(k^2+k)^{-1/2}$. Математическое ожидание смещения центра симплекса вдоль направления наискорейшего подъема за один шаг равно $L\sqrt{6}k(k+1)(k+2)^{-1/2}$. Это, в частности, показывает, что последовательный симплексный метод является псевдоградиентным.

Постоянный размер симплекса не обеспечивает одновременно высокую скорость движения симплекса в начале поиска и точность отыскания экстремума в его конце. Поэтому обычно размеры симплекса уменьшают с ростом номера шага.

Ниже приведена типичная модификация последовательного симплексного метода, в которой размер симплекса на каждом шаге уменьшается. После отражения симплекса на n -м шаге выбирается вершина, в которой случайная величина y приняла наибольшее значение, начало координат переносится в эту точ-

ку, после чего координаты остальных вершин преобразуются по формуле

$$x'_{ij} = L_n x_{ij}, \quad i = 1, \dots, k+1, \quad j = 1, \dots, k;$$

значения случайной величины y для вершин нового симплекса не вычисляют, а используют ее значения в соответствующих вершинах старого (исключение составляют те вершины, в которых в течение $k+1$ предыдущих шагов значения y не вычислялись). Последовательность L_n , определяющая закон изменения длин ребер симплексов, и длина ребра начального симплекса выбираются из априорных соображений о желательной скорости движения симплекса на начальном и конечном этапах поиска.

Симплексный поиск обладает тем свойством, что изменение длины шага в направлении псевдоградиента ($\gamma_n > 0$) однозначно связано с изменением интервала варьирования, или длины «пробного шага» (α_n). Отсюда следует, что условие $\gamma_n \alpha_n^{-1} \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$), необходимое для сходимости (в различных смыслах) поисковых алгоритмов при наличии аддитивной случайной ошибки, не выполняется; следовательно, алгоритмы симплексного поиска не обладают теоретическим свойством сходимости.

Литература к § 4: [1, 17, 18, 43, 49, 50, 67*, 69, 78, 96, 169].

ПЛАНИРОВАНИЕ ОТСЕИВАЮЩИХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

§ 1. Основные понятия

1. Введение. Во многих явлениях, зависящих от большого числа факторов, бывает естественно предположить существование небольшого числа значимых факторов (или эффектов), которые управляют явлением, а влияние остальных факторов считать не превосходящим ошибку эксперимента. Эксперименты по поиску значимых факторов называются *отсеивающими*, а теория их планирования называется *теорией отсеивающих экспериментов* (ОЭ).

Одна из возможных математических моделей ОЭ такова. Имеется функция отклика $\eta(x, \theta)$, зависящая от управляемых переменных (факторов) $x = (x(1), \dots, x(t))$ и неизвестных параметров $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)$. Предполагается, что функция отклика зависит от $s < t$ значимых факторов $x(\lambda_i) (1 \leq \lambda_i \leq t, i = 1, \dots, s)$, $\lambda_i \neq \lambda_j$ при $i \neq j$, т. е. существует такая функция $\tilde{\eta}(x(\lambda_1), \dots, x(\lambda_s), \theta)$, что справедливо равенство

$$\eta(x, \theta) = \tilde{\eta}(x(\lambda_1), \dots, x(\lambda_s), \theta).$$

С помощью возможно меньшего числа N экспериментов (т. е. вычислений функции η , возможно, со случайной ошибкой) в точках x_1, \dots, x_N надо найти номера значимых факторов. Если последние найдены правильно, то обычно не представляет труда найти хорошие оценки для θ . Таким образом, целью ОЭ является получение решения об истинности одной из большого числа обычно равноправных гипотез о номерах значимых параметров.

Как правило, не имеет смысла говорить о близости найденных номеров к истинным: представляется необходимым точно определить номера значимых факторов. Поэтому цель теории ОЭ отличается от цели теории планирования экспериментов по оцениванию параметров, где нужно определить приближенные оценки истинных параметров.

Если N и $x_i (i = 1, \dots, N)$ зависят от результатов предшествующих экспериментов, то планирование называется *последовательным*. Если x_1, \dots, x_N заданы до начала проведения экспери-

ментов, то планирование называется *статическим*. Несмотря на большее число необходимых экспериментов, статическое планирование часто предпочтительнее с точки зрения приложений, поскольку оно позволяет, например, проводить эксперименты параллельно.

Иллюстрацией последовательного планирования ОЭ является следующая процедура, широко используемая в медицинской практике. Вместо индивидуального обследования крови большой группы доноров для выявления редкого заболевания исследуются вместе небольшие группы. Проверка позволяет обнаружить наличие хотя бы одного больного в группе. Полному обследованию далее подвергается только кровь доноров из тех групп, в которых было обнаружено заболевание. Во многих случаях указанная процедура требует значительно меньшего числа анализов, чем процедура полного индивидуального обследования.

2. Различные постановки задач теории ОЭ. Формализованная схема примера с групповыми проверками крови доноров выглядит следующим образом. Занумеруем доноров числами от 1 до N , эксперименты (состоящие в проверке на наличие заболевания крови некоторой группы доноров) — числами от 1 до t ; будем говорить, что i -й эксперимент дал результат $\eta_i = 1$, если замечено наличие инфекции в i -й группе, и $\eta_i = 0$ в противном случае.

Статическим планом эксперимента называется матрица \mathcal{X} размера $N \times t$, состоящая из элементов $x_i(j)$ ($i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, t$), где $x_i(j) = 1$, если в i -м эксперименте проверялась кровь j -го донора, $x_i(j) = 0$ в противном случае.

Пусть число больных доноров равно s ($s < t$), а их номера есть $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ ($\lambda_1 < \dots < \lambda_s$); $\Lambda(s, t)$ — совокупность всевозможных номеров λ . Результат эксперимента (вычисляемый без случайной ошибки) η_i есть функция от $x_i(\lambda) = (x_i(\lambda_1), \dots, x_i(\lambda_s))$, а именно, логическая сумма (дизъюнкция) величин $x_i(\lambda_1), \dots, x_i(\lambda_s)$:

$$\eta_i = \begin{cases} 0, & \text{если все } x_i(\lambda_j) \text{ равны } 0 \ (j = 1, \dots, s), \\ 1 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

По указанной причине рассмотренная модель называется *дизъюнктивной*. Последовательное планирование для дизъюнктивной модели рассматривается в п. 3.5.

Статический план \mathcal{X} называется *сильно разделяющим над* $\Lambda(s, t)$, если различным $\lambda \in \Lambda(s, t)$ соответствуют различные наборы результатов η_1, \dots, η_t . *Скоростью сильно разделяющего плана* \mathcal{X} называется $R(\mathcal{X}) = \ln t/N$.

В приложениях полезно также рассмотрение определяемых аналогично сильно разделяющих планов и над другими множествами (в частности, над $M(s, t) = \bigcup_{i=1}^s \Lambda(i, t)$). Естественно искать сильно разделяющие планы с наибольшей скоростью R при прочих равных параметрах (см. п. 3.4).

Приведенная схема может быть обобщена в трех направлениях: а) возможна другая зависимость η_i от $x_i(\lambda)$ (в частности, интересна аддитивная модель, см. п. 3.6); б) существуют случайные погрешности при измерении η_i , которые независимы в различных экспериментах и определяются вероятностями $P(y_i|\eta_i)$, где y_i принимают конечное число значений из множества $Y = \{y^{(1)}, \dots, y^{(n)}\}$; в) исследуются планы, обеспечивающие восстановление λ с достаточно большой вероятностью.

Общая модель ОЭ естественно описывается на языке теории информации. Пусть имеется s передатчиков сообщений, у каждого из которых имеется множество $[t] = \{1, 2, \dots, t\}$ возможных сообщений, посылаемых с помощью общего для передатчиков кода \mathcal{X} , т. е. $(N \times t)$ -матрицы с элементами $x_i(j) \in \mathfrak{D} = \{0, 1\}$ ($i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, t$), по каналу связи с множественным доступом без памяти (КМД), задаваемому вероятностями $P_s\{y_i|a_{i1}, \dots, a_{it}\}$ приема дискретного символа $y_i \in Y$ при передаче в i -й момент времени двоичного s -набора чисел (слова) $a_i = (a_{i1}, \dots, a_{it})$ соответственно первым, вторым, ..., s -м по счету передатчиком (рис. 2). Предполагается, что распределение $P_s(\cdot|\cdot)$ существенно зависит от каждого из символов на входе, и последовательно во времени слова искажаются независимо друг от друга.

В статистических приложениях код \mathcal{X} называется *планом*, а $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ есть *s-набор номеров существенных факторов*, они кодируются с помощью плана \mathcal{X} в s -набор столбцов $a(i) = (x(\lambda_1), \dots, x(\lambda_s))$ плана и затем в столбец значений функции отклика $\eta_i = \eta(a_{i1}, \dots, a_{it})$. *Распределение измерений* y_i обычно определяется переходными вероятностями

$$P_s(y_i|\eta_i) = P_s(y_i|x_i(\lambda_1), \dots, x_i(\lambda_s)).$$

Ввиду того, что номера существенных факторов не совпадают, между сообщениями различных передатчиков имеется зависимость (которая почти исчезает при $t \rightarrow \infty, s = \text{const}$). Это обстоятельство, а также идентичность кода для всех передатчиков, отличает приведенную схему от рассматриваемых в теории информации.

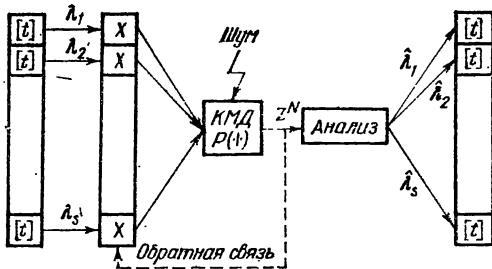


Рис. 2. Схема канала с множественным доступом (КМД) при совпадении кодов x для всех источников.

Для дизъюнктивной модели соответствующий КМД обладает симметрией: при перестановке индексов у символов на входе распределение выхода не меняется. Из-за этого нельзя восстановить источник передачи того или иного символа. В общем случае обозначим через πa результат действия элемента π из группы перестановок Σ_s индексов $1, \dots, s$ на s -набор a входных символов $a = (a_1, \dots, a_s)$ и через $\pi\lambda$ — результат такого же действия на s -набор (слово) сообщений

$$\lambda \in [t]^s = \{(\lambda_1, \dots, \lambda_s) | \lambda_i \in [t]\}.$$

Пусть Σ_{0s} — подгруппа Σ_s , все элементы которой оставляют неизменным распределение на выходе КМД. Через $\mathcal{K}(\lambda)$ далее обозначен класс смежности $[t]^s$ по Σ_{0s} , содержащий λ , а через $\mathfrak{B}^{N \times t} = \mathfrak{B}^{N \times t}$ — множество $(N \times t)$ -планов.

Решающая функция приемника есть отображение $d: \mathfrak{B}^{N \times t} \times Y^N \rightarrow [t]^s$. Ошибка происходит, если при передаче слова $a \in [t]^s$ оказывается, что $d(\mathcal{Z}, y) \notin \mathcal{K}(a)$. Вероятность ошибки обозначается через $\mathcal{P}(a, \mathcal{Z}, d)$.

Предположим, что на $[t]^s$ (или на $\mathfrak{M}(s, t) = \bigcup_{i=1}^s [t]^i$) задано априорное вероятностное распределение Q . Тогда средней вероятностью ошибки решения d для кода \mathcal{Z} является —

$$\mathcal{P}(\mathcal{Z}, d, Q) = \sum Q(a) \mathcal{P}(a, \mathcal{Z}, d) = E_Q \mathcal{P}(a, \mathcal{Z}, d),$$

Код \mathcal{Z} называется (γ, d, Q) -кодом, если $\mathcal{P}(\mathcal{Z}, d, Q) \leq \gamma$. Известно решение, минимизирующее $\mathcal{P}(\mathcal{Z}, d, Q)$ при фиксированных \mathcal{Z} и Q — это решение

$$\delta = \arg \max_{\lambda \in [t]^s} P_s(y | x(\lambda_1), \dots, x(\lambda_s));$$

максимальной апостериорной вероятности. В тех случаях, когда используется решение δ и равномерное распределение Q^* на $[t]^s$, их символы будут опускаться (например, $\mathcal{P}(\mathcal{Z})$ обозначает $\mathcal{P}(\mathcal{Z}, \delta, Q^*)$).

Назовем γ -разделяющие планы *сильно разделяющими*, если $\gamma = 0$ и *слабо разделяющими*, если $\gamma > 0$.

Наиболее изученным в теории планирования ОЭ является важный вопрос о том, как должно зависеть N от t и других параметров модели, чтобы существовал γ -разделяющий план, причем γ стремилось бы к нулю при $t \rightarrow \infty$ хотя бы как угодно медленно. Соответствующие результаты формулируются в терминах предельной скорости $C(s)$ слабо разделяющего плана. Существуют γ -разделяющие планы с любой скоростью $R < C(s)$ и сколь угодно малой γ (даже убывающей экспоненциально по N), в то время как

$$\liminf_{t \rightarrow \infty} \left\{ \mathcal{P}(\mathcal{Z}) | \mathcal{Z} \in \bigcup_{i=1}^N \mathfrak{B}^{i \times t}, R(\mathcal{Z}) > C(s) \right\} \geq a > 0.$$

Эти результаты обобщают исследования пропускной способности КМД в теории информации. Различные выражения для $C(s)$ приведены в пп. 2.1, 2.2. Полностью аналогичная ситуация с γ -разделяющими планами имеет место для более сложной задачи, где про семейство распределений $P_s(\cdot|\cdot)$, определяющее КМД, известно лишь, что оно принадлежит некоторому классу \mathcal{P} (возможно, бесконечному) и требуется восстановить как число существенных факторов, так и их номера. Соответствующая предельная скорость $C_{\mathcal{P}}$ приведена в п. 2.3.

В приложениях желательно заменить решение δ , требующее при больших t, s астрономического объема (порядка t^s) операций при его построении, на более просто вычисляемое решение хотя бы за счет некоторого увеличения числа экспериментов при той же вероятности ошибки. Некоторые результаты, полученные в этом направлении, описаны в п. 2.4. Приведенные в пп. 2.1—2.4 факты иллюстрируются в п. 2.5 на важном для приложений примере отсеивания для линейной регрессионной модели.

В § 3 приведены границы для скорости сильно разделяющих планов в общем случае планирования ОЭ для измерений, вычисляемых без случайной ошибки (п. 3.2), более точные значения указанных границ и способы построения сильно разделяющих планов для дизъюнктивной, аддитивной и однородной (возникающей при $s = 1$) моделей.

§ 2. Слабо разделяющие планы

1. Предельная скорость отсеивающего плана при известном распределении измерений. Ниже сформулирован в некотором отношении исчерпывающий асимптотический результат о предельной скорости отсеивающего плана для известного КМД. Для формулировки этого результата требуется ряд новых понятий.

Пусть случайная строка $\xi \in \mathfrak{B}^t$ имеет распределение

$$P_{\beta}(\xi = x) = P_{\beta}(x) = \prod_{j=1}^t p(x(j)),$$

где $p(1) = 1 - p(0) = \beta$. При фиксированных посылаемом слове $\lambda_0 = (t, \dots, s) \in [t]^s$ и КМД $P_s(\cdot|\cdot)$ — распределение P_{β} на \mathfrak{B}^t индуцирует совместное распределение P_{β} на $\mathfrak{B}^t \times Y$:

$$P_{\beta}(\xi = x, \zeta = y) = P_{\beta}(x)P_s(y|x(\lambda_0)).$$

Далее под $U(r, s)$ понимается множество неупорядоченных подмножеств $\{v\} \subset [s]$ мощности $\text{card}\{v\} = r$; $U(s) = \bigcup_{r=0}^{s-1} U(r, s)$; $\{v\}^c = [s] \setminus \{v\}$ для $\{v\} \in U(r, s)$; $x\{v\}$ — набор значений $x(i)$, сопоставляемых величинам $i \in \{v\}$. Условная информация по Шеннону определяется так

$$I_{\beta}\{v\} = I_{P_{\beta}}(\zeta \wedge \xi\{v\} | \xi\{v\}^c).$$

где для случайных векторов ζ, ξ и случайной величины κ , имеющих совместное распределение P , $I_P(\kappa \wedge \zeta | \xi)$ есть математическое ожидание

$$E_P \ln (P(\kappa | \zeta, \xi) / P(\kappa | \xi)).$$

Пусть $C(s)$ — цена игры, в которой один из игроков выбирает $\beta \in D = [0, 1]$, а второй — $\{v\} \in U(s)$ с платежной функцией

$$J_\beta\{v\} = I_\beta\{v\} / \text{card}\{v\},$$

т. е.

$$C(s) = \sup_{\mu \in D^*} \min_{\{v\} \in U(s)} J_\mu\{v\} = \max_{v \in U^*(s)} \min_{\beta \in D} \int J_\beta\{v\} d\nu\{v\},$$

где A^* — множество вероятностных мер, заданных на борелевских подмножествах множества A , $J_\mu\{v\} = \int J_\beta\{v\} d\mu(\beta)$.

