

L-оптимальные планы для регрессионной модели Фурье без свободного члена*

В. Б. Мелас, П. В. Шпилев

Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Для цитирования: Мелас В. Б., Шпилев П. В. *L*-оптимальные планы для регрессионной модели Фурье без свободного члена // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 1. С. 64–75.

<https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.107>

Данная работа посвящена задаче построения *L*-оптимальных планов для тригонометрической регрессионной модели Фурье без свободного члена. В работе рассматриваются диагональные матрицы *L* с комбинацией нулей и единиц на главной диагонали. Показано, что в случае, когда $L = I$ (т. е. когда в качестве матрицы *L* выбирается единичная матрица), *L*-оптимальный план совпадает с *D*-оптимальным. В более общем случае (когда некоторые диагональные элементы равны нулю) размерность задачи может быть уменьшена, если оптимальный план является симметричным. Полученные результаты проиллюстрированы на примере задачи построения двух *L*-оптимальных планов для тригонометрической модели порядка 12, которая сводится к задаче построения планов для моделей порядков 3 и 4 соответственно.

Ключевые слова: *L*-оптимальные планы, *s*-оптимальные планы, планы, оптимальные для оценивания индивидуального коэффициента, тригонометрическая регрессия без свободного члена.

1. Введение. Тригонометрические регрессионные модели Фурье широко используются на практике для описания периодических процессов. В частности, эти модели применяются в машиностроении [1], медицине [2], сельском хозяйстве [3], биологии [4]. Исследованию проблемы построения оптимальных планов для этих моделей (для разных критериев оптимальности) посвящено множество работ (см., например, [5–10]). До настоящего времени внимание исследователей было ограничено только классической моделью с числом неизвестных параметров $2m + 1$, где m — порядок регрессионной модели. В классической модели свободный член (параметр θ_0) предполагается не равным нулю. Вместе с тем на практике возникают ситуации, когда нулевой отклик, то есть начальное положение объекта экспериментирования, уже известен или эта информация не важна. В таких случаях целесообразно использовать модели без свободного члена (он предполагается равным нулю). Подобные модели до настоящего времени еще мало изучены. Для полиномиальной регрессионной модели был получен ряд результатов для *D*-, *s*- и e_k -критериев [11–14]. Оптимальные планы для тригонометрических регрессионных моделей без свободного члена, насколько известно авторам, до настоящего времени не исследовались. Данная работа посвящена изучению *L*-оптимальных планов для таких

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-01-00096-а).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

моделей. Во втором разделе даются базовые понятия и определения. Третий раздел содержит основные результаты данной работы. В этом разделе результаты, полученные авторами для классической модели [10, 15], обобщены на случай модели без свободного члена.

2. Постановка задачи построения L -оптимального плана. Рассмотрим классическую регрессионную модель Фурье без свободного члена:

$$y = \sum_{i=1}^m \theta_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=1}^m \theta_{2i} \cos(ix) + \epsilon = \theta^T f(x) + \epsilon, \quad t \in \chi, \quad (1)$$

где $f(x) = (\sin(x), \cos(x), \dots, \sin(mx), \cos(mx))^T$ — вектор регрессионных функций, $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_{2m})^T$ — вектор неизвестных параметров, ϵ — случайная величина, характеризующая ошибки наблюдения, $\chi = [-\pi, \pi]$ — интервал планирования. Результаты различных экспериментов предполагаются независимыми. Под (непрерывным) планом эксперимента мы будем понимать вероятностную меру ξ с конечным носителем на интервале планирования $[-\pi, \pi]$. Мера ξ определяется таблицей

$$\xi = \begin{pmatrix} t_1 & \dots & t_n \\ \omega_1 & \dots & \omega_n \end{pmatrix}, \quad t_i \in [-\pi, \pi], \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Носитель плана ξ состоит из точек, в которых проводятся наблюдения, а веса ω_i определяют относительные доли общего числа наблюдений, проводимых в соответствующих точках [7], и удовлетворяют условиям $\omega_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \omega_i = 1$.

Информационной матрицей Фишера плана ξ (см., например, [14]) называется матрица

$$M(\xi) = \left(\int_{-\pi}^{\pi} f(t)f(t)^T d\xi(t) \right) \in R^{2m \times 2m}.$$

Вырожденным планом называется план, информационная матрица которого вырожденная.

Данная работа посвящена исследованию в том числе и вырожденных оптимальных планов, которые по сравнению с невырожденными планами обладают некоторыми специфическими особенностями. Введем два специальных класса, которые будем использовать в дальнейшем, а также дадим определение L -оптимального плана в общем случае.

Определение 2.1. Для заданной матрицы

$$L = \sum_{i=1}^k l_i l_i^T$$

с векторами $l_i \in R^{2m}$ определим класс Ξ_L как множество всех непрерывных планов эксперимента, для которых линейная комбинация параметров $l_i^T \beta$, $i = 1, \dots, k$, оцениваема, то есть вектор l_i принадлежит пространству столбцов матрицы $M(\xi)$: $l_i \in \mathcal{R}(M(\xi))$, $i = 1, \dots, k$ (см., например, [17, формула (4а.2)]).

Определение 2.2. Будем говорить, что непрерывный план η принадлежит классу Ξ_L^* , если $\eta \in \Xi_L$ и для любого непрерывного плана ξ существует предел

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} f^T(t)M^+(\xi_\alpha)LM^+(\xi_\alpha)f(t) = f^T(t)M^+(\eta)LM^+(\eta)f(t), \quad (2)$$

где $\xi_\alpha = (1 - \alpha)\eta + \alpha\xi$, $\alpha \in [0, 1]$.

