

Исследование свойства избыточности L -оптимального плана для модели Лэйбла*

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. Исследование свойства избыточности L -оптимального плана для модели Лэйбла // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 3. С. 495–505.

<https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.310>

Для двумерной нелинейной по параметрам дробно-рациональной модели Лэйбла, используемой в аналитической химии, исследована задача построения L -оптимальных планов. Показано, что для этой модели существуют два типа оптимальных планов: насыщенные (т. е. планы с числом точек носителя, равным числу параметров модели) и избыточные (т. е. планы с числом точек носителя, большим, чем количество параметров модели), и что при некоторой гомотетии пространства планирования локально L -оптимальные планы могут изменить тип с насыщенного на избыточный и наоборот. Предложено аналитическое решение задачи нахождения зависимости между числом точек носителя оптимального плана и значениями параметров модели, основанное на применении функционального подхода. Исследована L -эффективность D -оптимальных планов.

Ключевые слова: L -оптимальные планы, L -эффективность, планы, оптимальные для оценивания индивидуального коэффициента, дробно-рациональная модель, модель Лэйбла.

1. Введение. Задача нахождения оптимального плана с минимальным числом точек носителя имеет большое практическое значение, так как использование таких планов позволяет уменьшить расходы на проведение экспериментов. Многие авторы занимались изучением этой задачи (см., например, [1–3]). В пионерской работе [4] показано, что D -оптимальные планы всегда являются насыщенными для полиномиальных регрессионных моделей, т. е. число точек (n) носителя этих планов совпадает с числом (p) параметров модели. С другой стороны, для нелинейных по параметрам моделей нередки случаи, в которых появляются оптимальные планы с числом опорных точек n , больших p . В нашей недавней работе [5] мы предложили называть такие случаи феноменом избыточности, а соответствующие планы — избыточными. Серия работ [6–9] была посвящена вопросу обобщения результата de la Garza на случай нелинейных по параметрам моделей. Большинство авторов ограничивались рассмотрением моделей с одной независимой переменной, в то время как многие модели, используемые на практике, являются многомерными. Такие модели намного сложнее для исследования, и методы, которые работают для одномерных моделей, как правило, не могут быть обобщены на многомерные случаи (см., напри-

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

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

мер, [9]). Как показывают наши последние результаты [5, 10, 11], феномен избыточности имеет место и при локально оптимальном планировании для многомерных моделей. Аналитическое решение проблемы нахождения зависимости между количеством опорных точек локально оптимального плана и длинами интервалов планирования является очень полезным инструментом, который позволяет исследователю выбрать наиболее подходящее пространство планирования для снижения затрат на эксперимент. В [5, 10, 11] мы изучали D -оптимальные планы для некоторых моделей, используемых в аналитической химии и в микроэкономике, но, насколько нам известно, в литературе нет аналитических решений этой проблемы для многомерных моделей. Для L -критерия оптимальности (широко используемого на практике) задача построения локально оптимального плана оказывается существенно сложнее, чем для D -критерия, поскольку в этом случае точки носителя оптимального плана зависят от трех параметров модели (по сравнению с двумя для критерия D). Настоящая работа посвящена исследованию влияния гомотетии интервала планирования на точки L -оптимального плана. Во втором разделе даны базовые понятия и определения. Третий раздел посвящен обзору основных результатов. В четвертом разделе представлен e_1 -оптимальный план в явном виде и исследована L -эффективность D -оптимального плана.

2. Постановка задачи построения L -оптимального плана. Рассмотрим классическую регрессионную модель:

$$y = \eta(x, \theta) + \epsilon, \quad (1)$$

где переменная x принадлежит компактному пространству $\mathcal{X} \subset R^k$, а ошибки наблюдений ϵ предполагаются независимыми и имеющими одинаковые дисперсии. Вектор $\theta \in \Theta \subset R^p$ есть вектор неизвестных параметров, а $\eta: R^k \rightarrow R^1$ — заданная регрессионная функция (см. [12]).

Под (непрерывным) планом эксперимента мы будем понимать вероятностную меру ξ с конечным носителем. Мера ξ определяется таблицей

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

Носитель плана ξ состоит из точек, в которых проводятся наблюдения, а веса ω_i определяют относительные доли общего числа наблюдений, проводимых в соответствующих точках [2], и удовлетворяют условиям $\omega_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \omega_i = 1$.

Информационной матрицей Фишера плана ξ (см., например, [13]) называется матрица

$$M(\xi, \theta) = \int_{\mathcal{X}} f(x, \theta) f^T(x, \theta) d\xi(x), \quad (2)$$

где $f(x, \theta) = \frac{\partial}{\partial \theta} \eta(x, \theta) \in R^p$.

Вырожденным планом называется план, информационная матрица которого вырожденная.

Данная работа посвящена исследованию, в частности, 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 1. Для заданной матрицы

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

с векторами $l_i \in R^{2m}$ класс Ξ_L определим как множество всех непрерывных планов эксперимента, для которых линейная комбинация параметров $l_i^T \beta, i = 0, \dots, k$, оцениваема, то есть вектор l_i принадлежит пространству столбцов матрицы $M(\xi) : l_i \in \mathcal{R}(M(\xi)), i = 0, \dots, k$ (см., например, [14, формула (4а.2)]).