Положим

$$\gamma(N, t, Q) = \min_{\mathcal{X} \in \mathfrak{B}^{Nt}} \mathcal{P}(\mathcal{X}, Q), \quad l(t, R) = -\ln \gamma(N, t) / N$$

при $R = \ln t / N$.

Справедлив следующий результат, являющийся основным в данном пункте.

1) При $R(\mathcal{X}) > C(s)$ имеет место оценка $\mathcal{P}(\mathcal{X}) > a(R) > 0$.

2) При $R(\mathcal{X}) < C(s)$ выполняется неравенство $\lim_{t \rightarrow \infty} l(t, R, Q_i) > 0$ для любого Q_i .

Таким образом, для $Q_t = Q_t^*$ асимптотически при $t \rightarrow \infty$ скорость $R = C(s)$ является пограничной: существуют планы с любой меньшей скоростью при любом априорном распределении Q_t , для которых вероятность ошибки экспоненциально мала:

$$\mathcal{P}(\mathcal{X}, Q_t) \leq \exp\{-Nl^*\}, \quad l^* > 0,$$

тогда как при $R > C(s)$ и $Q = Q_t^*$ вероятность ошибки больше положительной постоянной (и даже стремится к 1 при $t \rightarrow \infty$).

Значение предельной скорости сохраняется и для априорных распределений, близких по вариации к равномерному на $[t]^s$, например для равномерного на $[t]^s \setminus A_t$, $\text{card } A_t = o(t^s)$ ($t \rightarrow \infty$). Это вытекает из следующего общего утверждения.

Если расстояние по вариации между априорными распределениями Q_t и Q_t' на $[t]^s$ есть $o(\gamma_t)$ при $t \rightarrow \infty$, то (γ_t, Q_t) -разделяющий план является (γ_t', Q_t') -разделяющим, причем $\gamma_t' \sim \gamma_t$ при $t \rightarrow \infty$.

2. Ординарные модели. Величину $C(s)$ предельной скорости, вообще говоря, довольно трудно отыскать аналитически (и даже численно). Это проще сделать для ординарных КМД, под которыми понимаются такие КМД, для которых минимаксная стратегия по $\{v\}$ есть пустое множество. Для ординарных моделей $C(s) = \max_{\beta \in D} I_\beta\{\emptyset\} / s$.

Одно из достаточных условий ординарности таково:

КМД $P_s(\cdot | \cdot)$ ординарен, если для любых параметра рандомизации $\beta \in D$ и перестановки $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_s) \in \Sigma_s$ справедливо неравенство $I(u, \pi) \leq I(u+1, \pi)$ для всех $u = 1, \dots, s-1$, где

$$I(u, \pi) = I(\xi \wedge \xi(\pi_u) | \xi(\pi[u-1])), \quad \pi[u] = (\pi_1, \dots, \pi_u).$$

Приведенное условие обычно нетрудно проверить для реальных КМД. В частности, с его помощью доказаны следующие утверждения.

1) Если КМД симметричен, т. е. $P_s(\cdot | a) = P_s(\cdot | \pi a)$ для любой перестановки $\pi \in \Sigma_s$, то он ординарен (в частности, КМД дизъюнктивной модели ординарен).

2) КМД без шума, для которого

$$\eta(a) = a_1 + \sum_{i=2}^s a_i \pmod{2}$$

не ординарен при $s > 3$.

3. Предельная скорость отсеивающего плана при неизвестном распределении измерений. Для приложений важно изучение предельной скорости отсеивающего плана в ситуации, когда, кроме номеров значимых факторов, нужно определить их число r ; если известно, что $r \leq s$. Эта ситуация описывается следующей общей схемой.

Пусть дана совокупность переходных вероятностей

$$P_r^{(a)}(y | b^{(r)}), \quad y \in Y = \{y^{(1)}, \dots, y^{(n)}\}, \\ b^{(r)} \in \mathfrak{B}^r, \quad A = \{(r, a) \mid r \in [s], a \in \mathcal{A}_r\}$$

и для любых двух пар $(r_1, a_1) \in A$ ($r_1 \leq r_2$) найдется такое входное слово $b^{(r_2)}$, что распределение на выходе $P_{r_2}^{(a_2)}(\cdot | b^{(r_2)})$ не совпадает хотя бы с одной из мер $P_{r_1}^{(a_1)}(\cdot | b^{(r_1)})$, в которой набор $b^{(r_1)}$

образован пропуском $r_2 - r_1$ компонент слова $b^{(r_2)}$. Пусть $\Sigma(r) = \{\pi \in \Sigma_r \mid \exists a, a' \in \mathcal{A}_r : P_r^{(a)}(\cdot | b_2^{(r)}) = P_r^{(a')}(\cdot | \pi b^{(r)}) \forall b \in \mathfrak{B}^r\}$. Для простоты предполагается, что $\Sigma(r) = \emptyset$ для всех $r = 1, \dots, s$. Решение d определяется как отображение $\mathfrak{B}^{Nt} \times Y^N \rightarrow \bigcup_{r=1}^s [t]^r$. Решение ошибочно, если оно не совпадает с передаваемым словом. Через $\mathcal{P}(\mathfrak{B}, Q)$ обозначается средняя по распределению Q вероятность ошибки.

Пусть на A задано априорное распределение Q_A со строго положительными вероятностями $Q_A(a, r) > 0$, а Q_A^t есть соответствующее ему распределение на тройках $(a, r, [t]^r)$ при фиксированных a и r равномерное на $[t]^r$. Тогда

$$S_A = \max_{\mu \in D^*} \min_{r \leq s} \min_{a \in A_r} \min_{\{v\} \in U_r^*} J_\mu \{v\}$$

играет роль пропускной способности «составного» КМД.

Следующее утверждение аналогично основному результату п. 1.

При $R(\mathcal{X}) > C_A$ имеет место оценка $\mathcal{P}(\mathcal{X}, Q_A) > a(R) > 0$, а при $R(\mathcal{X}) < C_A$ выполняется неравенство $\lim_{t \rightarrow \infty} l(t, R, Q_A^t) > 0$.

4. Предельная скорость отсеивающего плана при пофакторном анализе. Решение δ максимальной апостериорной вероятности предполагает сравнение вероятностей $P_s(\cdot | x(\lambda))$ для всех $\lambda \in [t]^s$, что требует числа операций не менее чем порядка $t^s \ln t$. При вполне реальных для приложений величинах $t \sim 10^4$, $s \sim 10$ имеем $t^s \ln t \sim 10^{40}$, что недоступно ЭВМ. Поэтому на практике целесообразно использовать упрощенные процедуры построения решений, пусть даже за счет некоторого увеличения числа измерений при тех же вероятностях ошибок. Примером упрощенной процедуры построения решения является пофакторный анализ.

Идея пофакторного анализа состоит в проверке для каждого фактора отдельно гипотезы о его значимости, считая действие других значимых факторов «случайным фоном». *Пофакторная решающая функция* f определяется следующим образом:

$$f(\mathcal{X}, y) = (f(1), \dots, f(t)), \quad f(j) = F(x(j), y),$$

где $F(x, y) = \sum_{k=0}^s k 1_{\Delta_k}$, 1_{Δ} — индикатор множества Δ ,

$$\Delta_k = \{(x, y) | l_k(x, y) > \max_{m \neq k} \{ \kappa_u(k), \max_{m \neq k} l_m(x, y), k \in [s] \} \},$$

$$\Delta_0 = \mathfrak{X}^N \times Y^N \setminus \bigcup_{k=1}^s \Delta_k,$$

$$l_k(x, y) = \ln [P(\zeta = y | \xi(k) = x) / P(\zeta = y)],$$

$\kappa_u(k)$ — заданные пороги.

Таким образом, $F(x(j), y)$ есть решение максимальной апостериорной вероятности, принимающее значение $k \in [s]$, когда j -й фактор считается k -м по счету значимым, и нуль, если незначимым. При этом влияние остальных значимых факторов на выход y считается случайным фоном (что естественно при случайном выборе плана).

Решение правильно, если передаваемое слово w неотличимо от $(f^{-1}(1), \dots, f^{-1}(s))$, где $f^{-1}(k) = \{n | f(n) = k\}$. Положим

$$S_h(y, n | z) = \sum_{B_{n,h,z}} P_s(y | a), \quad T_{jh}(y, n | z) = \sum_{C_{njhz}} P_s(y | a),$$

где

$$B_{n,h,z} = \left\{ a | a_h = z, \sum_{m=1}^s a_m = n + z \right\},$$

$$C_{njhz} = \left\{ a | a_j = 1 \rightarrow a_h = z, \sum_{m=1}^s a_m = n + 1 \right\}.$$

Справедлив следующий результат:

$$\max \{R(\mathcal{X}): \mathcal{P}(x; f, Q_i^*) \leq \gamma\} \geq L(1 + o(1)), \quad t \rightarrow \infty,$$

при $|\ln \gamma| = o(\ln t)$ и

$$\kappa_u(k) = NI_{\mu^*}(\zeta, \xi(k)) - u \sqrt{N},$$

где u — некоторое положительное число, а μ^* — то распределение из D^* , на котором достигается минимакс в определении L :

$$L = \max_{\mu \in D^*} \min_{k \in [s]} \int_0^1 I_\beta(\zeta, \xi(k)) d\mu(\beta).$$

Величина $L > 0$, если выполнены условия:

а) $S_k(\cdot, \cdot | 0) \not\equiv \int_k(\cdot, \cdot | 1)$ для всех $k = 1, \dots, s$;

б) $T_{jk}(\cdot, \cdot | 0) \not\equiv T_{jk}(\cdot, \cdot | 1)$ для всех $k, j = 1, \dots, s$,
если КМД не симметричен по a_j и a_k .

Условие а) является условием неотличимости действия всех значимых факторов от случайного фона при пофакторном анализе; это условие выполняется, например, если КМД $P_s(\cdot | \cdot)$ симметричен, т. е. $\Sigma_{0s} = \Sigma_s$. Условие б) является условием неразличимости между собой влияния значимых факторов при пофакторном анализе. Условия а) и б) выполнены, если ранг матрицы $P_s(y|a)$ размера $2^s \times \text{card } Y$ равен числу несовпадающих строк.

5. Случай билинейной регрессионной модели. Пусть при заданном плане $\mathcal{X} = (x_i(\alpha))$ измеряются величины $\eta_i = \sum_{\alpha=1}^t \theta_\alpha x_i(\alpha)$, причем среди неизвестных параметров $\theta_1, \dots, \theta_s$ лишь $s < t$ отличны от нуля, т. е. значимы. Такая модель (рассматриваемая без ошибок измерений) часто встречается в приложениях и называется *билинейной*. Ниже приведен последовательный план поиска значимых факторов этой модели, а также предельная скорость статического отсеивающего плана.

Последовательная стратегия поиска значимых факторов позволяет находить их вместе с их числом s не более чем за

$$(s+1) \log_2(s+1) + \log_2 t - (s-1) \log_2(e/2)$$

измерений, если величины $\theta_1, \dots, \theta_s$ значимых параметров билинейной модели удовлетворяют следующему условию несоизмеримости: из условия $\sum_{i=1}^s \theta_i \varepsilon_i = 0$ для некоторых $\varepsilon_i \in \{-1, 0, +1\}$ следует, что $\varepsilon_i = 0$ при любом $i = 1, \dots, s$.

Стратегия поиска состоит в следующем. С помощью первого эксперимента, в котором все факторы находятся на верхнем уровне, определяется $\eta_1 = \sum_{i=1}^s \theta_i$. Во втором измерении на верхнем уровне располагается первая половина факторов (если число рас-

смаатриваемых факторов нечетно, то подразумевается, что берется целая часть половины числа факторов).

Эксперименты делятся на два класса. Эксперименты второго класса разбиваются на несколько частей (циклов), но до, между и после них могут проводиться эксперименты первого класса.

Пусть после эксперимента η_n первого класса или последнего эксперимента цикла, а также после измерения η_i факторы разбиты на $r + 1$ подмножеств G_i^n ($i = 0, 1, \dots, r, r \geq 1$), причем G_0^n не содержит значимых факторов, а в остальных есть хотя бы по одному значимому и известны

$$\sum_{j \in G_i^n} \theta_j = \sigma_i^{(n)}, \quad i = 1, \dots, r.$$

В следующем эксперименте на верхнем уровне располагается первая по порядку половина факторов из G_i^n ($i = 1, \dots, r$). Если

$$\eta_{n+1} \in R(\sigma_1^{(n)}, \dots, \sigma_r^{(n)}) = \left\{ \sum_{i=1}^r \varepsilon_i \sigma_i^{(n)}, \varepsilon_i = 0, 1 \right\},$$

то значимые факторы из G_i^n находились на нижнем или верхнем уровне и, следовательно, можно определить множества G_i^{n+1} ($i = 1, \dots, r$), которые будут содержать вдвое меньше факторов, чем G_i^n ; эксперимент, состоящий в измерении η_{n+1} , относится в этом случае к первому классу. Если же $\eta_{n+1} \notin R(\sigma_1^{(n)}, \dots, \sigma_r^{(n)})$, то указанный эксперимент является первым из цикла экспериментов второго класса. Целью цикла является определение того, в каких из множеств \mathcal{A}_i^j ($i = 1, \dots, r, j = 0, 1$) есть значимые факторы и вычисление $\sum_{m \in \mathcal{A}_i^j} \theta_m$. Здесь \mathcal{A}_i^j есть множество факторов из G_i^n , находящихся на уровне j .

В среднем каждое измерение в приведенной процедуре дает порядка s битов информации, одновременно уменьшая приблизительно вдвое неопределенность в знании номера каждого из значимых факторов.

Поскольку каждое измерение статического плана не может уменьшить более чем вдвое неопределенность в знании номера каждого значимого фактора, предельная скорость отсеивающего статического плана для билинейной модели не может быть больше 1. Приведенная последовательная стратегия такую скорость обеспечивает. Оказывается, что этой предельной скорости можно достичь и статическим планом, если величины значимых коэффициентов $\theta_1, \dots, \theta_s$ несоизмеримы над полем рациональных чисел. Это следует из более точной, чем приведенная в п. 3, оценки для предельной скорости отсеивающего плана: если

$$N \geq s + \log_2[(t - s + 1)/\gamma],$$

то существует план со средней (по равномерному априорному рас-

пределению на $\Lambda(s, t)$ вероятностью ошибки, меньшей γ . Предельная скорость статического отсеивающего плана для билинейной модели при квантованных измерениях (конечный выходной алфавит) может быть получена из результатов, сформулированных в п. 3.

§ 3. Сильно разделяющие планы

1. Модель Реньи. Удобную общую схему, в которую включаются задачи теории ОЭ при отсутствии ошибок измерений, предложил Реньи в работах по теории поиска. Пусть надо найти элемент λ^* из множества $\Lambda = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ путем проведения следующих опытов: в i -м опыте выбирается и измеряется функция $f^{(i)}(\lambda^*)$ из некоторого класса \mathcal{F} функций с $m \geq 2$ значениями. План поиска определяется матрицей \mathcal{X} , i -я строка которой есть $f^{(i)} = (f^{(i)}(\lambda_1), \dots, f^{(i)}(\lambda_n))$.

План называется *отделяющим* элемент $\lambda \in \Lambda$, если для любого $\tilde{\lambda} \in \Lambda$, $\tilde{\lambda} \neq \lambda$ выполнено $f(\tilde{\lambda}) \neq f(\lambda)$, где $f(\lambda)$ — столбец с номером λ матрицы \mathcal{X} . Если план \mathcal{X} отделяет λ , то код элемента λ (столбец $f(\lambda)$) не совпадает ни с каким другим столбцом матрицы \mathcal{X} и, следовательно, λ можно однозначно восстановить по результатам измерений.

Существование сильно разделяющих планов эквивалентно выполнению следующего условия разделяемости системы \mathcal{F} : система \mathcal{F} называется *разделяющей* на Λ , если для любых $\lambda, \mu \in \Lambda$ существует $f^{(i)} \in \mathcal{F}$, для которой $f^{(i)}(\lambda) \neq f^{(i)}(\mu)$.