Определение 2.3. План ξ^* будем называть L -оптимальным, если $\xi^* \in \Xi_L$ и

$$\xi^* = \arg \min_{\xi \in \Xi_L} \text{tr} LM(\xi)^+,$$

где L — фиксированная неотрицательно определенная матрица и $M^+(\xi)$ — обобщенно обратная в смысле Мура — Пенроуза матрица для $M(\xi)$ (см., например, [17]).

В дальнейшем мы будем рассматривать планы, имеющие специфическую структуру. В этой связи нам понадобится сформулировать еще одно определение.

Определение 2.4. Будем говорить, что непрерывный план η является *абсолютно симметричным*, если данный план имеет следующий вид:

$$\eta = \begin{pmatrix} \bar{t}_1 & \dots & \bar{t}_{4n+2} \\ \bar{\omega}_1 & \dots & \bar{\omega}_{4n+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\eta_{\frac{\pi}{2}} & \eta_{\frac{\pi}{2}} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где

$$-\eta_{\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} -\pi + t_1 & \dots & -\pi + t_n & -\frac{\pi}{2} & -t_n & \dots & -t_1 \\ \omega_1 & \dots & \omega_n & \omega_{n+1} & \omega_n & \dots & \omega_1 \end{pmatrix},$$

$$\eta_{\frac{\pi}{2}} = \begin{pmatrix} t_1 & \dots & t_n & \frac{\pi}{2} & \pi - t_n & \dots & \pi - t_1 \\ \omega_1 & \dots & \omega_n & \omega_{n+1} & \omega_n & \dots & \omega_1 \end{pmatrix},$$

$t_i \in [0, \pi/2]$, а веса удовлетворяют равенству $4 \sum_{i=1}^n \omega_i + 2\omega_{n+1} = 1$.

Удобным инструментом проверки вырожденного плана на L -оптимальность является следующая теорема (см. [15, 18]).

Теорема 2.1. Пусть $L \in R^{2m \times 2m}$ — фиксированная, неотрицательно определенная матрица. Имеют место следующие утверждения:

(а) план $\xi \in \Xi_L$ тогда и только тогда, когда

$$l_i^T M(\xi)^- M(\xi) = l_i^T, \quad i = 1, \dots, 2m,$$

где $M(\xi)^-$ — обобщенно обратная для $M(\xi)$ матрица;

(б) план $\xi^* \in \Xi_L$ является L -оптимальным тогда и только тогда, когда существует такая матрица $M^-(\xi^*)$, что

$$\max_{t \in \chi} \varphi(t, \xi^*) = \text{tr} LM^+(\xi^*),$$

где $\varphi(t, \xi) = f^T(t)M(\xi)^- LM(\xi)^- f(t)$;

(с) в точках $t_i \in \text{supp}(\xi^*)$ имеет место равенство

$$\varphi(t_i) = \text{tr} LM(\xi^*)^+.$$

Доказательство данной теоремы повторяет стандартные рассуждения для невырожденного случая (см., например, [19]) и здесь приводиться не будет.

Замечание. Отметим, что в случае, когда оптимальный план ξ^* является невырожденным, матрица $M^-(\xi^*)$ из условия (б) совпадает с $M^{-1}(\xi^*)$, а в случае, когда он вырожден и принадлежит классу Ξ_L^* , эта матрица совпадает с $M^+(\xi^*)$. Наиболее

сложным для исследования является случай, когда оптимальный план ξ^* принадлежит Ξ_L и не принадлежит Ξ_L^* . Для этого случая некоторые методы построения экстремального полинома $\varphi(t, \xi^*)$ рассмотрены в работе [18].

3. L -оптимальные планы для тригонометрических моделей без свободного члена. Данный раздел посвящен результатам, полученным в настоящей работе.

Для начала сформулируем теорему, определяющую вид информационной матрицы для абсолютно симметричного плана. В дальнейшем мы покажем, что вырожденные оптимальные планы принадлежат классу абсолютно симметричных.

Теорема 3.1. Пусть $(4n+2)$ -точечный план η является абсолютно симметричным. Переставим компоненты вектора регрессионных функций следующим образом:

$$\tilde{f}(t) = (f_{\cos}^{(odd)}(t)^T, f_{\cos}^{(even)}(t)^T, f_{\sin}^{(odd)}(t)^T, f_{\sin}^{(even)}(t)^T)^T, \text{ где:}$$

$$f_{\cos}^{(odd)}(t) = \begin{cases} (\cos(t), \cos(3t) \dots, \cos((m-3)t), \cos((m-1)t))^T, & m - \text{четное,} \\ (\cos(t), \cos(3t) \dots, \cos((m-2)t), \cos(mt))^T, & m - \text{нечетное;} \end{cases}$$

$$f_{\cos}^{(even)}(t) = \begin{cases} (\cos(2t), \cos(4t) \dots, \cos((m-2)t), \cos(mt))^T, & m - \text{четное,} \\ (\cos(2t), \cos(4t) \dots, \cos((m-3)t), \cos((m-1)t))^T, & m - \text{нечетное;} \end{cases}$$

$$f_{\sin}^{(odd)}(t) = \begin{cases} (\sin(t), \sin(3t) \dots, \sin((m-3)t), \sin((m-1)t))^T, & m - \text{четное,} \\ (\sin(t), \sin(3t) \dots, \sin((m-2)t), \sin(mt))^T, & m - \text{нечетное;} \end{cases}$$

$$f_{\sin}^{(even)}(t) = \begin{cases} (\sin(2t), \sin(4t) \dots, \sin((m-2)t), \sin(mt))^T, & m - \text{четное,} \\ (\sin(2t), \sin(4t) \dots, \sin((m-3)t), \sin((m-1)t))^T, & m - \text{нечетное.} \end{cases}$$

Для вектора регрессионных функций $\tilde{f}(t)$ информационная матрица плана η имеет вид

$$M(\eta) = \left(\sum_{i=1}^{4n+2} \tilde{f}(\bar{t}_i) \tilde{f}(\bar{t}_i)^T \bar{\omega}_i \right) =$$

$$= \begin{pmatrix} M_{\cos}^{(odd)}(\eta) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M_{\cos}^{(even)}(\eta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{\sin}^{(odd)}(\eta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_{\sin}^{(even)}(\eta) \end{pmatrix},$$

где $M_{\beta}^{(\alpha)}(\eta)$ – информационная матрица для соответствующего компонента вектора регрессионных функций: $f_{\beta}^{(\alpha)}(t)$, $\alpha = odd, even$; $\beta = cos, sin$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для того чтобы доказать данную теорему, достаточно рассмотреть всевозможные сочетания компонентов вектора регрессионных функций $\tilde{f}(t)$ и показать, что соответствующие блоки информационной матрицы равны нулю. Мы рассмотрим один случай, остальные доказываются аналогично.

Пусть, для определенности, m – четное.

Докажем, что $M_{12}(\eta) = \left(\sum_{r=1}^{4n+2} f_{\cos}^{(odd)}(\bar{t}_r) f_{\cos}^{(even)}(\bar{t}_r)^T \bar{\omega}_r \right) \equiv 0$. Имеем

$$M_{12}(\eta) = \left(\sum_{r=1}^{4n+2} f_{\cos}^{(odd)}(\bar{t}_r) f_{\cos}^{(even)}(\bar{t}_r)^T \bar{\omega}_r \right) = \left(\sum_{r=1}^{4n+2} \cos((2i-1)\bar{t}_r) \cos(2j\bar{t}_r) \bar{\omega}_r \right)_{i,j=1}^{m/2}.$$

Таким образом, достаточно показать, что для любых $i, j = 1, \dots, \frac{m}{2}$ имеет место равенство

$$\sum_{r=1}^{4n+2} \cos((2i-1)\bar{t}_r) \cos(2j\bar{t}_r) \bar{\omega}_r = 0.$$

Воспользуемся формулой Эйлера:

$$\sum_{r=1}^{4n+2} \cos((2i-1)\bar{t}_r) \cos(2j\bar{t}_r) \bar{\omega}_r = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^{4n+2} (\cos((2(i+j)-1)\bar{t}_r) + \cos((2(i-j)-1)\bar{t}_r)) \bar{\omega}_r.$$

В силу того, что функция $\cos((2k-1)t)$ для любого целого k является нечетной относительно точки $\frac{\pi}{2}$ на интервале $[0, \pi]$, и в силу того, что точки абсолютно симметричного плана на интервале $[0, \pi]$ симметричны относительно точки $\frac{\pi}{2}$, данное выражение обращается в ноль для любых целых i, j . Теорема доказана. \square

Информационные матрицы абсолютно симметричных планов обладают еще одним важным свойством, которое можно использовать для нахождения оптимальных планов. Имеет место следующая теорема.

Теорема 3.2. *Рассмотрим абсолютно симметричный план $\eta^{(k)}$ следующего вида:*

$$\eta^{(k)} = \left(\begin{array}{cccccc} -\eta \frac{(2k-1)\pi}{2k} & \dots & -\eta \frac{\pi}{2k} & \eta \frac{\pi}{2k} & \dots & \eta \frac{(2k-1)\pi}{2k} \end{array} \right),$$

где k – некоторое натуральное число, а $\eta \frac{(2j-1)\pi}{2k}$ – план, симметричный относительно $\frac{(2j-1)\pi}{2k}$ на интервале $[\frac{(j-1)\pi}{k}, \frac{j\pi}{k}]$:

$$\eta \frac{(2j-1)\pi}{2k} = \left(\begin{array}{cccccc} \frac{(j-1)\pi}{k} + \frac{t_1}{k} & \dots & \frac{(j-1)\pi}{k} + \frac{t_n}{k} & \frac{(2j-1)\pi}{2k} & \frac{j\pi}{k} - \frac{t_n}{k} & \dots & \frac{j\pi}{k} - \frac{t_1}{k} \\ \omega_1/k & \dots & \omega_n/k & \omega_{n+1}/k & \omega_n/k & \dots & \omega_1/k \end{array} \right),$$

$$-\eta \frac{(2j-1)\pi}{2k} = \left(\begin{array}{cccccc} -\frac{j\pi}{k} + \frac{t_1}{k} & \dots & -\frac{j\pi}{k} + \frac{t_n}{k} & -\frac{(2j-1)\pi}{2k} & -\frac{(j-1)\pi}{k} - \frac{t_n}{k} & \dots & -\frac{(j-1)\pi}{k} - \frac{t_1}{k} \\ \omega_1/k & \dots & \omega_n/k & \omega_{n+1}/k & \omega_n/k & \dots & \omega_1/k \end{array} \right).$$