В качестве примера сведения схемы ОЭ к схеме поиска ниже рассмотрена проверочная матрица X линейного кода, исправляющего s или меньше ошибок в t кодовых столбцах. Эта матрица составлена из чисел $0, 1, \dots, q-1$ и обладает тем свойством, что все покомпонентные суммы по модулю q любых совокупностей $m \leq s$ кодовых столбцов, называемых *m -синдромами*, должны быть различны. Если обозначить через Λ^m совокупность всех неупорядоченных m -наборов целых чисел u ($1 \leq u \leq t$), ввести

$$\Lambda = \bigcup_{m=1}^s \Lambda^m$$
 и составить матрицу \mathcal{X} из всех синдромов, отвечающих различным неупорядоченным m -наборам ($m \leq s$), то \mathcal{X} — сильно разделяющий статический план. Класс \mathcal{F} состоит из функций на Λ , получающихся суммированием по модулю q из некоторой функции на Λ^1 . План \mathcal{X} полностью определяется матрицей X , которая называется *матрицей, порождающей план*.

При сведении задачи ОЭ к схеме поиска будут использоваться введенные в примере обозначения. Пусть сначала функция отклика $\eta(x)$ зависит только от факторов (управляемых переменных) x_1, \dots, x_t , которые могут принимать не более конечного числа l фиксированных значений, и η зависит лишь от $m < t$ своих аргументов с неизвестным m -набором индексов $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)$, $\eta(x) = \tilde{\eta}(x(\lambda))$.

Обычно будут рассматриваться два случая:

\mathcal{E}_s : известно, что $m = s$;

\mathcal{E}_{0s} : известно, что $0 \leq m \leq s$.

Разумна также постановка, в которой задано априорное распределение для m .

В случае симметричной $\tilde{\eta}$ и \mathcal{E}_{0s} множество Λ то же, что и в примере; для той же $\tilde{\eta}$ и \mathcal{E}_s имеем $\Lambda = \Lambda^s$. Для полностью несимметричной $\tilde{\eta}$ (т. е. меняющейся при перестановке любых двух аргументов) множество Λ — совокупность упорядоченных s -наборов.

Несколько более сложно сведение к схеме поиска задачи поиска значимых факторов при неизвестной функции $\tilde{\eta}$ из некоторого конечного класса функций. Здесь планом поиска является совокупность всех синдромов, относящихся ко всем функциям из данного класса. Аналогично поступают в ситуации, когда функция отклика зависит от неизвестных параметров, причем здесь можно рассматривать равномерно (по всем величинам значимых факторов) γ -разделяющие планы.

Последовательные планы, в отличие от статических, имеют две характеристики длительности: максимальное N^{\max} и среднее \bar{N} по априорному распределению число экспериментов плана. Основная задача теории поиска — в данном классе \mathcal{F} найти минимальную длительность N_γ или $N_\gamma^{\max}(\bar{N}_\gamma)$ γ -разделяющего соответственно статического и последовательного плана и сам план. Так как точно решить эту проблему можно лишь в редких случаях, представляет интерес нахождение асимптотически (при $n \rightarrow \infty$) оптимальных в том или ином смысле планов.

Пусть (Φ_N, P_N) — некоторые ансамбли планов, т. е. множества Φ_N планов с N строками из \mathcal{F} и некоторые распределения P_N на них; $N_\gamma^{(1)}(\lambda)$ и $N_\gamma^{(2)}(\lambda)$ — минимальное число строк N , при котором вероятность P_N соответственно отделимости элемента λ и сильной разделяемости случайного плана, распределенного на Φ_N в соответствии с мерой P_N , не меньше $1 - \gamma$; $N_\gamma^{(i)} = \max_{\lambda \in \Lambda} N_\gamma^{(i)}(\lambda)$ ($i = 1, 2$).

Следующие неравенства позволяют сводить вопросы существования γ -разделяющего статического плана к изучению асимптотики $N_\gamma^{(i)}$ ($i = 1, 2$):

$$N_\gamma^{(1)} \geq N_\gamma; \quad N_0 \leq \inf_{0 < \gamma < 1} N_\gamma^{(2)}.$$

Статистический смысл различия между $N_\gamma^{(1)}$ и $N_\gamma^{(2)}$ состоит в следующем. Если взять случайный план из $N_\gamma^{(2)}$ строк, то с вероятностью $P_{N_\gamma^{(2)}}$, не меньшей $1 - \gamma$, полученный план является сильно разделяющим, т. е. если его использовать многократно при поиске различных элементов λ , то он каждый раз дает однозначный результат. Если же зафиксировать случайный план \mathcal{E} из $N_\gamma^{(1)}$ строк,

то при каждом следующем независимом использовании плана \mathcal{F} вероятность однозначного восстановления случайного элемента λ^* с равномерным априорным распределением на Λ не меньше $1 - \gamma$, но вероятность того, что при всех сразу применениях плана ответ однозначен, может быть меньше $1 - \gamma$.

2. Однородные модели. Большая часть исследований по теории поиска, технической диагностике и др. ориентирована на самый простой из рассмотренных ранее случаев — поиск одного значимого фактора ($s = 1$) известной дискретной функции. Кроме простоты, этот случай часто адекватен реальной ситуации: например, в технической диагностике систем без избыточности надо искать обычно один дефект, после появления которого система выходит из строя, одновременное появление двух дефектов маловероятно.

В случае поиска одного значимого фактора возможны значительные усиления нижних оценок и теорем существования, приведенных в § 2.

Пусть \mathcal{F} состоит из всех m -ичных функций; веса $Q(\lambda)$ упорядочены, т. е. $Q(\lambda) \geq Q(\mu)$ при $\lambda \geq \mu$. Тогда $N_\gamma = \lceil \log_m \lambda_\gamma \rceil + 1$, где $\lambda_\gamma = \min \left\{ \lambda \mid \sum_{\mu > \lambda} Q(\mu) \leq \gamma \right\}$, $[a]$ — целая часть a ($a [a]^+ = \min \{k \mid k \text{ — целое, } k \geq a\}$).

Если распределение Q равномерное, то получающееся отсюда асимптотическое равенство $N_\gamma \sim \log_m [(1 - \gamma)n]$ ($n \rightarrow \infty$) существенно точнее как нижних, так и верхних оценок для общего случая ОЭ.

Класс \mathcal{F} , состоящий из R_1 функций, называется *однородным* на Λ , если для любых λ и μ из Λ число функций $f \in \mathcal{F}$, для которых $f(\lambda) = f(\mu)$, есть R_2 , не зависящее от λ и μ .

Для однородного класса \mathcal{F} автоматически выполняется условие: число R_3 функций $f \in \mathcal{F}$, для которых $f(\lambda) = f(\mu) = f(\nu)$, не зависит от выбора различных λ, μ, ν из Λ . Кроме того, $R_2/R_1 \geq \geq (n - 2)/[2(n - 1)]$.

Пусть $P\mathcal{F}(N, n)$ — ансамбль планов, строки которых состоят из независимых реализаций равномерно распределенного на \mathcal{F} случайного вектора, и $\bar{P}(N, n, \mathcal{F})$ — средняя вероятность ошибки по ансамблю $P\mathcal{F}(N, n)$ и равномерному распределению $Q(\lambda)$. Тогда для однородного класса \mathcal{F}

$$(n - 1)(R_2/R_1)^N - C_{n-1}^2(R_3/R_1)^N \leq \bar{P}(N, n, \mathcal{F}) \leq (n - 1)(P_2/P_1)^N$$

и средняя по ансамблю $P\mathcal{F}(N, n)$ максимальная вероятность ошибки не больше $C_{n-1}^2(R_2/R_1)^N$.

Ниже рассмотрен нетривиальный пример однородного класса, где задача построения сильно разделяющего плана решена до конца.

Пусть \mathcal{F}_n^k и $\bar{\mathcal{F}}_n^k$ — классы двоичных функций на $\Lambda = \{1, \dots, n\}$, принимающих значение 1 ровно k раз и соответственно не более k раз; $N(n, k)$ и $N(n, \leq k)$ — минимальное число строк сильно разделяющего плана для этих случаев (сами эти планы будут на-

зываются (N, n, k) - и $(N, n, \leq k)$ -кодами). Из симметрии, не ограничивая общности, можно считать, что $k \leq n/2$.

Справедливо следующее:

- а) $N(n, k) = N(n, \leq k)$;
- б) $N(n, k) \geq [2(n-1)/(k+1)]^+ = N_*(n, k)$;
- в) $N(n, k) = N_*(n, k)$ при $n > k(k+1)/2$;
- г) $N(n, k)$ есть решение уравнения

$$Nk = \sum_{r=0}^m rC_N^r + (m+1) \left(n - \sum_{r=0}^m C_N^r \right)$$

при условии $\sum_{r=0}^m C_N^r \leq n < \sum_{r=0}^{m+1} C_N^r$.

Известны также алгоритмы построения (\bar{N}, n, k) - и $(N, n, \leq k)$ -планов.

3. Границы длины сильно разделяющих статических планов.
В основе большинства методов получения нижних оценок для N лежит следующая идея: число опытов не может быть меньше, чем частное от деления количества информации, нужного для определения λ^* , на наибольшую информацию, которую можно получить в одном опыте.

Пусть сначала \mathcal{F} — класс всех m -ичных функций. Поскольку число различных столбцов длины N , равно m^N , не должно быть меньше числа гипотез n , то $N \geq [\log_m n]^+ = N_0$. Эта оценка справедлива для максимального по λ числа опытов последовательного (и тем более статического) сильно разделяющего плана. В обоих случаях эта оценка точна: можно, например, заномеровать числа в m -ичной системе счисления:

$$\lambda = a_0 + a_1 m + \dots + a_{N_0-1} m^{N_0-1}, \quad 1 \leq \lambda \leq n,$$

и в r -м опыте измерять $a_r(\lambda^*)$ — получающийся план является сильно разделяющим.

Пусть в ситуациях \mathcal{E}_s и \mathcal{E}_{0s} факторы могут варьироваться не более чем на l уровнях. Простейшая форма нижней оценки для N аналогична предыдущей:

$$\mathcal{E}_s: N \geq [\ln C_t^s / (s \ln l)]^+;$$

$$\mathcal{E}_{0s}: N \geq \left[\ln \sum_{m=0}^s C_t^m / \ln \sum_{m=0}^s l^m \right]^+.$$

Если функция отклика несимметрично зависит от своих m аргументов (т. е. меняется, если любые два аргумента поменять местами), то эти оценки можно усилить, подставив $(t)_m = \prod_{i=0}^{m-1} (t-i)$ вместо C_t^m .

Далее рассмотрен случай \mathcal{E}_s , $\gamma \geq 0$. Пусть $a_t(n_1, \dots, n_t)$ есть число комбинаций аргументов функции $\eta(\xi_1, \dots, \xi_s)$, при которых

$\tilde{\eta}$ принимает значение d_i ($i = 1, \dots, m, m \leq l^s$), если число аргументов, равных b_j , есть n_j ($j = 1, \dots, l, \sum_{j=1}^l n_j = s$);

$$\pi_i(p_1, \dots, p_l) = \sum_{n_1, \dots, n_l} a_i(n_1, \dots, n_l) p_1^{n_1} \dots p_l^{n_l}.$$

Веса π_i ($i = 1, \dots, m$) определяют меру $\pi(p_1, \dots, p_l)$.

При $t \rightarrow \infty, s = \text{const}, \gamma \leq e^{-1}$ в случае \mathcal{E}_s имеет место асимптотическое неравенство

$$N_\gamma \geq ((1 - \gamma) \ln \text{card } \Lambda - \gamma \ln \gamma) / \max_{p_1, \dots, p_l} H(\pi(p_1, \dots, p_l)),$$

где $H(\pi) = - \sum_{i=1}^m \pi^i \ln \pi_i$ — энтропия распределения π . В частности, при $\gamma = 0, 0 \ln 0 = 0$, получается нижняя граница длины статического сильно разделяющего плана.

Пусть вид функции $\tilde{\eta}$ заранее не фиксирован, а известно лишь число s ее аргументов. Пусть для определенности $\tilde{\eta}$ принадлежит A_s — множеству из 2^{2^s} функций от s переменных, принимающих значения в $\{0, 1\}$. Для $N_\gamma^{\text{п}}$ и $N_\gamma^{\text{с}}$ — минимальных чисел экспериментов последовательного и статического планов, которые являются γ -разделяющими сразу для всех $\tilde{\eta} \in A_s$, имеют место следующие неравенства:

$$\text{а) } N_\gamma^{\text{п}} \geq \log_2((1 - \gamma)(t)_s) + 2^s;$$

$$\text{б) } N_\gamma^{\text{с}} \geq ((1 - \gamma) \ln(t)_s - \gamma \ln \gamma) / h(2^{-s})$$

при $\gamma \leq e^{-1}$, где $h(p) = -p \ln p - (1 - p) \ln(1 - p)$.

Для подкласса $G_s \subset A_s$ симметричных функций справедливы более точные неравенства:

$$N_\gamma^{\text{п}} \geq \log_2((1 - \gamma) C_t^s) + s + 1;$$

$$N_\gamma^{\text{с}} \geq ((1 - \gamma) \ln(C_t^s) - \gamma \ln \gamma) / h(1 + 1/s), \quad \gamma < e^{-1};$$

кроме того, при

$$N \geq m \ln t / \ln(2^m / (2^m - 1))$$

существует статический сильно разделяющий план поиска одновременно функции $\tilde{\eta} \in A_s$ и набора ее значимых факторов, а также последовательный сильно разделяющий план поиска значимых факторов функции $\tilde{\eta} \in A_s$ со средним числом опытов $s \log_2 t + c$, где c зависит только от η .

4. Статические планы для дизъюнктивной модели. Для минимальной длины $N(s, t)$ статического сильно разделяющего плана для дизъюнктивной модели без ошибок измерений справедливы

следующие оценки:

$$N(s, t) \leq \alpha_s [s \ln t + \ln [(s-1)!]],$$

где

$$\alpha_s = 1/\ln(1 + \beta^s - \beta^{s-1}), \quad \beta = (s-1)/s;$$

$$N(s, t) \geq K_s \ln t(1 + o(1)), \quad t \rightarrow \infty, \quad K_s \geq (s-1)^2/[2 \ln s].$$

Величину K_s можно найти из рекуррентного соотношения

$$K_s = \max_{0 < v < M_s} \{h(v/s) - vh(1/s)\}^{-1}, \quad M_s = (K_s - K_{s-1})/K_s.$$

Оценки сверху для минимальных длин статических планов доказываются, как правило, методом случайного планирования и не решают задач реального конструирования (s, t) -планов. Эти задачи являются наиболее важными в приложениях, даже если длины семейства полученных планов обладают худшей асимптотикой при $t \rightarrow \infty$, чем верхние оценки.

Ниже приведена процедура построения статических планов для дизъюнктивной модели, основанная на существовании полной системы L из $n-1$ ортогональных латинских квадратов порядка $n = p^r$, где p — простое, r — натуральное (см. гл. 12).

Сначала строится $(m \times n^2)$ -матрица A ($m < n$), состоящая из чисел $1, \dots, n$. Алгоритм построения A таков: поставим в соответствующие столбцам A ячейки латинских квадратов произвольным, но единым для всех квадратов способом; строкам, начиная с третьей, поставим в соответствие номера представителей системы L ; первые две строки отвечают строкам и столбцам ячеек; на пересечении строки i и столбца j матрицы A поместим число, стоящее в ячейке j латинского квадрата i из L . По определению ортогональных латинских квадратов любые два столбца A имеют не более одной совпадающей компоненты. Двоичная $(mn \times n^2)$ -матрица \mathcal{Z} строится на базе A путем замены каждого элемента $r \in A$ на столбец длины n , все элементы которого равны нулю, кроме r -го, равного единице. Матрица \mathcal{Z} является (s, n^2) -планом при $s \leq m-2$, причем при $m \sim an$ ($n \rightarrow \infty$), $a < 1$, длина этого плана асимптотически всего в a^{-1} раз больше нижней оценки $K_s \ln t$.

5. Последовательное планирование для дизъюнктивной модели. Сначала рассматривается задача поиска одного значимого фактора среди t факторов x_1, x_2, \dots, x_t , если известно, что хотя бы один значимый фактор среди x_1, \dots, x_t существует. Предположим, что известна априорная вероятность p_j значимости фактора x_j ($j = 1, \dots, t$) и $p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_t$.