Пусть $t = kp$, $p > 1$. В этом случае информационную матрицу плана $\eta^{(k)}$ путем перестановок строк и столбцов можно представить в следующей форме:

$$M(\eta^{(k)}) = \left(\begin{array}{cc} \tilde{M}^{(p)}(\eta^{(k)}) & 0 \\ 0 & \tilde{M}^{((k-1)p)}(\eta^{(k)}) \end{array} \right),$$

где $\tilde{M}^{(p)}(\eta^{(k)}) \in R^{2p \times 2p}$ – информационная матрица для подвектора регрессионных функций, составленного из элементов, кратных k , т. е.

$$\tilde{M}^{(p)}(\eta^{(k)}) = \left(\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{f}_{(k)}^{(2p)}(t) \tilde{f}_{(k)}^{(2p)}(t)^T d\eta^{(k)} \right),$$

где $\tilde{f}_{(k)}^{(2p)}(t) = (\cos(kt), \sin(kt), \cos(2kt), \sin(2kt), \dots, \cos(pkt), \sin(pkt))^T$.

Матрица $\tilde{M}^{((k-1)p)}(\eta^{(k)}) \in R^{2(k-1)p \times 2(k-1)p}$ – информационная матрица для подвектора, составленного из элементов вектора регрессионных функций, не кратных k . Для плана $\eta^{(k)}$ матрица $\tilde{M}^{(p)}(\eta^{(k)})$ не зависит от k , т. е. $\tilde{M}^{(p)}(\eta^{(k)}) = \tilde{M}^{(p)}(\eta^{(1)})$, $k = 2, 3, \dots$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для того чтобы доказать данную теорему, достаточно рассмотреть всевозможные сочетания компонентов вектора регрессионных функций $f(t)$ (\sin и \cos) и показать, чему равны соответствующие блоки информационной матрицы. Мы рассмотрим один случай (сочетания синусов), остальные случаи доказываются аналогично. Пусть $\bar{t}_r^{(k)}, \bar{\omega}_r^{(k)}$ — точки и веса плана $\eta^{(k)}$. Имеем

$$\begin{aligned} M_{\sin}^{(p)}(\eta^{(k)}) &= \left(\sum_{r=1}^{k(4n+2)} \sin(ki\bar{t}_r^{(k)}) \sin(kj\bar{t}_r^{(k)}) \bar{\omega}_r^{(k)} \right)_{i,j=1}^p = \\ &= \left(k \sum_{r=1}^{4n+2} \sin(i(k\bar{t}_r^{(k)})) \sin(j(k\bar{t}_r^{(k)})) \bar{\omega}_r^{(k)} \right)_{i,j=1}^p = \\ &= \left(\sum_{r=1}^{4n+2} \sin(i\bar{t}_r^{(1)}) \sin(j\bar{t}_r^{(1)}) \bar{\omega}_r^{(1)} \right)_{i,j=1}^p = M_{\sin}^{(p)}(\eta^{(1)}). \end{aligned}$$

Теперь покажем, что элементы $m_{ij}^{(p)}(\eta^{(k)})$, $i = 1, \dots, p$, $j = 1, \dots, pk - 1$, $j \neq k, 2k, \dots, pk$, внедиагонального блока информационной матрицы равны нулю:

$$\begin{aligned} m_{ij}^{(p)}(\eta^{(k)}) &= \sum_{r=1}^{k(4n+2)} \sin(ki\bar{t}_r^{(k)}) \sin(j\bar{t}_r^{(k)}) \bar{\omega}_r^{(k)} \stackrel{(*)}{=} \\ &\stackrel{(*)}{=} \sum_{r=1}^{4n+2} \sum_{l=1}^k \sin(i(\bar{t}_r^{(1)} + (l-1)\pi)) \sin(j\bar{t}_r^{(k)}) \frac{\bar{\omega}_r^{(1)}}{k} = \\ &= \sum_{r=1}^{4n+2} \sin(i(\bar{t}_r^{(1)})) \bar{\omega}_r^{(1)} \frac{1}{k} \sum_{l=1}^k (-1)^{i(l-1)} \sin(j\bar{t}_r^{(k)}) = \\ &= 2 \sum_{r=1}^n \frac{\sin(it_r)\omega_r}{k} \sum_{l=1}^k (-1)^{i(l-1)} \sin\left(\frac{jt_r}{k} + \frac{j(l-1)\pi}{k}\right) + \sin\left(\frac{j\pi}{k} - \frac{jt_r}{k}\right) + \\ &+ \frac{\omega_{n+1}}{k} \sum_{l=1}^k (-1)^{il} \sin\left(\frac{j(2l-1)\pi}{2k}\right) - \frac{\omega_{n+1}}{k} \sum_{l=1}^k (-1)^{il} \sin\left(\frac{j(2l-1)\pi}{2k}\right) = \\ &= 4 \sum_{r=1}^n \frac{\sin(it_r)\omega_r}{k} \sum_{l=1}^k (-1)^{i(l-1)} \sin\left(\frac{j}{k} \frac{(2l-1)\pi}{2}\right) \cos\left(\frac{j}{k} \frac{2t_r - \pi}{2}\right) = \\ &= 4 \sum_{r=1}^n \frac{\sin(it_r)\omega_r}{k} \cos\left(\frac{j}{k} \frac{2t_r - \pi}{2}\right) \sum_{l=1}^k (-1)^{i(l-1)} \sin\left(\frac{j}{k} \frac{(2l-1)\pi}{2}\right). \end{aligned}$$

Отметим, что равенство $(*)$ выполнено только тогда, когда сумма $ki + j$ четная. В противном случае, если для некоторых целых чисел k, i, j сумма $ki + j$ нечетная, то функция $\sin(kit) \sin(jt)$ также является нечетной относительно точки $\frac{\pi}{2}$ на интервале $[0, \pi]$ и рассматриваемое выражение равно нулю в силу свойства симметричности плана $\eta^{(k)}$. Отметим также, что из четности суммы $ki + j$ следует, что если j нечетное, то и i нечетное. Чтобы доказать теорему, нам осталось показать,

что равна нулю следующая сумма:

$$\sum_{l=1}^k (-1)^{i(l-1)} \sin\left(\frac{j}{k} \frac{(2l-1)\pi}{2}\right) = \begin{cases} \frac{\sin(\frac{j\pi}{2k}) - \sin(\frac{j\pi}{2k})}{\cos(\frac{j\pi}{k}) - 1} = 0, \\ j - \text{четное}, i - \text{четное}; \\ \frac{1}{2} \cdot \frac{\sin(\frac{j\pi}{2k}) - \sin(\frac{j\pi}{2k})}{\cos(\frac{j\pi}{k}) + 1} = 0, \\ j - \text{четное}, i - \text{нечетное}; \\ \frac{(-1)^k}{2} \cdot \frac{\sin(\frac{(j+2)\pi}{2k}) - \sin(\frac{(j+2)\pi}{2k})}{\cos(\frac{\pi(j+1)}{k}) + \cos(\frac{\pi}{k})} = 0, \\ j - \text{нечетное}. \end{cases}$$

Теорема доказана. \square

Теперь перейдем непосредственно к задаче построения L -оптимальных планов. В данной работе в качестве матрицы L мы будем рассматривать диагональные матрицы с различными сочетаниями нулей и единиц на главной диагонали. Учитывая доказанные теоремы для таких матриц, задачу построения L -оптимального плана в классе абсолютно симметричных планов можно свести к задаче меньшей размерности, исключив из рассмотрения компоненты информационной матрицы, соответствующие нулевым блокам матрицы L :

$$\text{tr}LM(\xi)^+ = \text{tr} \begin{pmatrix} L_{11}M_{\cos}^{(odd)}(\xi)^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & L_{22}M_{\cos}^{(even)}(\xi)^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_{33}M_{\sin}^{(odd)}(\xi)^+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_{44}M_{\sin}^{(even)}(\xi)^+ \end{pmatrix}.$$

Кроме того, при увеличении размерности модели в случае, если порядок модели является произведением целых чисел p и k ($m = kp$), можно воспользоваться теоремой 3.2 и уменьшить размерность задачи построения оптимального плана при нахождении оценок коэффициентов модели, индекс которых кратен k или p :

$$\begin{aligned} \text{tr}LM(\xi)^+ &= \text{tr} \begin{pmatrix} \bar{L}_{11}\tilde{M}^{(p)}(\eta^{(k)})^+ & 0 \\ 0 & \bar{L}_{22}\tilde{M}^{((k-1)p)}(\eta^{(k)}) \end{pmatrix}, \\ \text{tr}LM(\xi)^+ &= \text{tr} \begin{pmatrix} \tilde{L}_{11}\tilde{M}^{(k)}(\eta^{(p)})^+ & 0 \\ 0 & \tilde{L}_{22}\tilde{M}^{((p-1)k)}(\eta^{(p)}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Следующий результат представляет вид L -оптимальных планов для модели (1) в случае, когда $L = I$ (где I — единичная матрица размерности $2m \times 2m$). Оптимальные планы для такой матрицы L принято также называть A -оптимальными.

Теорема 3.3. *Рассмотрим абсолютно симметричный план η^* вида*

$$\eta^* = \begin{pmatrix} -\frac{(n-1)\pi}{n} & -\frac{(n-3)\pi}{n} & \cdots & -\frac{\pi}{n} & \frac{\pi}{n} & \cdots & \frac{(n-3)\pi}{n} & \frac{(n-1)\pi}{n} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} & \frac{1}{n} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Следующие утверждения верны:

1) для любого целого $n \geq 2m + 1$ план η^* является A -оптимальным планом для модели (1) порядка m ;

2) для любого целого $n \geq 2m + 1$ план η^* является D -оптимальным планом (т. е. планом, максимизирующим определитель информационной матрицы на множестве непрерывных планов) для модели (1) порядка m .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Доказательство данной теоремы повторяет стандартные рассуждения для классической регрессионной модели (см., например, [19, теорема 3.2, с. 123]) и основано на том факте, что для такого плана информационная матрица пропорциональна единичной: $M(\eta^*) = \frac{1}{2}I$, и, следовательно, оптимальность такого плана элементарным образом проверяется по теореме эквивалентности (теорема 2.1):

$$\begin{aligned} \varphi(t, \eta^*) &= f^T(t)M(\eta^*)^{-1}IM(\eta^*)^{-1}f(t) = \\ &= 4(\cos^2(t) + \sin^2(t) + \dots + \cos^2(mt) + \sin^2(mt)) = 4m = 2\text{tr}I = \text{tr}IM(\eta^*)^{-1}. \end{aligned}$$

В соответствии с теоремой эквивалентности Кифера – Вольфовица (см., например, [16]), D -оптимальность плана обеспечивается выполнением условия $\max_t \tilde{\varphi}(t, \eta^*) = 2m$, где $\tilde{\varphi}(t, \eta^*) = f^T(t)M(\eta^*)^{-1}f(t)$. Причем равенство достигается в точках плана. Для плана η^* имеем

$$\tilde{\varphi}(t, \eta^*) = 2(\cos^2(t) + \sin^2(t) + \dots + \cos^2(mt) + \sin^2(mt)) = 2m.$$

Теорема доказана. □

Гипотеза 3.1. Пусть L – диагональная матрица с комбинацией из нулей и единиц на главной диагонали. Тогда L -оптимальные планы для модели (1) порядка m принадлежат классу абсолютно симметричных планов.