Пусть w_1, w_2, \dots, w_t — ансамбль весов (т. е. априорных вероятностей факторам быть значимыми), l_i — длина ветви двоичного дерева, ведущей к конечному узлу x_i , соответствующему весу w_i .

Средней длиной двоичного дерева с ансамблем весов $\{w_i\}_{i=1}^t$ называется $\bar{l} = \sum_{i=1}^t l_i w_i$. Оптимальным двоичным деревом называется двоичное дерево с наименьшей средней длиной.

Алфавитным

деревом называется двоичное дерево, которое, будучи нарисовано на плоскости без пересечений, имеет такой вид, что концевые узлы, соответствующие весам w_i , располагаются слева направо по мере возрастания номера i .

Оптимальный последовательный план нахождения одного значимого фактора соответствует оптимальному алфавитному дереву для ансамбля весов

$$w_i = \left[1 - \prod_{j=1}^t (1 - p_j) \right]^{-1} p_i \prod_{j=1}^{i-1} (1 - p_j)$$

с концевыми узлами x_i .

Пусть теперь $t = \infty$, $p_i = p$ ($i = 1, 2, \dots$), т. е. имеется задача поиска одного значимого фактора в бесконечной биномиальной совокупности факторов. Минимальная длина последовательного плана в данном случае равна ($q = 1 - p$)

$$\alpha + 1 + q^{m-2\beta} / (1 - q^m),$$

где m — такое целое число, что $q^{m-1} + q^m \geq 1 \geq q^m + q^{m+1}$, α и β — целые числа, удовлетворяющие соотношениям $m = 2^\alpha + \beta$, $0 \leq \beta < 2^\alpha$.

Далее рассматривается задача поиска всех значимых факторов в конечной биномиальной совокупности факторов (т. е. $t < \infty$ и вероятность того, что фактор x_i значим, равна p). Через $H_R(t)$ обозначено среднее число групповых проверок (экспериментов) в последовательном плане R .

Если $q \leq (\sqrt{5} - 1)/2 = q_0$, то $H_R(t) \geq t$ для любого последовательного плана R , а при $q > q_0$ существует последовательный план R с $H_R(t) < t$. Нижняя граница для $H_R(t)$ такова:

$$H_R(t) \geq -t(p \log_2 p + q \log_2 q).$$

Рекуррентные соотношения

$$H(n) = 1 + \min_{1 \leq m \leq n} \{q^m H(n-m) + (1 - q^m) G(m, n)\},$$

$$G(m, n) = 1 + \min_{1 \leq i \leq m-1} \{[(q^i - q^m)/(1 - q^m)] \times \\ \times G(m-i, n-i) + [(1 - q^i)/(1 - q^m)] G(i, n)\}, \\ H(0) = 0, \quad G(1, n) = H(n-1)$$

определяют последовательный план экспериментов R , для которого $0 \leq q \leq q_0$, $H(n) = n$, $G(m, n) = n - [pq^{m-1}/(1 - q^m)]$, и который при $q \leq q_0$ является оптимальным.

Здесь $n \leq t$, $H(n)$ — среднее число экспериментов, необходимых для определения всех значимых факторов в биномиальной совокупности факторов размера n , $G(m, n)$ — среднее число экспериментов решения той же задачи при дополнительном условии, что среди m факторов ($1 \leq m \leq n$) существует хотя бы один значимый.

Пусть имеется t факторов x_1, \dots, x_t и известно, что ровно s из них значимые (ситуация \mathcal{E}_s). Всего существует C_t^s способов выбора s значимых из t факторов. Поскольку каждый эксперимент делит множество всех s -наборов значимых факторов на две части, указывая какому подмножеству принадлежит искомый набор,

$$N \geq \log_2 C_t^s = N_{t,s}^*,$$

где N — минимальная длина последовательного плана.

Один из возможных последовательных планов для решения задачи \mathcal{E}_s состоит в следующем. В первом эксперименте для проверки выбираются первые 2^i факторов, где i определяется из неравенства $2^i \leq t/s - 1 < 2^{i+1}$. Если такого i нет (в случае $t < 2s$), то полагается $i = 0$. Если результат эксперимента равен нулю, то среди первых 2^i факторов нет значимых, и эти факторы из рассмотрения исключаются. Если результат эксперимента равен 1, то среди первых 2^i факторов есть по крайней мере один значимый; выделим его i проверками методом деления пополам.

Второй эксперимент аналогичен первому, только ищется либо s значимых факторов среди $t - 2^i$ факторов, либо $s - 1$ значимый среди $t - 1$ факторов. Остальные эксперименты проводятся аналогично.

Пусть $N_{t,s}$ обозначает максимальное число экспериментов построенного плана. Тогда:

- а) $N_{t,1} \geq N_{t,1}^* = \log_2 t > N_{t,1} - 1$;
- б) если $t = s + k$ ($0 < k \leq s$), то $N_{t,s} = s + k - 1$;
- в) если $t = s(2^i + 1) + k \cdot 2^i + l$ (i, k, l — целые числа, $0 \leq k < l < 2^i$), то $N_{t,s} = (i + 2)s + k - 1$.

Из а) следует, что в ситуации \mathcal{E}_1 описанная процедура оптимальна.

Приведенная процедура с той разницей, что i выбирается из условия $2^i \leq [(t + 1)/s] - 1 < 2^{i+1}$, может быть использована и в ситуации $\mathcal{E}_{0,s}$ (т. е. для поиска значимых факторов, если известно, что их не больше s). Максимальное число экспериментов $\bar{N}_{t,s}$ в указанной процедуре находится по формуле $\bar{N}_{t,s} = N_{t+1,s}$.

6. Аддитивная модель. Аддитивной называется билинейная модель, в которой все значимые параметры равны 1. Если информация о числе значимых факторов отсутствует, то асимптотическая (при $t \rightarrow \infty$) нижняя граница для минимальной длины сильно разделяющего статического плана равна $2t/\log_2 t$, причем эта граница достигается на планах регулярной конструкции. В ситуации $\mathcal{E}_{0,2}$ существуют сильно разделяющие последовательные планы с максимальной длиной порядка $4 \log_2 t$ ($t \rightarrow \infty$), в то же время длина статического плана не может быть меньше $\frac{5}{3} \log_2 t$. Таким образом, уже при $s = 2$ статическое планирование требует в $a > 1$ раз больше опытов, чем последовательное.

ДИСКРИМИНИРУЮЩИЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

§ 1. Постановка задачи.

1. T-критерий. В предыдущих главах, связанных с планированием экспериментов, весьма существенным было предположение о том, что отклик $\eta(x, \theta)$ задан. Во многих практических задачах экспериментатор может лишь надеяться, что отклик совпадает с одной из функций $\eta_1(x, \theta_1), \dots, \eta_v(x, \theta_v)$. Возникает необходимость отыскания функции $\eta_j(x, \theta_j)$, совпадающей с истинной зависимостью. При этом предполагается, что такая функция имеется среди указанных v функций.

Рассмотрим вначале случай двух конкурирующих моделей ($v = 2$). Хотя он и является простейшим, однако при его исследовании используются те же идеи, что и в общей ситуации. Будем предполагать, что отклик скалярный и $x \in X \subset \mathbf{R}^k$. Итак,

$$y_{ir} = \eta_{in}(x_i) + \varepsilon_{ir},$$

где $\eta_{in}(x)$ совпадает либо с $\eta_1(x, \theta_{1n})$, либо с $\eta_2(x, \theta_{2n})$, индекс «и» отмечает истинные величины, ошибки ε_{ir} предполагаются независимыми с нулевым средним и единичной дисперсией.

Пусть в соответствии с гл. 1

$$\hat{\theta}_{jN} = \text{Arg} \inf_{\theta_j \in \Omega_j} \sum_{i=1}^N p_i [y_i - \eta_j(x_i, \theta_j)]^2,$$

где

$$N_j = \sum_{i=1}^n r_i, \quad y_i = r_i^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} y_{ir}, \quad p_i = r_i/N,$$

Ω_j — некоторое компактное множество из \mathbf{R}^{m_j} ($j = 1, 2$).

Предположим для определенности, что верна первая модель, т. е. $\eta_{in}(x) = \eta_1(x; \theta_{1n})$ и θ_{1n} является внутренней точкой множества Ω_1 . План эксперимента будем выбирать так, чтобы максимизировать величину

$$T_{12}^0(\xi_N) = \sum_{i=1}^n p_i [\eta_{1n}(x_i) - \eta_2(x_i, \hat{\theta}_{2N})]^2,$$

где

$$\hat{\theta}_{2n} = \text{Arg} \inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \sum_{i=1}^n p_i [\eta_n(x_i) - \eta_2(x_i, \theta_2)]^2.$$

Функционал $T_{12}^0(\xi)$ называется *параметром нецентральности*. При нормально распределенных ошибках ϵ_r и использовании χ^2 -критерия (или F -критерия в случае неизвестной дисперсии ошибок) мощность теста по проверке справедливости первой модели является монотонно возрастающей функцией от параметра $NT_{12}^0(\xi_N)$, который представляет собой нижнюю границу параметра нецентрального χ^2 -распределения, описывающего случайную величину

$$v^2(\hat{\theta}_{2N}) = \sum_{i=1}^n \sum_{r=1}^{r_i} [y_{ir} - \eta_2(x_i, \hat{\theta}_{2n})]^2$$

при линейной параметризации второй модели. Для нелинейных моделей это утверждение носит асимптотический характер.

Как и в гл. 2, наиболее конструктивные результаты могут быть сформулированы для непрерывных планов, когда дискретностью мер ξ_N можно пренебречь ($N \gg m_j, j = 1, 2$).

План

$$\xi^* = \text{Arg} \sup_{\xi} T_{12}^0(\xi), \quad (1)$$

где

$$T_{12}^0(\xi) = \inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \int_X [\eta_n(x) - \eta_2(x, \theta_2)]^2 \xi(dx)$$

называется T_{12}^0 -*оптимальным*.

При законе распределения ошибок, отличном от нормального, или использовании оценок (такие оценки встречаются при робастном оценивании) вида

$$\tilde{\theta}_{jN} = \text{Arg} \inf_{\theta_j \in \Omega_j} \sum_{i=1}^N p_i F[y_i - \eta_j(x_i, \theta_j)]$$

в качестве параметра нецентральности (или «меры» расхождения между моделями) становится необходимым использовать функционалы

$$T_{12}(\xi) = \inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \int_X F[\eta_n(x) - \eta_j(x, \theta_2)] \xi(dx). \quad (2)$$

План

$$\xi^* = \text{Arg} \sup_{\xi} T_{12}(\xi) \quad (3)$$

называется T_{12} -*оптимальным*. Экстремальная задача (3), естественно, включает (1) как частный случай. Чтобы подчеркнуть, что план ξ^* строится для определенной модели ($\eta_1(x, \theta_{1n}) = \eta_n(x)$)

п определенных значений параметров ($\theta_1 = \theta_{1n}$), иногда будет использоваться термин *локально T_{12} -оптимальный план*.

2. Минимаксные и байесовские планы. При T_{12} -оптимальном планировании подразумевается, что верна первая модель и смысл введения T_{12} -оптимальных планов тот же, что и локально оптимальных планов в нелинейной регрессионной задаче. Для практических целей более полезными являются минимаксные планы:

$$\xi^* = \text{Arg sup}_{\xi} \inf_{\theta_1 \in \Omega_1} \inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \int_X F[\eta_1(x, \theta_1) - \eta_2(x, \theta_2)] \xi(dx). \quad (4)$$

При рассмотрении нескольких конкурирующих моделей минимаксный план определяется как решение экстремальной задачи

$$\xi^* = \text{Arg sup}_{\xi} \min_{j, n} D_{jn}(\xi),$$

где $j \neq n$,

$$D_{jn}(\xi) = \inf_{\theta_j \in \Omega_j} \inf_{\theta_n \in \Omega_n} \int_X F[\eta_j(x, \theta_j) - \eta_n(x, \theta_n)] \xi(dx).$$

Если экспериментатор располагает априорным распределением $\mathcal{F}_{0j}(\theta_j)$ параметров θ_j и априорными вероятностями моделей π_{0j} , то имеет смысл рассматривать байесовские оптимальные (T_B -оптимальные) планы:

$$\xi^* = \text{Arg sup}_{\xi} \delta(\xi), \quad (5)$$

$$\delta(\xi) = \sum_{j=0}^v \pi_{0j} \int_{\Omega_j} T_{jn}(\xi, \theta_j) \mathcal{F}_{0j}(d\theta_j),$$

$$T_{jn}(\xi, \theta_j) = \inf_{\theta_n \in \Omega_n} \int_X F[\eta_j(x, \theta_j) - \eta_n(x, \theta_n)] \xi(dx).$$

§ 2. Свойства T -оптимальных планов

1. Необходимые и достаточные условия оптимизации. Предположим, что:

а) Функция $F(z)$, введенная в предыдущем параграфе, монотонно возрастает, когда $z \geq 0$, монотонно убывает, когда $z < 0$, и непрерывна на множестве

$$Z = \{z | z = \eta_u(x) - \eta_2(x, \theta_2), x \in X, \theta_2 \in \Omega_2\};$$

б) Множества X и Ω_2 компактны и функция $\eta_u(x)$ и $\eta_2(x, \theta_2)$ непрерывны на $X \times \Omega_2$;

в) Экстремальная задача (2) имеет единственное решение ξ^* .

При выполнении этих условий оказываются справедливыми следующие утверждения.

Существует по крайней мере одно решение экстремальной задачи (3). Множество оптимальных планов выпукло.

Для оптимальности плана необходимо и достаточно выполнение неравенства

$$F[\eta_{\text{н}}(x) - \eta_2(x, \theta_2^*)] \leq T_{12}(\xi^*) \quad \forall x \in X.$$

Если $\int_X \xi^*(dx) > 0$, то функция $F[\eta_{\text{н}}(x) - \eta_2(x, \theta_2^*)]$ достигает своей верхней границы на X .

Пусть в дополнение к условиям а)—в) выполняется условие г) функция $F[\eta_{\text{н}}(x) - \eta_2(x, \theta_2)]$ выпукла по $\theta_2 \in \Omega_2$ для всех $x \in X$.

Тогда существует оптимальный план, содержащий не более чем $m_2 + 1$ опорных точек.

При линейной параметризации функции $\eta_2(x, \theta_2)$ для T_{12}^0 -критерия условие г) всегда выполняется.

2. Связь с задачей чебышевской аппроксимации. Следующее утверждение лежит в основе ряда методов построения T_{12} -оптимальных планов. Пусть выполнены условия а)—г) и условие д) функция $F(z)$ симметрична.

Тогда опорные точки оптимального плана ξ^* принадлежат чебышевскому экстремальному базису X^* задачи наилучшей аппроксимации

$$(\theta_2^*, X^*) = \text{Arg inf}_{\theta_2 \in \Omega_2} |\eta_{\text{н}}(x) - \eta(x, \theta_2)|.$$

Пусть, кроме того, выполнено условие

е) функции $\eta_2(x_i^*, \theta_2)$ и $F(z)$ дифференцируемы в окрестности точек θ_2^* , $z^* = \eta_{\text{н}}(x_i^*) - \eta_2(x_i^*, \theta_2^*)$ ($x_i^* \in X$).

Тогда существует план ξ^* , который оптимален в случае любого критерия, удовлетворяющего условиям а)—е), причем оптимальные меры являются решением системы уравнений

$$\sum_{i=1}^{m+1} p_i^* \text{sign} \{ \dot{F}(\delta_i) \} \left. \frac{\partial \eta_2(x_i^*, \theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=\theta_2^*} = 0,$$

где

$$\delta_i = \eta_{\text{н}}(x_i^*) - \eta(x_i^*, \theta), \quad |\delta_i| = \text{const},$$

$$\dot{F}(z) = \frac{\partial F}{\partial z}, \quad \sum_{i=1}^{m+1} p_i^* = 1, \quad p_i^* \geq 0, \quad i = 1, \dots, m_2 + 1.$$

Пусть множество X задается ограничениями вида $g_i(\theta_2)$, причем функции $g_i(\theta_2)$ дифференцируемы в окрестности точки θ_2^* , и пусть $I(\theta_2^*) = \{j | g_j(\theta_2^*) = 0\}$ — множество индексов активных ограничений, которое содержит q элементов. Тогда

$$p_i^* = |d_i| \left| \sum_{j=1}^n |d_j| \right|, \quad n = m_2 + 1 - q,$$

где $|d_i|$ — абсолютное значение определителя матрицы:

$$\left\{ \frac{\partial \eta_2(x_l^*, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_2^*}, \frac{\partial g_n(\theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_2^*}, \quad l = 1, \dots, i-1, \quad i+1, \dots, \dots, m_2 + 1 - q, \quad n \in I(\theta_2^*) \right\}. \quad (6)$$

При линейной параметризации и $\Omega_2 = \mathbf{R}^{m_2}$ результаты, приведенные в предыдущих пунктах, остаются в силе, если все θ_2^* имеют конечную норму (обычно это требование приводит к единственности θ_2^*). Так, если $\eta_2(x, \theta_2) = \theta_2^T f_2(x)$, где $f_2(x)$ — линейно независимые и непрерывные функции на X , то

$$p_i = |d_i| / \sum_{j=1}^{m_2+1} |d_j|, \quad (7)$$

где $|d_i|$ — абсолютное значение определителя матрицы

$$\{f_2(x_l^*), \quad l = 1, \dots, i-1, \quad i+1, \dots, m_2 + 1\}.$$

3. Свойства минимаксных планов. Результаты предыдущих пунктов могут быть использованы при анализе экстремальной задачи (4). Для этого в пп. 1, 2 необходимо положить $\eta_n(x) = 0$ и заменить повсюду $\eta_2(x, \theta_2)$ на $\eta(x, \theta) = \eta_1(x, \theta_1) - \eta_2(x, \theta_2)$.