Данная гипотеза может быть проверена непосредственно (путем численного построения оптимального плана) для моделей небольших порядков: $m = 3, 4, 5$. В общем случае этот вопрос остается открытым. Некоторые численные результаты для моделей $m = 3, 4$ могут быть найдены в работе [15].

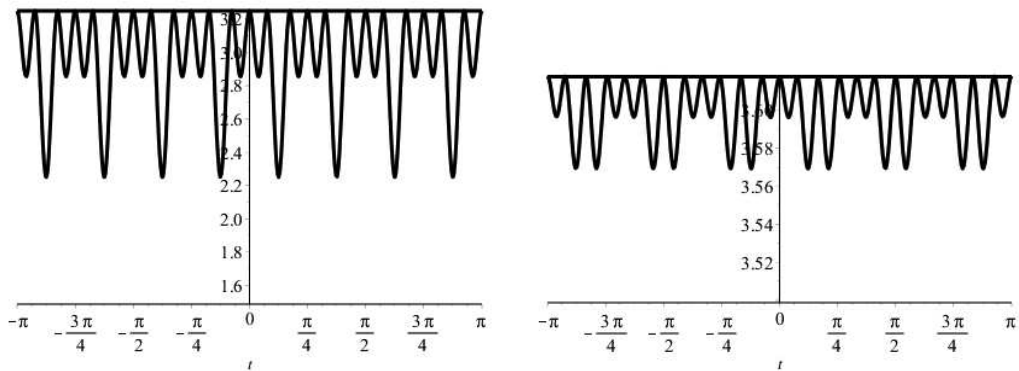
Рассмотрим пример того, как можно использовать полученные результаты для задач построения L -оптимальных планов.

Пример 3.1. Пусть у нас имеется модель (1) порядка $m = 12$. Допустим, что мы хотим построить два оптимальных плана: один – для оценки коэффициентов при $\cos(3t)$ и $\cos(6t)$ и второй – для оценки коэффициентов при $\cos(4t)$ и $\cos(8t)$. В силу гипотезы 3.1 и теоремы 3.2 нам достаточно построить планы для оценивания коэффициентов $\cos(t)$ и $\cos(2t)$ для $m = 3, 4$. В силу теоремы 3.1 можно уменьшить размерность этой задачи, перейдя к модели

$$y = \theta^T f(x) + \epsilon, \quad t \in [-\pi, \pi], \quad f(x) = (\cos(t), \cos(2t), \dots, \cos(mt))^T.$$

Для $m = 3$ имеем

$$\eta_3^* = \begin{pmatrix} -\pi & -\pi + \frac{\pi - \arccos(\frac{1}{3})}{2} & -\frac{\pi - \arccos(\frac{1}{3})}{2} & 0 & \frac{\pi - \arccos(\frac{1}{3})}{2} & \pi - \frac{\pi - \arccos(\frac{1}{3})}{2} & \pi \\ \frac{5}{32} & \frac{3}{32} & \frac{3}{32} & \frac{10}{32} & \frac{3}{32} & \frac{3}{32} & \frac{5}{32} \end{pmatrix}.$$



Поведение экстремальных многочленов $\varphi(t, \eta_3^{(4)})$ (слева) и $\varphi(t, \eta_4^{(3)})$ (справа) из примера 3.1.

Экстремальный многочлен этого плана определяется формулой

$$\varphi(t, \eta_3^*) = \frac{7}{32} \cos(2t) + \frac{47}{16} - \frac{3}{16} \cos(4t) + \frac{9}{32} \cos(6t).$$

Прямое исследование этой функции показывает, что $\max_t \varphi(t, \eta_3^*) = \varphi(t_i, \eta_3^*) = \frac{13}{4} = \text{tr}LM_{\cos}(\eta_3^*)^{-1}$.

Для $m = 4$ имеем

$$\eta_4^* = \begin{pmatrix} -\pi & -\pi + 0.713 & -\frac{\pi}{2} & -0.713 & 0 & 0.713 & \frac{\pi}{2} & \pi - 0.713 & \pi \\ 0.093 & 0.104 & 0.106 & 0.104 & 0.186 & 0.104 & 0.106 & 0.104 & 0.093 \end{pmatrix}.$$

Экстремальный многочлен этого плана определяется как

$$\begin{aligned} \varphi(t, \eta_4^*) \approx & 3.6 + 0.0204 \cos(t) - 0.061 \cos(2t) + 0.0045 \cos(3t) - 0.02 \cos(4t) - \\ & - 0.00556 \cos(5t) - 0.011 \cos(6t) - 0.000265 \cos(7t) + 0.0165 \cos(8t). \end{aligned}$$

Прямое исследование этой функции показывает, что $\max_t \varphi(t, \eta_4^*) = \varphi(t_i, \eta_4^*) = \text{tr}LM_{\cos}(\eta_4^*)^{-1} \approx 3.6178$.