Например, легко убедиться, что при выполнении очевидных модификаций условий а) — г) всегда найдется минимаксный план, содержащий не более чем $m_1 + m_2 + 1$ опорных точек. Если при линейной параметризации первая и вторая модели содержат m общих базисных функций, то указанная граница понижается до $m_1 + m_2 - m + 1$ точек.

При выполнении модификаций условий а) — д) опорные точки минимаксных планов принадлежат чебышевскому экстремальному базису задачи наилучшей аппроксимации нуля:

$$\inf_{\theta \in \Omega} \sup_{x \in X} |\eta(x, \theta)|,$$

где $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2$.

4. Линейная параметризация. Рассмотрим случай линейных конкурирующих моделей и T^0 -критерий: $F(z) = z^2$. Для этого случая

$$T_{jh}(\xi, \theta_j) = \theta_j^T M_{(h)}(\xi) \theta_j, \quad (8)$$

где

$$M_{(h)}(\xi) = M_{jj}(\xi) - M_{jh}(\xi) M_{hk}^{-1}(\xi) M_{hj}(\xi),$$

$$M_{jh}(\xi) = \int_X f_j(x) f_h^T(x) \xi(dx),$$

план предполагается регулярным для всех моделей. Формула (8)

позволяет получать аналитически решения целого ряда задач планирования дискриминирующих экспериментов. Так, при байесовском подходе (см. (5))

$$\delta(\xi) = \sum_{j=1}^v \pi_{0j} \operatorname{tr} [M_{(k)}(\xi) (D_{0j} + \theta_{0j} \theta_{0j}^T)], \quad j \neq k,$$

где

$$\theta_{0j} = \int_{\Omega_j} \theta_j \mathcal{F}(d\theta_j), \quad D_{0j} = \int_{\Omega_j} (\theta_j - \theta_{0j})(\theta_j - \theta_{0j})^T \mathcal{F}(d\theta_j).$$

Экстремальная задача $\xi^* = \operatorname{Arg} \sup_{\xi} \delta(\xi)$ может быть теперь рассмотрена в рамках теории, изложенной в гл. 2. Для этого достаточно ввести матрицу (для простоты ограничимся двумя конкурирующими моделями)

$$M(\xi) = \begin{bmatrix} M_{11}(\xi) & M_{12}(\xi) \\ M_{21}(\xi) & M_{22}(\xi) \end{bmatrix}$$

и обратить внимание на выпуклость $\delta(\xi)$ по M .

Иногда полезно комбинировать байесовский и минимаксный подходы и рассматривать экстремальные задачи типа

$$\xi^* = \operatorname{Arg} \sup_{\xi} \inf_{\mathcal{F}_{0j}} \delta(\xi), \quad (9)$$

где \mathcal{F}_{0j} — распределение, принадлежащее некоторому множеству \mathcal{P}_j . Пусть \mathcal{P}_j — множество распределений с заданной обобщенной дисперсией $|D_{0j}| = C_j$. В силу положительной определенности матрицы $M_{(k)}(\xi)$

$$\inf_{\theta_{0j}} \operatorname{tr} M_{(k)}(\xi) [D_{0j} + \theta_{0j} \theta_{0j}^T] = \operatorname{tr} M_{(k)}(\xi) D_{0j}.$$

Так как $m^{-1} \operatorname{tr} MD \geq |M|^{1/m} |D|^{1/m}$ и равенство достигается при некотором D , то

$$\inf_{D_{0j}} \operatorname{tr} M_{(k)}(\xi) D_{0j} = m_j c_j^{1/m_j} |M_{(k)}(\xi)|^{1/m_j},$$

и (8) принимает вид

$$\xi^* = \operatorname{Arg} \sup_{\xi} \sum_{j=1}^v \pi_{0j} m_j c_j^{1/m_j} |M_{(k)}(\xi)|^{1/m_j}.$$

Данная экстремальная задача может быть решена с помощью методов, изложенных в гл. 4.

Экстремальная задача (4) при линейной параметризации и ограничениях вида $\Omega_j = \{\theta_j | \theta_j^T A_j \theta_j \geq 1, A_j \geq 0\}$ при двух конкурирующих моделях также сводится к задаче планирования с

выпуклым критерием оптимальности. Действительно,

$$\inf_{\theta_j \in \Omega_j} \int_X [\theta_1^T f_1(x) - \theta_2^T f_2(x)]^2 \xi(dx) = \inf_{\theta_j \in \Omega_j} (\theta_1^T, \theta_2^T) M(\xi) \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix} \geq \lambda(\xi),$$

где

$$M(\xi) = \begin{bmatrix} M_{11}(\xi) & -M_{12}(\xi) \\ -M_{21}(\xi) & M_{22}(\xi) \end{bmatrix},$$

матрицы $M_{jk}(\xi)$ ($j, k = 1, 2$) определены в пояснениях к (8), $\lambda(\xi)$ наименьший корень уравнения

$$|M(\xi) - \lambda A| = 0, \quad A = \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}.$$

5. Некоторые специальные случаи. При нарушении условий в необходимом и достаточным условием T_{12} -оптимальности плана ξ^* является существование такой вероятностной меры μ^* , что

$$\varphi_{12}(x, \xi^*) \leq T_{12}(\xi^*) \quad \forall x \in X,$$

где

$$\varphi_{12}(x, \xi^*) = \int_{\Omega_2(\xi^*)} F[\eta_1(x) - \eta_2(x, \theta_2)] \mu^*(d\theta_2),$$

$\Omega_2(\xi^*)$ — множество решений задачи (2) при $\xi = \xi^*$. Изменения в формулировках остальных результатов из п. 4 очевидны.

При нескольких конкурирующих моделях вместо задачи (3) приходится иметь дело с экстремальной задачей:

$$\xi^* = \text{Arg sup}_\xi \min_j T_{1j}(\xi), \quad j = 2, \dots, v. \quad (10)$$

В этом случае необходимым и достаточным условием оптимальности плана ξ^* является существование таких $\gamma_j^* > 0$, $\sum_{j=2}^v \gamma_j^* = 1$, что

$$\psi_1(x, \xi^*) \leq \min_j T_{1j}(\xi^*) \quad \forall x \in X,$$

где

$$\psi_1(x, \xi^*) = \sum_{j=J(\xi^*)} \gamma_j^* F[\eta_1(x) - \eta_j(x, \theta_j)],$$

$J(\xi^*)$ — множество решений экстремальной задачи $\min_j T_{1j}(\xi^*)$.

6. Некоторые частные случаи. Пусть $X = [-1, 1]$, $\Omega_2 = \mathbf{R}^{m_2}$, $\eta_1(x, \theta_1) = \theta_1 x^{m_2}$, $\eta_2(x, \theta_2) = \sum_{\alpha=1}^{m_2} \theta_{2\alpha} x^{\alpha-1}$. Экстремальный чебышевский базис для задачи

$$\inf_{\theta_1, \theta_2} \sup_{x \in X} \left| \theta_1 x^{m_2} - \sum_{\alpha=1}^{m_2} \theta_{2\alpha} x^{\alpha-1} \right|$$

известен из классической теории аппроксимации:

$$X^* = \left\{ x_i^* = \cos \frac{m_2 + 1 - i}{m_2} \pi, \quad i = 1, \dots, m_2 + 1 \right\}.$$

Оптимальные меры опорных точек в соответствии с п. 2 равны соответственно $p_1^* = (2m_2)^{-1}, \dots, p_i^* = m_2^{-1}, \dots, p_{m_2+1}^* = (2m_2)^{-1}$. Данный результат полезно сравнить с § 3.1.

Пусть $\Omega_2 = \{\theta | (\theta^T C)^2 \geq 1\}$, где C некоторый вектор из \mathbf{R}^m , $\eta_1(x) = 0$, $\eta_2(x) = \theta^T f(x)$, $F(z) = z^2$. Тогда

$$\xi^* = \sup_{\xi} \inf_{(\theta^T C)^2 \geq 1} \theta^T M(\xi) \theta,$$

где

$$M(\xi) = \int_X f(x) f^T(x) \xi(dx).$$

Замечаем, что $\inf_{(\theta^T C)^2 \geq 1} \theta^T M(\xi) \theta = C^T M^{-1}(\xi) C$, поэтому построение T -оптимального плана эквивалентно построению плана, минимизирующего функцию $C^T M^{-1}(\xi) C$. Это дополнительно объясняет результаты § 3.4.

§ 3. Построение T -оптимальных планов

1. Итерационная процедура первого порядка. Результаты § 2 ведут к целой серии процедур численного построения оптимальных планов. Это могут быть либо традиционные алгоритмы оптимального планирования, изложенные в гл. 4, либо алгоритмы наилучшей чебышевской аппроксимации. Возможны также их сочетания.

Опишем итеративный алгоритм для построения T -оптимальных планов (индексы для краткости опущены) для двух конкурирующих моделей.

Алгоритм 1.

1) Имеется план ξ_s . Отывается точка

$$x_{s+1} = \text{Arg max} \left\{ \sup_{x \in X} \varphi(x, \xi_s) - T_{12}^0(\xi_s), \quad T_{12}^0(\xi_s) - \inf_{x \in X} \varphi(x, \xi_s) \right\},$$

где $\varphi(x, \xi_s) = [\eta_1(x) - \eta_2(x, \theta_{2s})]^2$; X_s — множество опорных точек плана ξ_s , $\theta_{2s} = \text{Arg inf}_{\theta_2 \in \Omega_2} \int_X [\eta_1(x) - \eta_2(x, \theta_2)]^2 \xi_s(dx)$.

2) Строится план $\xi_{s+1} = (1 - \gamma_s)\xi_s + \gamma_s \xi(x_{s+1})$, где $\gamma_s = \alpha_s$, если $\varphi(x_{s+1}) - T_{12}^0(\xi_s) > 0$, и $\gamma_s = -\max\{\alpha_s, p_{is}/(1 - p_{is})\}$ в противном случае. В качестве последовательностей $\{\alpha_s\}$ можно выбрать (ср. с гл. 4):

$$\text{а) } \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s = \infty, \quad \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s^2 < \infty;$$

$$\text{б) } \alpha_s = \text{Arg sup}_{0 < \alpha < 1} T_{12}^0[(1 - \alpha)\xi_s + \alpha\xi(x_{s+1})].$$

Данный алгоритм в рамках условий а) — в) сходится по функционалу, т. е. $\lim_{s \rightarrow \infty} T_{12}^0(\xi_s) = T_{12}^0(\xi^*)$, а из последовательности $\{\xi_s\}$ всегда можно выделить последовательность $\{\xi_s\}$, сходящуюся к одному из оптимальных планов.

Если не выполняется условие в), то этап 1) должен быть модифицирован в соответствии с п. 2.5, а именно:

$$x_{s+1} = \text{Arg max} \left\{ \inf_{\mu_s} \sup_{x \in X} \varphi(x, \xi_s) - \right. \\ \left. - T_{12}^0(\xi_s), T_{12}^0(\xi_s) - \inf_{\mu_s} \min_{x \in X_s} \varphi(x, \xi_s) \right\},$$

где μ_s принадлежит множеству вероятностных мер, определенных на множестве

$$\Omega_s = \left\{ \theta \left| \int_X [\eta_{11}(x) - \eta_2(x, \theta)] \xi_s(dx) - \right. \right. \\ \left. \left. - \int_X F[\eta_{11}(x) - \eta_2(x, \theta_{2s})] \xi_s(dx) \leq \delta \right. \right\}.$$

Для модифицированной итерационной процедуры имеет место δ -сходимость

$$\lim_{s \rightarrow \infty} T_{12}^0(\xi_s) \leq \inf_{\xi} T_{12}^0(\xi) + \delta.$$

В некоторых случаях скорость сходимости алгоритма 1 может быть заметно увеличена. Например, при $\eta_2(x, \theta_2) = \theta_2^T f_2(x)$, где $f_2(x)$ — вектор линейно независимых непрерывных функций на X , на каждом шаге итерационной процедуры удобно воспользоваться формулой (7) для нахождения оптимального набора мер p_{is}^* , соответствующего системе опорных точек плана ξ_s . Приведенная процедура годится для любой задачи планирования (для любого $F(z)$), если выполняется условие а) — д). В ином случае следует положить

$$\varphi(x, \xi_s) = F[\eta_{11}(x) - \eta_2(x, \theta_{2s})] - T(\xi_s), \\ \theta_{2s} = \text{Arg} \inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \int_X F[\eta_{11}(x) - \eta_2(x, \theta_2)]^2 \xi_s(dx).$$

2. Процедуры, связанные с теорией аппроксимации. В тех случаях, когда планирование дискриминирующего эксперимента сводится к задаче чебышевской аппроксимации, естественно обратиться к методам Валле-Пуссена, Ремеза, представлению задачи чебышевской аппроксимации в виде задачи линейного программирования и т. п. Первые два метода в литературе обычно излагаются при $X \subset \mathbb{R}^1$.

Интересно отметить, что численная процедура из предыдущего пункта может быть использована для отыскания чебышевского экспериментального базиса, причем сфера ее применения шире, чем упомянутых выше классических алгоритмов.

3. Последовательные планы. Построение локально T -оптимальных планов проясняет лишь общую структуру плана дискриминирующего эксперимента (ни номер истинной модели, ни истинные значения соответствующих параметров не известны).

Построение байесовских и минимаксных планов трудоемко в вычислительном аспекте и, вообще говоря, также позволяет выявить лишь общую структуру плана, поскольку существенно зависит от исходных предположений об априорных распределениях или ограничений на параметры. Поэтому в тех экспериментах, для которых это возможно, целесообразно обратиться к последовательному планированию.

Одна из простейших последовательных процедур при двух конкурирующих моделях состоит из следующих операций.

Алгоритм 2.

1) Имеется эксперимент из N наблюдений, проведенных по плану ξ_N . Находятся оценки $\hat{\theta}_{1N}$ и $\hat{\theta}_{2N}$:

$$\hat{\theta}_{jN} = \text{Arg inf}_{\theta_j \in \Omega_j} \sum_{i=1}^N F[y_i - \eta(x_i, \theta_j)], \quad j = 1, 2.$$

2) Отыскивается точка

$$x_{N+1} = \text{Arg sup}_{x \in X} F[\eta(x, \hat{\theta}_{1N}) - \eta(x, \hat{\theta}_{2N})].$$

3) $(N + 1)$ -е наблюдение проводится в точке x_{N+1} .

При решении экстремальных задач на первом этапе можно столкнуться со случаем, когда решение не единственно. При этом функция, максимизируемая на втором этапе, должна усложниться в соответствии с п. 2.5. Для практики это несущественно, так как начальный план можно выбрать невырожденным относительно обеих моделей.

Асимптотическая оптимальность последовательной процедуры планирования (ср. с гл. 6) следует из сильной состоятельности оценок $\hat{\theta}_{jN}$, которая имеет место при весьма слабых ограничениях на функции $F(z)$, $f_j(x, \theta)$ и предельный план (см. гл. 1). Это приводит к тому, что алгоритм 2 становится при достаточно большом числе наблюдений эквивалентен процедуре численного отыскания локально T -оптимального плана при $\alpha_s = s^{-1}$ и отказе от отрицательных α_s .

4. Несколько конкурирующих моделей. Пусть имеется ν моделей и необходимо построить какой-либо план, удовлетворяющий (40). Аналогом алгоритма 1 является следующая итерационная процедура.

А л г о р и т м 3.

1) Имеется план ξ_s . Отыскивается

$$x_{s+1} = \text{Arg max} \left\{ \min_{p_j} \sup_{x \in X} \sum_{j \in J_s} p_j \varphi_j(x, \xi_s), \min_{j \in J_s} \min_{x \in X_s} \varphi_j(x, \xi_s) \right\},$$

где

$$\varphi_j(x, \xi_s) = F[\eta_{\pi}(x) - \eta_j(x, \theta_{js})],$$

$$\theta_{js} = \text{Arg inf}_{\theta_j \in \Omega_j} \int_X F[\eta_{\pi}(x) - \eta_j(x, \theta_{js})] \xi_s(dx),$$

$\sum_{j \in J_s} p_j = 1$, $p_j \geq 0$, J_s — множество индексов, для которых

$$T_{1j}(\xi_s) \leq \min_l T_{1l}(\xi_s) + \delta, \quad j, \quad l = \overline{1, v}.$$

2) Строится план $\xi_{s+1} = (1 - \gamma_s)\xi_s + \gamma_s \xi(x_{s+1})$, где γ_s выбирается так же, как и в п. 1, с очевидной заменой проверки знака разницы $\varphi(x, \xi) - T^0(\xi)$ на проверку выполнения неравенств

$$\min_p \sup_{x \in X} \sum_{j \in J_s} p_j \varphi_j(x, \xi_s) - \min_l T_{1l}(\xi_s) \geq 0,$$

$$\min_{j \in J_s} \min_{x \in X_s} \varphi_j(x, \xi_s) - \min_l T_{1l}(\xi_s) < 0.$$

При выполнении условий а) — в), распространенных на случай нескольких моделей, справедливо предельное соотношение

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \min_j T_{1j}(\xi_s) = \sup_{\xi} \min_j T_{ij}(\xi) - \delta.$$

Обратим внимание, что в данном разделе всюду предполагалась единственность решения для экстремальной задачи:

$$\theta_j^* = \text{Arg inf}_{\theta_j \in \Omega_j} \int_X F[\eta_{\pi}(x) - \eta_j(x, \theta_j)] \xi^*(dx).$$

Невыполнимость этого условия формально ведет к существенному усложнению алгоритма, которого можно избежать за счет подходящего выбора начального плана (ср. с п. 1).

Последовательная процедура для нескольких конкурирующих моделей имеет следующий вид.

А л г о р и т м 4.

1) Имеется эксперимент из N наблюдений, проведенных по плану ξ_N . Находятся оценки

$$\hat{\theta}_{jN} = \text{Arg inf}_{\theta_j \in \Omega_j} \sum_{i=1}^N F[y_i - \eta_j(x_i, \theta_j)], \quad j = 1, \dots, v.$$

Отыскивается множество индексов J_N , для которых

$$\sum_{i=1}^N F[y_i - \eta_j(x_i, \hat{\theta}_{jN})] - \sum_{i=1}^N F[y_i - \eta_{j^*}(x_i, \hat{\theta}_{j^*N})] \leq N\delta.$$

2) Находится точка

$$x_{N+1} = \min_{p_j} \sup_{x \in X} \varphi_{jN}(x),$$

где $\sum_{j \in J_N} p_j = 1$, $p_j \geq 0$, $\varphi_{jN} = F[\eta_{j^*}(x, \hat{\theta}_{j^*N}) - \eta_j(x, \hat{\theta}_{jN})]$.

3) $(N+1)$ -е наблюдение проводится в точке x_{N+1} .

Последовательность ξ_N , определенная в алгоритме 4, асимптотически T -оптимальна при выполнении условий сходимости соответствующей итерационной процедуры построения локально оптимального плана.

Литература к гл. 16: [92*—94, 105—108, 143*, 173].

ЛИТЕРАТУРА

1. Адлер Ю. П., Маркова Е. В., Грановский Ю. В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий.— М.: Наука, 1976.
2. Алберт А. Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание.— М.: Наука, 1977.
3. Альсведе Р., Вегенер А. Задачи поиска.— М.: Мир, 1982.
4. Бард Й. Нелинейное оценивание параметров.— М.: Статистика, 1979.
5. Батищев Д. И. Поискные методы оптимального конструирования.— М.: Сов. радио, 1975.
6. Бродский В. З. Введение в факторное планирование эксперимента.— М.: Наука, 1976.
7. Бродский В. З. О планах Аддельмана — Кемпзорна и о планах $4^n \times 8^m // 64$.— В кн.: Вопросы кибернетики: Линейная и нелинейная параметризация в задачах планирования эксперимента. М., 1981, с. 52—58.
8. Васильев Ф. П. Численные методы решения экстремальных задач.— М.: Наука, 1980.
9. Володин И. П. Нижние границы для среднего объема выборки и эффективность процедур статистического вывода.— Теория вероятностей и ее применения, 1979, 24, № 1, с. 119—129.
10. Вопросы кибернетики. Математико-статистические методы анализа и планирования эксперимента.— М., 1978.
11. Вопросы кибернетики. Нетрадиционные подходы к планированию эксперимента.— М., 1981.
12. Вопросы кибернетики. Проблемы случайного поиска.— М., 1973.
13. Вопросы кибернетики. Теоретические проблемы планирования эксперимента (отсеивающие эксперименты).— М.: Сов. радио, 1977.
14. Галлагер Р. Теория информации и надежная связь.— М.: Сов. радио, 1974.
15. Горский В. Г., Адлер Ю. П., Талалай А. М. Планирование промышленных экспериментов.— М.: Металлургия, 1978.
16. Грановский Б. Л., Ермаков С. М. О непараметрическом подходе к задачам планирования регрессионных экспериментов.— ДАН СССР, 1968, 180, № 2, с. 273—275.
17. Гупал А. М. Стохастические методы решения негладких экстремальных задач.— Киев: Наукова думка, 1979.
18. Дамбраускас А. П. Симплексный поиск.— М.: Энергия, 1979.
19. Демиденко Е. З. Линейная и нелинейная регрессия.— М.: Финансы и статистика, 1981.
20. Денисов В. И. Математическое обеспечение системы ЭВМ-экспериментатор.— М.: Наука, 1976.
21. Денисов В. И., Попов А. А. А-, Е-оптимальные и ортогональные планы регрессионных экспериментов для полиномиальных моделей.— М., 1976. Препринт/Научный совет по комплексной проблеме «Кибернетика» АН СССР.
22. Дьячков А. Г., Малютов М. Б. О слабо разделяющих планах.— В кн.: Методы передачи и обработки информации. М.: Наука, 1980.
23. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы.— М.: Наука, 1975.

24. Ермаков С. М. Об оптимальных несмещенных планах регрессионных экспериментов.— Труды МИАН СССР, вып. III, 1970, с. 252—257.
25. Ермаков С. М., Махмудов А. А. О планах регрессионных экспериментов, минимизирующих систематическую ошибку.— Заводская лаборатория, 1977, № 7, с. 854—858.
26. Ермаков С. М., Мелас В. Б. Об одном подходе к задаче планирования регрессионных экспериментов при нелинейной параметризации.— Заводская лаборатория, 1973, № 10, с. 1222—1225.
27. Ермаков С. М., Мелас В. Б. Теорема двойственности и итерационный метод нахождения h -оптимальных планов эксперимента.— Вестник ЛГУ, 1982, № 1, с. 38—43.
28. Ермаков С. М., Панкратьев Ю. Д. Смещенные оценки и метод регуляризации.— Вестник ЛГУ, 1976, № 7, с. 27—30.
29. Ермаков С. М., Седунов Е. В. О несмещенных планах регрессионных экспериментов в конечномерных пространствах функций.— Вестник ЛГУ, 1974, № 1, с. 12—20.
30. Ермольев Ю. М. Методы стохастического программирования.— М.: Наука, 1976.
31. Жиглявский А. А., Ермаков С. М. О случайном поиске глобального экстремума.— Теория вероятностей и ее применения, 1983, т. 28, № 1, с. 129—134.
32. Жиглявский А. А., Седунов Е. В. О методах оптимального планирования регрессионных экспериментов при наличии систематической ошибки.— Известия АН СССР. Техническая кибернетика. М., 1980, № 2, с. 164—171.
33. Зедгинидзе И. Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем.— М.: Наука, 1976.
34. Ибрагимов И. А., Розанов Ю. А. Гауссовские случайные процессы.— М.: Наука, 1970.
35. Ибрагимов И. А., Хасьминский Р. Э. Асимптотическая теория оценивания.— М.: Наука, 1979.
36. Ибрагимов И. А., Хасьминский Р. Э. О границах качества непараметрического оценивания регрессии.— Теория вероятностей и ее применения, 1982, т. 27, № 1, с. 81—94.
37. Ибрагимов И. А., Хасьминский Р. Э. О последовательном оценивании.— Теория вероятностей и ее применения, 1974, 19, № 2, с. 245—255.
38. Иванов А. В. Асимптотическое разложение моментов оценки наименьших квадратов векторного параметра нелинейной регрессии.— Украинский матем. журнал, 1982, 34, № 2.
39. Иванов А. В., Цвандиг З. Асимптотическое разложение оценки наименьших квадратов векторного параметра нелинейной регрессии.— Теория вероятностей и матем. статистика, 1982, вып. 26, с. 41—48.
40. Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П. Теория линейных некорректных задач и ее приложения.— М.: Наука, 1978.
41. Карлин С., Стадден В. Чебышевские системы и их применение в анализе и статистике.— М.: Наука, 1976.
42. Карманов В. Г. Математическое программирование.— М.: Наука, 1980.
43. Катковник В. Я. Линейные оценки и стохастические задачи оптимизации.— М.: Наука, 1976.
44. Клепиков Н. П., Соколов С. Н. Анализ и планирование экспериментов методом максимума правдоподобия.— М.: Наука, 1964.
45. Козлов В. П. Об одной задаче оптимального планирования статистического эксперимента.— Теория вероятностей и ее применения, 1974, 19, № 1, с. 226—230.
46. Козлова Г. А., Савапов В. Л. Некоторые вопросы оптимальной интерполяции случайных полей.— Труды МЭИ, вып. 445, 1980, с. 13—20.
47. Колмогоров А. Н. Теория передачи информации.— М.: Изд. АН СССР, 1956.

48. Коробов Н. М. Теоретикочисловые методы в приближенном анализе.— М.: Физматгиз, 1963.
49. Коростелев А. П. Затухающие возмущения динамических систем и условия сходимости рекуррентных стохастических процедур.— Теория вероятностей и ее применения, 1979, 24, № 2, с. 298—317.
50. Коростелев А. П. Сходимость рекуррентных стохастических алгоритмов при гауссовских возмущениях.— Кибернетика, 1979, № 4, с. 93—98.
51. Круг Г. К., Сосулин Ю. А., Фатуев В. А. Планирование эксперимента в задачах идентификации и экстраполяции.— М.: Наука, 1977.
52. Лаврентьев М. М., Романов В. Г., Шишатский С. П. Некорректные задачи математической физики и анализа.— М.: Наука, 1980.
53. Малютов М. Б. Об асимптотических свойствах и приложениях ИРДЖИНА-оценок параметров обобщенной регрессионной модели F .— В кн.: Вероятностные процессы и приложения. М., 1982, с. 144—153.
54. Малютов М. Б. Нижние границы среднего объема выборки последовательно управляемой выборки.— УМН, 1982, 37, № 2, с. 209—210.
55. Малютов М. Б. Замечание о планировании для бесконечномерной области действия.— В кн.: Планирование оптимальных экспериментов. М.: МГУ, 1975, с. 164—166.
56. Малютов М. Б., Матеев П. С. Планирование отсеивающих экспериментов при несимметричной функции отклика.— Матем. заметки, 1980, 27, № 1, с. 103—127.
57. Маркова Е. В., Ежова Л. Н. Прямоугольники Юдена и связанные с ними планы.— М., 1979. Препринт/Научный совет по комплексной проблеме «Кибернетика» АН СССР.
58. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.— М.: Наука, 1977.
59. Марчук Г. И. Окружающая среда и проблемы оптимизации размещения предприятий.— ДАН СССР, 1976, 227, № 5, с. 1056—1059.
60. Марчук Г. И., Ермаков С. М. О некоторых проблемах теории планирования эксперимента.— В кн.: Математические методы планирования эксперимента. Новосибирск: Наука, 1981, с. 3—17.
61. Марчук Г. И., Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и методы вычислительной математики.— В кн.: Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучения. М.: Атомиздат, 1967.
62. Математические методы планирования эксперимента/Под ред. Пененко В. В.— Новосибирск: Наука, 1981.
63. Мелас В. Б. Одна теорема двойственности и E -оптимальность.— Заводская лаборатория, 1982, № 3, с. 48—50.
64. Моцкус Й. Б. Многоэкстремальные задачи в проектировании.— М.: Наука, 1967.
65. Моцкус Й. Б. О байесовых методах поиска экстремума.— Автоматика и вычислительная техника, 1972, № 3, с. 53—62.
66. Мысовских И. П. Интерполяционные кубатурные формулы.— М.: Наука, 1981.
67. Налимов В. В., Чернова Н. А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов.— М.: Наука, 1965.
68. Невельсон М. Б., Хасьминский Р. З. Стохастическая аппроксимация и рекуррентное оценивание.— М.: Наука, 1972.
69. Невельсон М. Б. О сходимости непрерывных и дискретных процедур Роббинса — Монро в случае нескольких корней уравнения регрессии.— Проблемы передачи информации, 1972, 8, № 3, с. 48—57.
70. Невельсон М. Б., Хасьминский Р. З. Адаптивная процедура Роббинса — Монро.— Автоматика и телемеханика, 1973, № 1, с. 71—83.
71. Новые идеи в планировании эксперимента.— М.: Наука, 1969.
72. Панкратьев Ю. Д. К вопросу о возмущениях линейных функционалов.— В кн.: Системный анализ и исследование операций. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1977, с. 5—14.
73. Подиновский В. В., Ногин В. Д. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач.— М.: Наука, 1982.

74. Подкорытов А. Н. О свойствах оптимальных планов в случае квадратичной регрессии.—Вестник ЛГУ, 1975, № 2, с. 163—166.
75. Полак Э. Численные методы оптимизации. Единый подход.— М.: Мир, 1974.
76. Поляк Б. Т. Сходимость и скорость сходимости итеративных стохастических алгоритмов. I. Общий случай.—Автоматика и телемеханика, 1976, № 12, с. 83—94.
77. Поляк Б. Т. Методы решения задач на условный экстремум при наличии случайных помех.—ЖВМ и МФ, 1979, 19, № 1, с. 70—78.
78. Поляк Б. Т., Цыпкин Я. З. Псевдоградиентные алгоритмы адаптации и обучения.—Автоматика и телемеханика, 1973, № 3, с. 45—68.
79. Поляк Б. Т.; Цыпкин Я. З. Оптимальные псевдоградиентные алгоритмы адаптации.—Автоматика и телемеханика, 1980, № 8, с. 74—84.
80. Поляк Б. Т., Цыпкин Я. З. Робастные псевдоградиентные алгоритмы адаптации.—Автоматика и телемеханика, 1980, № 10, с. 91—97.
81. Рао С. Р. Линейные статистические методы и их применения.— М.: Наука, 1968.
82. Растрингин Л. А. Статистические методы поиска.— М.: Наука, 1968.
83. Регрессионные эксперименты/Под ред. Налимова В. В.— М.: МГУ, 1977.
84. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ. М., Мир, 1980.
85. Седунов Е. В. Планирование и анализ регрессионных экспериментов с учетом систематической ошибки (обзор).—Заводская лаборатория, 1979, № 1, с. 55—62.
86. Соболев И. М. Многомерные квадратурные формулы и функции Хара.— М.: Наука, 1969.
87. Соболев И. М., Статников Р. Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями.— М.: Наука, 1981.
88. Стронгин Р. Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах.— М.: Наука, 1978.
89. Судаков В. Н., Халфин Л. А. Статистический подход в корректности задач математической физики.—ДАН СССР, 1964, 157, № 5, с. 1058—1060.
90. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач.— М.: Наука, 1979.
91. Турчин В. Ф., Козлов В. П., Малкевич М. С. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач.—УФН, 1970, 102, с. 345—386.
92. Успенский А. Б., Федоров В. В. Вычислительные аспекты метода наименьших квадратов при анализе и планировании регрессионных экспериментов.— М.: МГУ, 1975.
93. Федоров В. В. Теория оптимального эксперимента.— М.: Наука, 1971.
94. Федоров В. В. Планирование экспериментов при линейных критериях оптимальности.—Теория вероятностей и ее применения, 1971, 16, № 1, с. 189—195.
95. Филаретов Г. Ф. Необходимые условия разрешимости задач построения планов дробного факторного эксперимента.— В кн.: Планирование и автоматизация эксперимента в научных исследованиях. М.: Сов. радио, 1974, с. 72—80.
96. Фуксман Я. Л. Об оптимальных статистических выводах в экстремальном эксперименте.— В кн.: Теория оптимальных решений. Киев: ИК АН СССР, 1975.
97. Цыпкин Я. З., Поляк Б. Т. Достижимая точность алгоритмов адаптации.— ДАН СССР, 1974, 218, № 3, с. 532—535.
98. Шалтыков В. Р., Варнайте А. Об одном методе уменьшения размерности при решении многоэкстремальных задач.— Теория оптимальных решений, № 1. Вильнюс: АН Лит. ССР, 1975, с. 23—42.
99. Шеффе Г. Дисперсионный анализ.— М.: Наука, 1980.
100. Шор Н. З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения.— Киев: Наукова думка, 1979.