Искомые оптимальные планы для модели порядка $m = 12$ определяются непосредственно по теореме 3.2. Для оценки коэффициентов при $\cos(4t)$ и $\cos(8t)$ имеем

$$\begin{aligned} \eta_3^{(4)} = & \\ = & \begin{pmatrix} -\pi + \frac{t_1}{4} & -\pi + \frac{t_2}{4} & -\frac{3\pi}{4} - \frac{t_2}{4} & -\frac{3\pi}{4} - \frac{t_1}{4} & \dots & \frac{3\pi}{4} + \frac{t_1}{4} & \frac{3\pi}{4} + \frac{t_2}{4} & \pi - \frac{t_2}{4} & \pi - \frac{t_1}{4} \\ \frac{\omega_1}{4} & \frac{\omega_2}{4} & \frac{\omega_2}{4} & \frac{\omega_1}{4} & \dots & \frac{\omega_1}{4} & \frac{\omega_2}{4} & \frac{\omega_2}{4} & \frac{\omega_1}{4} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где $t_1 = 0, t_2 = \frac{\pi - \arccos(\frac{1}{3})}{2}, \omega_1 = \frac{5}{32}, \omega_2 = \frac{3}{32}$ — точки и веса плана η_3^* . Аналогичным образом получаем точки и веса оптимального плана $\eta_4^{(3)}$ для оценки коэффициентов при $\cos(3t)$ и $\cos(6t)$. Экстремальные многочлены этих планов ($\varphi(t, \eta_3^{(4)}), \varphi(t, \eta_4^{(3)})$) и значения $\text{tr}LM(\eta_3^{(4)})^{-1}$ и $\text{tr}LM(\eta_4^{(3)})^{-1}$ отображены на рисунке.

Литература

1. Ермаков С. М., Жиглявский А. А. *Математическая теория оптимального эксперимента*. Москва, Наука (1987).

2. Atkinson A., Bogacka B., Bogacki M. D- and T-optimum designs for the kinetics of a reversible chemical reaction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* **43**, 185–198 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(98\)00046-X](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(98)00046-X)
3. Asprey S., Macchietto S. Statistical tools for optimal dynamic model building. *Computers and Chemical Engineering* **24**, 1261–1267 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(00\)00328-8](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(00)00328-8)
4. Ucinski D., Bogacka B. T-optimum designs for discrimination between two multiresponse dynamic models. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B* **67**, 3–18 (2005). <https://doi.org/10.1111/j.1467-9868.2005.00485.x>
5. Atkinson A. C., Fedorov V. V. The designs of experiments for discriminating between two rival models. *Biometrika* **62**, 57–70 (1975). <https://doi.org/10.2307/2334487>
6. Atkinson A. C., Fedorov V. V. Optimal design: Experiments for discriminating between several models. *Biometrika* **62**, 289–303 (1975). <https://doi.org/10.2307/2335364>
7. Wiens D. P. Robust discrimination designs. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B* **71**, 805–829 (2009).
8. Tommasi C., López-Fidalgo J. Bayesian optimum designs for discriminating between models with any distribution. *Computational Statistics & Data Analysis* **54** (1), 143–150 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.csda.2009.07.022>
9. Waterhouse T., Woods D., Eccleston J., Lewis S. Design selection criteria for discrimination/estimation for nested models and a binomial response. *Journal of Statistical Planning and Inference* **138**, 132–144 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.jspi.2007.05.017>
10. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. T-optimal designs for discrimination between two polynomial models. *Annals of Statistics* **40** (1), 188–205 (2012).
11. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. T-optimal discriminating designs for Fourier regression models. *Computational Statistics and Data Analysis* **113**, 196–206 (2017). <https://doi.org/10.1214/11-AOS956>
12. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Robust T-optimal discriminating designs. *Annals of Statistics* **41** (4), 1693–1715 (2013). <https://doi.org/10.1214/13-AOS1117>
13. Gaffke N. Further characterizations of design optimality and admissibility for partial parameter estimation on linear regression. *Ann. Statist.* **15** (3), 942–957 (1987).
14. Kiefer J. C. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Ann. Statist.* **2**, 849–879 (1974). <https://doi.org/10.1214/aos/1176342810>
15. Pukelsheim F. *Optimal Design of Experiments*. Philadelphia, SIAM (2006).
16. Müller C., Pázman A. Applications of necessary and sufficient conditions for maximin efficient designs. *Metrika* **48**, 1–19 (1998). <https://doi.org/10.1007/S001840050001>
17. Dette H., Neugebauer H. Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **52**, 17–31 (1996). [https://doi.org/10.1016/0378-3758\(95\)00104-2](https://doi.org/10.1016/0378-3758(95)00104-2)
18. Dette H., Neugebauer H. Bayesian D-optimal designs for exponential regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **60**, 331–349 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0378-3758\(96\)00131-0](https://doi.org/10.1016/S0378-3758(96)00131-0)
19. Dette H. Designing experiments with respect to "standardized" optimality criteria. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B* **59**, 97–110 (1997). <https://doi.org/10.1111/1467-9868.00056>
20. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Optimal designs for trigonometric regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **141** (3), 1343–1353 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jspi.2010.10.010>
21. Шпилев П. В. Теорема эквивалентности для вырожденных L-оптимальных планов. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **2**, вып. 1, 68–74 (2015).

Статья поступила в редакцию 17 июля 2021 г.;
доработана 31 августа 2021 г.;
рекомендована к печати 2 сентября 2021 г.