101. Addelman S. Orthogonal main effect plans for asymmetrical factorial experiments.— *Technometrics*, 1962, 4, p. 21—46.
102. Addelman S. Symmetrical and asymmetrical fractional factorial designs.— *Technometrics*, 1962, 4, p. 47—58.
103. Addelman S., Kempthorne O. Some main effect plans and orthogonal arrays of strength two.— *Ann. Math. Statist.*, 1961, 32, p. 1167—1176.
104. Atkinson A. C. Developments in the design of experiments.— *Inter-Statist. Review*, 1982, 50, p. 161—177.
105. Atkinson A. C., Cox D. R. Planning experiments for discrimination between models (with discussion).— *J. Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1974, 36, p. 321—348.
106. Atkinson A. C., Fedorov V. V. The design of experiments for discriminating between two rival models.— *Biometrika*, 1975, 62, p. 57—70.
107. Atkinson A. C., Fedorov V. V. Optimal design experiments for discriminating between several models.— *Biometrika*, 1975, 62, p. 289—303.
108. Atkinson A. C. Posterior probabilities for choosing a regression model.— *Biometrika*, 1978, 65, p. 39—48.
109. Ash A., Hedayat A. An introduction to design optimality with overview of the literature.— *Commun. Statist.*, 1978, A7, № 14, p. 1295—1325.
110. Atwood C. L. Sequences converging to D -optimal designs of experiments.— *Ann. Statist.*, 1973, 1, p. 342—352.
111. Atwood C. L. Convergent design sequences for sufficiently regular optimality criteria.— *Ann. Statist.*, 1976, 4, p. 1124—1138.
112. Atwood C. L. Convergent design sequences for sufficiently regular optimality criteria — singular case.— *Ann. Statist.*, 1977, 5.
113. Bandemer H. Problems in foundation and use of optimal experimental design in regression models.— *Math. Oper. Statist., Ser. Statist.*, 1980, 11, p. 89—113.
114. Bandemer H. et al. *Theorie und Anwendung der Optimalen Versuchsplanung 1, Handbuch zur Theorie.*— Berlin: Akad. Verlag, 1977.
115. Bandemer H., Nagel W. Parameter estimation in linear regression models with weak and fuzzy prior knowledge.— *Math. Operationsf. und Statist., Ser. Statist.*, 1981, 12, № 3, p. 297—305.
116. Banerjee K. S. *Weighing designs.*— N. Y.: Marcel Dekker, 1975.
117. Bose R. C. *Mathematical theory of the symmetrical factorial design.*— *Sankhyā*, 1947, 8, p. 107—166.
118. Bose R. C., Bush K. A. Orthogonal arrays of strength two and three.— *Ann. Math. Statist.*, 1952, 23, p. 508—524.
119. Box G. E. P., Hunter W. G. A basis for the selection of a response surface design.— *J. Amer. Statist. Ass.*, 1959, 54, p. 622—654.
120. Box G. E. P., Draper N. R. The choice of a second order rotatable design.— *Biometrika*, 1965, 50, p. 335—352.
121. Box G. E. P., Hunter J. S. The 2^{k-p} fractional factorial designs. I, II:— *Technometrics*, 1961, 3, N 4, p. p. 311—351, 449—458.
122. Box G. E. P., Lucas H. L. Designs of experiments in nonlinear situations.— *Biometrika*, 1959, 46, p. 77—90.
123. Bunke O. Improved inference in linear models.— *Math. Oper. und Statist.*, 1975, 6, № 5, p. 817—829.
124. Bush K. A. Orthogonal arrays of index unity.— *Ann. Math. Stat.*, 1952, 23, p. 426—434.
125. Chakravarti J. M. Fractional replication in asymmetrical factorial designs and partially balanced arrays.— *Sankhyā*, 1956, 17, p. 143—164.
126. Ching-Shui Cheng. Optimality and construction of pseudo-Youden designs.— *Ann. Statist.*, 1981, 9, p. 201—205.
127. Chernoff H. *Sequential Analysis and Optimal Design.*— SIAM, 1972.

128. Chernoff H. Locally optimal designs for estimating parameters.—*Ann. Math. Stat.*, 1953, 24, p. 586—602.
129. Cote R., Manson A. R., Hader K. J. Minimum bias approximation of a general regression model.—*J. Amer. Statist. Ass.*, 1973, 68, № 343, p. 633—638.
130. Cotter S. C. A general method of confounding for symmetrical factorial experiments.—*J. Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1974, 36, p. 267—276.
131. Denes J., Keedwell A. D. Latin squares and their applications.—*N. Y.: Acad. Press*, 1974.
132. Elfving G. Design of linear experiments, 1955 Cramer Festschrift Volume.—*N. Y.: Wiley*, p. 58—74.
133. Ehrenfeld S. On the efficiency of experimental designs.—*Ann. Math. Statist.*, 1953, 26, p. 247—255.
134. Federer W. T. Some recent results in experimental design with a bibliography. II, III.—*Int. Statist. Rev.*, 1981, 49, pp. 95—109, 185—197.
135. Fedorov V. V. Convex design theory.—*Mathem. Operationsf. und Statist., Ser. Statist.*, 1980, 11, № 3, p. 403—413.
136. Fedorov V. V., Mal'ytov M. B. Optimal design in regression experiments.—*Math. Operationsf. und Statist.*, 3, p. 281—308.
137. Ford I., Silvey S. D. A sequentially constructed design for estimating a non-linear parametric function.—*Biometrika*, 1980, 67.
138. Galil Z., Kiefer J. *D*-optimum weighing designs.—*Ann. Statist.*, 1980, 8, p. 1293—1306.
139. Galil Z., Kiefer J. Construction methods for *D*-optimum weighing designs.—*Ann. Statist.*, 1982, 10, p. 502—510.
140. Gribik P. R., Kortanek K. O. Equivalence theorems for cutting plane algorithms for a class of experimental design problems.—*SIAM J. Appl. Math.*, 1977, 32, p. 232—259.
141. Guest P. G. The spacing of observations in polynomial regression.—*Ann. Math. Statist.*, 1958, 29, p. 294—299.
142. Hedayat A., Wallis W. D. Hadamard matrices and their applications.—*Ann. Statist.*, 1978, 6, p. 1184—1238.
143. Hill P. D. H. A review of experimental design procedures for regression model discrimination.—*Technometrics*, 1978, 20, p. 15—21.
144. Hoel P. G. Efficiency problems in polynomial estimation.—*Ann. Math. Stat.*, 1958, 29, p. 1134—1145.
145. Hoel P. G. A simple solution for optimal Chebyshev regression extrapolation.—*Ann. Math. Statist.*, 1966, 37, p. 720—725.
146. Hoerl A. E., Kennard R. W. Ridge regression: non-orthogonal problems.—*Technometrics*, 1970, 12, № 1, p. 55—82.
147. Jennrich R. I., Ralston M. L. Fitting nonlinear models to data.—*Annual Reviews of Biophysics and Bioengineering*, 1979, 8.
148. John J. A. New developments in classical design.—*Math. Operationsf. und Statist., Ser. Statist.*, 1980, 11, p. 380—402.
149. John R. C., Draper N. R. *D*-optimality for regression designs: a review.—*Technometrics*, 1975, 17, p. 15—23.
150. Kiefer J. Optimum experimental designs.—*J. Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1959, 21, p. 272—319.
151. Kiefer J. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory).—*Ann. Statist.*, 1974, 2, p. 849—879.
152. Kiefer J. Optimal design theory in relation to combinatorial design.—*Combinator. Mathem. Optim. Des. Appl.*, 1980, p. 225—241.
153. Kiefer J. Optimal design for fitting biased multivariate analysis.—*In: Proc. Multivar. Symp. III*. *N. Y.: London*, 1973, p. 287—297.
154. Kiefer J., Studden W. S. Optimal designs for large degree polynomial regression.—*Ann. Statist.*, 1976, 4, p. 1113—1123.
155. Kiefer J., Wolfowitz J. Optimum designs in regression problems.—*Ann. Math. Statist.*, 1959, 30, p. 271—294.
156. Kiefer J., Wolfowitz J. On a theorem of Hoel and Levine on extrapolation designs.—*Ann. Math. Statist.*, 1965, 36, p. 1627—1655.

157. Kishen K. On Latin and hypergraecolatin cubes and hypercubes.—*Current Sci.*, 1942, 11, p. 98—99.
158. Kishen K. On the design of experiments for weighing and making other types of measurements.—*Ann. Math. Statist.*, 1945, 16, p. 294—300.
159. Kishen K. On the construction of Latin and hypergraecolatin cubes and hypercubes.—*J. Indian Soc. Agric. Statist.*, 1949, 2, p. 20—48.
160. Kupper L. L., Meydrecht E. F. A new approach to mean squared estimation of response surfaces.—*Biometrika*, 1973, 60, № 3, p. 573—579.
161. Lauter E. Characterization of the optimal designs for the estimation of non-linear parameters.—*Международ. конференция по теор. вероятн. и матем. статистике. Тез. докл. Вильнюс, 1973, т. 2, с. 13—14.*
162. Lauter H. A minimax linear estimator for linear parameters under restriction in form of inequalities.—*Math. Operationsf. und Statist.*, 1975, 6, p. 769—774.
163. Margolin B. H. Resolution IV fractional factorial designs.—*J. Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1969, 31, p. 514—523.
164. Margolin B. H. Non-orthogonal main effect designs for assymetrical factorial experiments.—*J. Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1972, 34, p. 431—440.
165. Mehra R. Optimal input signals for parameter estimation in dinamic systems survey and new results.—*IEEE Trans. Autom. Contr.*, 1974, AC-19, p. 753—768.
166. Melas V. B. Optimal designs for exponential regression.—*Math. Operationsf. und Statist., Ser. Statist.*, 1978, 9, № 1, p. 45—59.
167. Micchelli C. A., Wahba G. Design problems for optimal surface interpolation.—*In: Approximation theory and applications. N. Y.; London: Acad. Press, 1981, p. 329—348.*
168. Mood A. M. On Hotteling weighing problem.—*Ann. Math. Statist.*, 1946, 17, p. 432—446.
169. Myers R. H., Khuri A. I. A new procedure for steepest ascent.—*Commun. in Statist.*, 1979, № A8 (14), p. 1359—1376.
170. Paley R. E. A. C. On ortogonal matrices.—*J. Math. and Phys.*, 1933, 12, p. 311—320.
171. Parsen E. A new approach to the synthesis of optimal smoothing and prediction systems.—*In: Mathematical Optimization Technique. Berkeley (California): Univ. Press, 1963, p. 75—108.*
172. Pazman A. Some features of the optimal design theory — a survey.—*Math. Operationsf. und Statist., Ser. Statist.*, 1980, 11, p. 415—446.
173. Pereira B. de B. Discriminating among separate models: a bibliography.—*Intern. Statist. Rev.*, 1977, 45, p. 163—172.
174. Plackett R. L. Some generalizations in the multifactorial design.—*Biometrika*, 1946, 33, p. 328—332.
175. Preece D. A. Supplementary bibliography of designs for experiments in three dimensions.—*Austr. J. Statist.*, 1979, 21, p. 170—172.
176. Pukelsheim F. On linear regression designs which maximize information.—*J. Statist. Planning and Inference*, 1980, 4, p. 339—364.
177. Raghavarao D. Some optimum weighing designs.—*Ann. Math. Statist.*, 1959, 30, p. 295—303.
178. Raghavarao D. Some aspects of weighing designs.—*Ann. Math. Statist.*, 1960, 31, p. 878—884.
179. Raghavarao D. Constructions and combinatorial problems in design of experiments.—*Wiley, 1971.*
180. Raktoe B. L., Rayner A. A., Chalton D. O. On construction of confounded mixed factorial and lattice designs.—*Austr. J. Statist.*, 1973, 20, p. 209—218.
181. Rao M. B. Weighing designs when « n » is odd.—*Ann. Math. Stat.*, 1966, 37, p. 1371—1381.
182. Rao C. R. The theory of fractional replication in factorial experiments.—*Sankhyā*, 1950, 10, p. 81—86.

183. Rao C. R. Estimation of parameters in a linear model.— *Ann. Statist.*, 1976, 4, p. 1023—1037.
184. Sacks J., Ylvisaker D. Designs for regression problems with correlated errors.— *Ann. Math. Statist.*, 1966, 37, № 1, p. 66—89.
185. Sacks J., Ylvisaker D. Designs for regression problems with correlated errors: many parameters.— *Ann. Math. Statist.*, 1968, 39, № 1, p. 49—69.
186. Sibson R. D_A -optimality and duality.— In: *Progress in Statistics*. Amsterdam, North-Holland, 1974, 2, p. 677—692.
187. Silvey S. D. *Optimal design*.— London: Chapman and Hall, 1980.
188. Spruill C. Optimal designs for second order processes with general linear means.— *Ann. Statist.*, 1980, 8, p. 652—663.
189. Studden W. J. Optimal designs on Tchebysheff points.— *Ann. Math. Statist.*, 1968, 39, № 5, p. 1435—1447.
190. Surdara R. J. Confounding in factorial experiments.— *J. Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1974, 36, p. 439—441.
191. Toutenburg H. *Prior information in linear models*.— N. Y.: Wiley, 1982.
192. Vajda S. *Patterns and configurations in finite spaces*.— Griffin's Statistical Monographs and Courses, N. Y.: Hafner Publ. Co., 1967, № 22.
193. Whittle P. Some general points in the theory of optimal experimental design.— *J. of the Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1973, 35, p. 123—130.
194. Wynn H. Results in the theory and construction of D-optimum experimental designs.— *J. of the Royal Statist. Soc., Ser. B*, 1972, 34, p. 170—186.
195. Wu C. F. Some iterative procedures for generating nonsingular optimal designs.— *Commun. in Statist.*, 1978, 14, № A7, p. 1399—1412.
196. Wu C. F., Wynn H. P. The convergence of general steepest-length algorithms for regular optimum design criteria.— *Ann. Statist.*, 1978, 6, p. 1273—1285.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Адамара матрица 289
Аддельмана планы 281
Активный эксперимент 10
Алгоритм асимптотически оптимальный 327
— глобального поиска 110
— итеративный 307, 317
— локального поиска 107
— поисковый 102, 307, 332
— псевдоградиентный 308
— регулярный 307, 329
— релаксационный 98, 103
— стохастической аппроксимации Роббинса — Монро 330
— — — модифицированный 335
— — — Кифера — Вольфовица 329
— — — модифицированный 335
Априорная информация 11, 219
Асимптотическая оптимальность 87
Асимптотическое разложение 41
— — стохастическое 44
- Базис безусловный 227
— канонический 231
Байесовская оценка 19, 34
Байесовский критерий 13
— план 368
— — оптимальный 143
Бинарное отношение 126
Бокса — Уилсона метод 339
- Вектор эффектов взаимодействий 248, 251
— — — уровней фактора 251
— — — главных 248
— — — уровней фактора 251
Взвешенный метод наименьших квадратов 24
Взвешивание без смещения 303
— со смещением 303
Взвешивания планы 302
— проблема 302
Входной набор 299
- Гаусса — Маркова-схема 23, 29, 138
— — теорема 26
Гаусса — Ньютона метод 45
Гауссовский процесс 223
Генераторы 275
Генерирующие соотношения 275
Геометрический план 275
Гильбертово пространство регулярных сдвигов 223
— — с воспроизводящим ядром (ГПВЯ) 210, 224
Главные эффекты 248
Главных эффектов модель 264
— — план 264
Границы длины 361
Гребневая регрессия 238
- Дерево алфавитное 363
— двоичное оптимальное 363
Джеймса — Стейна сжимающая оценка 38
Дискриминирующий эксперимент 17, 366
Дисперсионного анализа план 246
Дисперсия апостериорная 237
Доминируемость 10
— процедуры 151
Достаточная статистика 20
Дэвидона — Флетчера — Пауэлла метод 105
- Задача выпуклого программирования 102
— корректная 218
— — по Тихонову 218
— — статистически 226
— минимаксного планирования не-тривиальная 145
— многокритериальная 125
— — максимизация 126
— некорректная 218

- Задача оптимального планирования эксперимента 51
 — поиска плана обратная 279
 — разбиения на ортогональные блоки 285
 — смешивания 285
 — статистически некорректная 229
 — стохастического программирования 320
 Заметания свойство 336
- Имитационный эксперимент 9, 17, 181
 Индекс таблицы 269
 Информации функционал 63
 Информационное количество Фишера 20
 — — Шеннона 233
 — уклонение Кульбака 141
 Информационно-статистический подход 116
 Информационный оператор 231
 Истинное среднее 251
- Калибровочный оператор 230, 245
 — функционал 229
 Канал связи с множественным доступом (КМД) 350
 Канонический базис 231
 Квадрат гипергреколатинский 269
 — греколатинский 269
 — латинский 269
 Квадраты ортогональные 269, 289
 — стандартные 269
 Кифера — Вольфовица алгоритм 333, 335
 — — теорема 58, 193
 Кифера план 74
 Класс векторных сдвигов 222
 Код 361
 Количество информации в смысле Шеннона 233
 Компромиссные планы 281
 Коно план 74
 Контраст 248, 272
 Контролируемые переменные 51
 Координаты пучка 273
 Корреляционный оператор 223
 — — обратный 223
 Коэффициент неравномерности 266
 Критерии эквивалентные 4
 Критерий векторный 125
 — качества эксперимента 10
 — качественный 126
 — количественный 125
 — линейный 59, 84
 — минимаксный 167
 — независимый (по предпочтению) 126
 — оптимальности 51
- Критерий D 58, 67
 — — обобщенный 58
 — D_s 59, 80
 — E 67
 — F 367
 — G 58, 62
 — T 366
 — χ^2 367
 Крутого восхождения метод 339
 Куб гипергреколатинский 270
 — греколатинский 269
 — латинский 269
 Кубы ортогональные 269
 — стандартные 269
- Лагранжа функция 130, 321
 Латинский квадрат 269
 — куб 269
 — план 262
 Линейная регрессионная модель 23, 137, 190
 — статистика 222
 — теория возмущений 184
 Линейный критерий 59, 84
 Ломаных метод 115
 Ляпунова функция 307
- Марквардта метод 45
 Маркова цепь 184
 Математическая модель (эксперимента) 9
 Матрица Адамара 289
 — главных эффектов 249
 — информация 64
 — информационная 191
 — обобщенная обратная 26
 — плана 217
 — порождающая план 358
 — псевдообратная (Мура — Пенроуза) 26
 — эффектов взаимодействий 249
 Мера обобщенная 197
 Меры (веса) точек плана 51
 Метод выборки антисимметричной 183
 — — расслоенной 182
 — — суцественной 182
 — Гаусса — Ньютона 45
 — градиентный 105
 — Дэвидона — Флетчера — Пауэлла 105
 — зависимых испытаний 183
 — крутого восхождения 339
 — ломаных 115
 — Марквардта 45
 — наискорейшего подъема 105
 — Ньютона 105
 — обобщенного градиента 105
 — оценивания 150

- Метод переменной метрики 105
 - координатного подъема 106
 - — — случайного 106
 - симплексный 344
 - случайного поиска 107, 333
 - — m -градиента 108, 333
 - сопряженных направлений 106
 - существенной выборки 182
 - Хартли 45
 - штрафных функций 318
 - — — внешних 320
 - — — внутренних 320
 - *DUD* 46
 - Минимаксный критерий 13
 - Множество допустимых оценок 125
 - — преобразований 125
 - Парето 10, 127
 - положительности (меры) 198
 - стационарных точек 104
 - условий 10
 - эффектов полное 249
 - Модели конкурирующие 366, 375
 - Моделирование распределений 181
 - Модель аддитивная 365
 - главных эффектов 264
 - дизъюнктивная 349
 - истинных эффектов 254, 259
 - — — — — полная 254
 - — — — — смешанная 261
 - — — — — факторная 257, 259
 - — — — A' 253
 - — — — A° 253
 - — — — C' 257
 - — — — C° 259
 - неполного ранга 25, 29
 - однородная 360
 - полная факторная 253
 - полного ранга 23
 - Реньи 358
 - чебышевская 254
 - F 46, 136
- Набор весов E -оптимальный 168
- — G -оптимальный 168
 - — MV -оптимальный 168
 - номеров существенных факторов 350
- Наискорейшего подъема метод 105
- Насыщенное планирование 158
- Невырожденный процесс 223
- Неполноблочное планирование 263
- Неравенство Рао — Крамера 19, 134
- Хёфдинга 141
- Нерегулярная система функций 158
- Нормальных уравнений система 24, 28
- Ньютона метод 105
- Область действия 51
- определения переменных 247.
- Область планирования 191, 234
 - Обобщенная дисперсия 57
 - Обобщенный градиент 317
 - D -критерий 58
 - Однородный класс 360
 - Оператор 230
 - информационный 231
 - корреляционный 223
 - проектирования 316
 - усреднения 337
 - — дифференцирующий 337
 - — — потенциальный 338
 - Операция восстановления 294
 - Опорные точки плана 51
 - Определяющие пучки 275
 - Оптимальности критерий 52
 - Оптимальности асимптотическая 87
 - A 52, 84, 264
 - C 52
 - D 52, 58, 64, 191, 264, 267
 - D' 240
 - E 52, 64
 - G 52, 191, 264
 - L 52, 84
 - Φ_p (по Киферу) 64
 - Оптимальный коэффициент 92
 - план 51, 156
 - — по Парето 10
 - — эксперимента 10
 - Ординарные модели 353
 - Ортогональность эффектов 249
 - Ортогональный план 265
 - Отделяющий элемент 358
 - Отсеивающий эксперимент 17, 348
 - Оценивание робастное 327
 - Оценка 18
 - байесовская 19, 34
 - — линейная 35
 - гребневая 38
 - допустимая 19
 - ИРДЖИНА 47, 137
 - линейная 23
 - — байесовская 35
 - — минимаксная 35
 - максимальная (по отношению) 127
 - максимального правдоподобия 22
 - максимальной вероятности 22
 - метода наименьших квадратов (МНК) 23, 190, 228
 - — — — обобщенного 28
 - минимаксная 19, 34, 37
 - — линейная 35
 - наилучшая линейная несмещенная (НЛН) 23
 - несмещенная 19, 225
 - — с минимальной дисперсией 19
 - нечеткая псевдобайесовская 37
 - сжимающая 38
 - — Джеймса — Стейна 38
 - эффективная 20
 - — оптимальная по Парето 127

- Оценка эффективная подлинно (по Борвейну) 127
 — слабо (по Слейтеру) 127
 — собственно (по Джоффриону) 127
 — M 22
- Параллелепипедные сетки 92
 Параметр нецентральности 367
 Параметризация линейная 370
 Параметрическая задача оценивания 18
 — функция, допускающая оценку 25
 Парето множество 10
 Переменная качественная 247
 — количественная 247
 Перемешной метрики метод 105
 План 247, 350
 — байесовский 368
 — взвешивания 302
 — главных эффектов 264
 — глобально-оптимальный 211
 — градиентный 199
 — дробный 248
 — геометрический 275
 — Кифера 74
 — Коно 74
 — латинский 262
 — линейно-оптимальный 60
 — локально-оптимальный 138
 — локально D -оптимальный 146
 — — — насыщенный 146
 — минимаксный 62, 146, 368, 370
 — насыщенный 72
 — невырожденный для факторного множества 261
 — непрерывный 53
 — нормированный статический 133
 — оптимальный для экстраполяции в точку 85
 — — точный 210
 — ортогональный 72
 — полный 248
 — последовательный 132, 375
 — равномерный 248
 — разрешающей способности $2r - 1$ 264
 — — — $2r$ 264
 — рандомизированный 150
 — регулярный 52
 — ротатабельный 72
 — симметричный 248
 — — второго порядка 73
 — симплекс-решетчатый 79
 — симплекс-центрированный 79
 — сингулярный 52
 — статический для дизъюнктивной модели 362
 — — разделяющий сильно 349, 351, 358
 — — — слабо 351
- План факторный 248
 — эквидистантный 89
 — эксперимента 10, 51, 152, 190, 234
 — экстремальный 199
 — D -оптимальный 57, 191
 — D' -оптимальный 240
 — G -оптимальный 191
 — Q -оптимальный 86, 264, 267
 — T -оптимальный 367
 — — — локально 368
 — γ -оптимальный 61
 Планирование насыщенное 158
 — неполнооблочное 263
 — последовательное 348, 363
 — статическое 349
 Планы дисперсионного анализа 246
 — компромиссные 281
 — — симметричные факторные Аддельмана 281
 — M -эквивалентные 193
 Плотность измерений 186
 Поисковый алгоритм 307, 332
 Покоординатного подъема метод 106
 — случайного подъема метод 107, 333
 Полином Чебышёва 87
 Полиномиальная регрессия 69, 73, 76, 87, 174
 Полиномы Шеффе приведенные 78
 Полная модель истинных эффектов 254, 259
 — — факторная 253
 Полное множество ортогональных латинских квадратов 269
 — — эффектов 248
 Полный факторный эксперимент 72
 Помеха 309
 — аддитивная 309
 — мультипликативная 309
 Порядковая шкала 126
 Последовательная стратегия 132, 356
 Последовательное оценивание 131
 — планирование 348, 363
 Последовательность оценок асимптотически нормальная 21
 — — — эффективная 21
 — — — в точке 21
 — — — состоятельная 20
 — — — в среднеквадратичном 21
 — — — сильно 21
 — — — слабо 21
 — — \sqrt{n} -состоятельная 21
 — планов асимптотически оптимальная 212
 — регулярная 336
 — штрафных функций 318
 — — — внешних 318
 — — — внутренних 320
 Последовательный план 132
 Пофакторная решающая функция 355

- Предельная скорость отсеивающего плана 352, 354, 355
 Преобразование допустимое 125
 Преобразование масштаб 299
 — скелет 299
 — — допустимый 299
 — структура 299
 Приведенные модели Шеффе 78
 Проблема упаковки 284
 Произведение векторов 248
 — планов 297
 Пространство мер 197
 — регулярных сдвигов случайного процесса 213
 Процедура анализа и планирования эксперимента 151
 — второго порядка 98
 — допустимая 151
 — локально несмещенная 151, 179, 180
 — несмещенная 151, 156, 161
 — нулевого порядка 101
 — первого порядка 96, 101, 373
 — рекуррентная 138
 Процесс случайный второго порядка 223
 — — гауссовский 225
 — — невырожденный 223
 Псевдогенераторы 276
 Псевдоградиентный алгоритм 308
 Псевдообратная матрица 26
 Пучки определяющие 275
- Разделяющая система 358
 Рандомизированный план 150
 Рао — Крамера неравенство 19, 134
 Расщепление фактора 292
 Регрессии уравнение 50
 — функция 50
 Регрессионная модель 12, 189
 — — билинейная 356
 — — нелинейная 40
 Регрессионный эксперимент 12, 225
 Регрессия гребневая 238
 — полиномиальная 69, 73, 76, 87, 174
 — тригонометрическая 88, 175
 Регуляризация 219
 Регулярная система функций 158
 Регулярное соответствие 280
 Регулярный факторный план 265
 — — — мощности t 265
 Рекуррентная процедура оценивания 138
 Релаксационный метод 103
 Реньи модель 358
 Решающая функция приемника 351
 Решение некорректной задачи 220
 — обобщенное 218
 — сильное 227
 — — порядка p 227
 — слабое 220, 227
- Риск стратегии 133
 Риска функция 18
 Робастное оценивание 327
 Роббинса — Монро алгоритм 330
- Свойство заметания 336
 Седловая точка 321
 Семейство последовательных планов 136
 — — стратегий 135
 Сетки кубические 114
 — равномерные 114
 Сжатие фактора 292
 Симплекс k -мерный 344
 — регулярный 344
 Симплекс-планы 73
 Сидром (m -) 358
 Система нормальных уравнений 24, 28
 — разделяющая 358
 — смежная 279
 — функций перерегулярная 158
 — — регулярная 158
 Систематическая ошибка 13
 Скорость сильно разделяющего плана 349
 Слабое решение некорректной задачи 220
 Слейтера условие регулярности 130, 321
 Случайная ошибка 13
 Случайного поиска метод 107, 333
 Случайный процесс второго порядка 223
 — — гауссовский 225
 — — невырожденный 223
 Смещение оценки 19
 Соответствие регулярное 280
 Сопряженных направлений метод 106
 Способ удвоения 103
 Средняя длина двоичного дерева 363
 Статистический эксперимент 9
 Степени свободы ортогональные 274
 Стоимость эксперимента 10
 Стохастической аппроксимации алгоритм 330, 333, 335
 Стратегия последовательная 132, 356
 Схема Гаусса — Маркова 23, 29, 138
 Сходимость в среднем 310
 — — — квадратическом 312
 — почти наверное (п. н.) 312
 — с вероятностью 1 330
- Таблица ортогональная мощности ξ 268, 287
 Теорема Гаусса — Маркова 26
 — двойственности 65, 68
 — Кифера — Вольфовица 58, 193
 — о взаимной ограниченности 64

- Теорема эквивалентности 50, 56
 Теория возмущений линейная 184
 — многомерных схем 263
 — отсеивающих экспериментов (ОЭ) 348
 Точка максимума глобального 102
 — — локального 102
 Точки, занятые взаимодействием факторов 280
 — — факторами 280
 Тригонометрическая регрессия 88, 475
- Унимодальная функция 102
 Уравнение регрессии 50
 Уровень переменной 247
 Условие пропорциональности частот-265
 — регулярности Слейтера 130, 321
 — сверхнасыщенности 162
 — сильной регулярности 25
 — Эйкера 25
 Усреднения оператор 337
- Фактор блокочный 262
 Факторное множество 253
 Факторный эксперимент 15
 Факторы взаимодействующие 281
 Функционал градиентный 198
 — информации 63
 — калибровочный 229
 — опорный 194
 — экстремальный 199
 Функция вогнутая 104
 — — сильно 105
 — Лагранжа 130, 321
 — Ляпунова 307
 — параметрическая, допускающая оценку 25
 — потерь 18, 133
- Функция регрессии 50
 — риска 18
 — унимодальная 102, 111
 — ценности 184
 — эффективности 300
- Хёффдинга неравенство 141
- Цепь Маркова 184
- Чебышёва полином 87
 Число контрастов 272
 — степеней свободы 248
- Шеффе приведенные модели 78
 — — полиномы 78
- Шкала интервалов 125
 — критерия 125
 — порядковая 126
- Штрафных функций метод 318, 320
 — — последовательность 318, 320
- Эйкера условие 25
 Эксперимент 9
 — дискриминирующий 17, 366
 — имитационный 9, 17, 181
 — отсеивающий (ОЭ) 17, 348.
 — по проверке гипотезы 17
 — регрессионный 12
 — факторный 15
 — экстремальный 17, 306
- Эффект взаимодействий 248, 251
 — — r -факторный 248
 — несмешанный 286
 — смешанный 286
 — i -го уровня 248

*Сергей Михайлович Ермаков,
Вячеслав Зиновьевич Бродский,
Анатолий Александрович Жигляевский,
Виктор Павлович Козлов,
Михаил Борисович Малютов,
Вячеслав Борисович Мелас,
Евгений Витальевич Седунов,
Валерий Вадимович Федоров*

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ
ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА**

Редактор *А. П. Коростёлев*
Техн. редактор *Е. В. Морозова*
Корректоры *О. А. Сигал, Н. Д. Дорохова*

ИБ № 12231

Сдано в набор 05.04.83. Подписано к печати 10.11.83. Т-19295. Формат 60×90^{1/16}. Бумага тип. № 3. Обыкновенная гарнитура. Высокая печать, Условн. печ. л. 24,5, Уч.-изд. л. 26,01, Тираж 26 000 экз, Заказ № 563, Цена 1 р. 60 к.

Издательство «Наука»
Главная редакция физико-математической литературы
117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

4-я типография издательства «Наука». 630077, Новосибирск, 77, Станиславского, 25

і р. 60 к.