Контактная информация:

Мелас Вячеслав Борисович — д-р физ.-мат. наук, проф.; vbmelas@yandex.ru
Шпилев Петр Валерьевич — канд. физ.-мат. наук, доц.; p.shpilev@spbu.ru

L-optimal designs for a trigonometric Fourier regression model with no intercept*

V. B. Melas, P. V. Shpilev

St Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St Petersburg, 199034, Russian Federation

For citation: Melas V. B., Shpilev P. V. *L*-optimal designs for a trigonometric Fourier regression model with no intercept. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 1, pp. 64–75. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.107> (In Russian)

This paper is devoted to the problem of constructing *L*-optimal designs for a trigonometric Fourier regression model with no intercept. The paper considers diagonal matrices *L* with a combination of zeros and ones on the main diagonal. It is shown that in the case when $L = I$ (i. e., when the unit matrix is chosen as the matrix *L*), the *L*-optimal design coincides with the *D*-optimal one. In the more general case (when some diagonal elements are equal to zero), it is shown that the dimension of the problem can be reduced if the optimal design is symmetric. The obtained results are illustrated by the example of the problem of constructing two *L*-optimal designs for the trigonometric model of order 12, which is reduced to the problem of constructing designs for models of order 3 and 4 correspondingly.

Keywords: *L*-optimal designs, *c*-optimal designs, optimal designs for estimating the individual coefficients, trigonometric regression models with no intercept.

References

1. Ermakov S. M., Zhiglyavskii A. A. *Mathematical theory of optimal experiment*. Moscow, Nauka Publ. (1987). (In Russian)
2. Atkinson A., Bogacka B., Bogacki M. D- and T-optimum designs for the kinetics of a reversible chemical reaction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* **43**, 185–198 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(98\)00046-X](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(98)00046-X)
3. Asprey S., Macchietto S. Statistical tools for optimal dynamic model building. *Computers and Chemical Engineering* **24**, 1261–1267 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(00\)00328-8](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(00)00328-8)
4. Ucinski D., Bogacka B. T-optimum designs for discrimination between two multiresponse dynamic models. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B* **67**, 3–18 (2005). <https://doi.org/10.1111/j.1467-9868.2005.00485.x>
5. Atkinson A. C., Fedorov V. V. The designs of experiments for discriminating between two rival models. *Biometrika* **62**, 57–70 (1975). <https://doi.org/10.2307/2334487>
6. Atkinson A. C., Fedorov V. V. Optimal design: Experiments for discriminating between several models. *Biometrika* **62**, 289–303 (1975). <https://doi.org/10.2307/2335364>
7. Wiens D. P. Robust discrimination designs. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B* **71**, 805–829 (2009).
8. Tommasi C., López-Fidalgo J. Bayesian optimum designs for discriminating between models with any distribution. *Computational Statistics & Data Analysis* **54** (1), 143–150 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.csda.2009.07.022>
9. Waterhouse T., Woods D., Eccleston J., Lewis S. Design selection criteria for discrimination/estimation for nested models and a binomial response. *Journal of Statistical Planning and Inference* **138**, 132–144 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.jspi.2007.05.017>
10. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. T-optimal designs for discrimination between two polynomial models. *Annals of Statistics* **40** (1), 188–205 (2012).
11. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. T-optimal discriminating designs for Fourier regression models. *Computational Statistics and Data Analysis* **113**, 196–206 (2017). <https://doi.org/10.1214/11-AOS956>
12. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Robust T-optimal discriminating designs. *Annals of Statistics* **41** (4), 1693–1715 (2013). <https://doi.org/10.1214/13-AOS1117>
13. Gaffke N. Further characterizations of design optimality and admissibility for partial parameter estimation on linear regression. *Annals of Statistics* **15** (3), 942–957 (1987).

*This work is supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant No. 20-01-00096-a).

14. Kiefer J. C. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Ann. Statist.* **2**, 849–879 (1974). <https://doi.org/10.1214/aos/1176342810>
15. Pukelsheim F. *Optimal Design of Experiments*. Philadelphia, SIAM (2006).
16. Müller C., Pázman A. Applications of necessary and sufficient conditions for maximin efficient designs. *Metrika* **48**, 1–19 (1998). <https://doi.org/10.1007/S001840050001>
17. Dette H., Neugebauer H. Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **52**, 17–31 (1996). [https://doi.org/10.1016/0378-3758\(95\)00104-2](https://doi.org/10.1016/0378-3758(95)00104-2)
18. Dette H., Neugebauer H. Bayesian D-optimal designs for exponential regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **60**, 331–349 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0378-3758\(96\)00131-0](https://doi.org/10.1016/S0378-3758(96)00131-0)
19. Dette H. Designing experiments with respect to "standardized" optimality criteria. *Journal of the Royal Statistical Society* **59**, 97–110 (1997). <https://doi.org/10.1111/1467-9868.00056>
20. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Optimal designs for trigonometric regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **141** (3), 1343–1353 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jspi.2010.10.010>
21. Shpilev P. V. Equivalence theorem for singular L -optimal designs. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **2**, iss. 1, 68–74 (2015). (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **48** (1), 29–34 (2015). <https://doi.org/10.3103/S1063454115010094>].

Received: July 17, 2021
 Revised: August 31, 2021
 Accepted: September 2, 2021

Authors' information:

Vyacheslav B. Melas — vbmelas@yandex.ru
Petr V. Shpilev — p.shpilev@spbu.ru