Определение 2. Будем говорить, что непрерывный план η принадлежит классу Ξ_L^* , если $\eta \in \Xi_L$ и для любого непрерывного плана ξ существует предел

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} (f^T(t)M(\xi_\alpha)^+ LM(\xi_\alpha)^+ f(t)) = f^T(t)M(\eta)^+ LM(\eta)^+ f(t), \quad (3)$$

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

Определение 3. План ξ^* будем называть L -оптимальным, если $\xi^* \in \Xi_L$,

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

где L — фиксированная неотрицательно определенная матрица и $M(\xi)^+$ — обобщенно-обратная в смысле Мура — Пенроуза матрица для $M(\xi)$ (см., например, [14]).

Удобным инструментом проверки вырожденного плана на L -оптимальность является следующая теорема (см. [15, 16]).

Теорема 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

$$l_i^T M(\xi)^- M(\xi) = l_i^T, \quad i = 0, \dots, 2m,$$

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

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

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

(с) при этом 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, [17]) 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 [16].

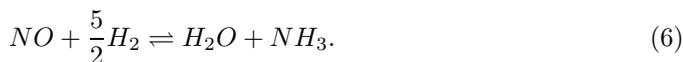
В качестве регрессионной модели в настоящей работе мы будем рассматривать модель

$$\eta(x, \theta) = \frac{\theta_0 \theta_1 x_1}{1 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2}, \quad \mathcal{X} = [0, b_1] \times [0, b_2], \quad (4)$$

предложенную Лэйблом в его диссертации (1959) [18] для описания скорости протекания при 550 °F каталитической реакции



где R — четвертичный или первичный спирт с длинной цепочкой, P_1 и P — олефин и вода соответственно. В работе Эйена и Петерса (1962) [19] показано, что наряду с (5) модель (4) хорошо описывает и другие реакции, в частности каталитическую реакцию восстановления азота



3. A -оптимальные планы для модели Лэйбла. Данный раздел посвящен результатам, полученным в настоящей работе для случая $L = I$, т. е. когда в качестве матрицы L рассматривается единичная матрица. В этом случае L -оптимальный план принято называть A -оптимальным. В нашей недавней работе [11] для модели Лэйбла была исследована зависимость структуры точек D -оптимального плана от гомотетии пространства планирования. Как уже отмечалось во введении, для L -критерия оптимальности (A -критерия) задача построения локально оптимального плана оказывается существенно сложнее, чем для D -критерия, поскольку в этом случае точки носителя оптимального плана зависят от трех параметров модели (по сравнению с двумя для критерия D). Вместе с тем общая структура A -оптимального плана схожа со структурой D -оптимального. Так, например, в нашей работе [11] было продемонстрировано, что (в зависимости от значений параметров модели) существуют три различных типа насыщенных D -оптимальных планов и избыточный план (4-точечный). Как показывают численные результаты (см. рис. 1 и 2), такая же картина имеет место и для A -оптимального плана. В общем случае A -оптимальный план имеет следующий вид:

$$\xi = \left(\begin{array}{cccc} (t_1^{(1)}, 0) & (b_1, 0) & (t_2^{(1)}, t_1^{(2)}) & (b_1, b_2) \\ \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 & \omega_4 \end{array} \right), \quad t_1^{(1)}, t_2^{(1)} \in [0, b_1], \quad t_1^{(2)} \in [0, b_2].$$

Функции $t_1^{(1)}$, $t_2^{(1)}$, $t_1^{(2)}$, ω_1 , ω_2 и ω_3 зависят от значений неизвестных параметров θ_0 , θ_1 и θ_2 . В силу теоремы эквивалентности и определения оптимального плана граница между областями значений параметров θ_1 и θ_2 (при фиксированном θ_0), определяющими тип оптимального плана, задается двумя неявными функциями:

$$F_1(\theta_1, \theta_2) = (\text{tr}M^{-1}(\xi_1)'_{\omega_1})^2 + (\text{tr}M^{-1}(\xi_1)'_{\omega_2})^2 + (\text{tr}M^{-1}(\xi_1)'_{t_1})^2 + (\text{tr}M^{-1}(\xi_1)'_{t_2})^2 + (\varphi((t_2, 1), \xi_1) - \text{tr}M^{-1}(\xi_1^*))^2 = 0 \quad (7)$$

**Коэффициенты разложения функций $F_{Left}(\theta_1)$ и $F_{Right}(\theta_1)$
в ряд Тейлора в точках $\theta_1^{(1)} = 2.5$ и $\theta_1^{(2)} = 6$**

$\bar{F}_{Left}(\theta_1)$	a_0	a_1	a_2	a_3
$\theta_0 = 1$	0.371	0.0192	0.242	-0.0243
$\theta_0 = 10$	0.340	0.343	0.0494	0.000803
$\theta_0 = 100$	0.336	0.381	0.0790	-0.00477
$F_{Right}(\theta_1)$	a_0	a_1	a_2	a_3
$\theta_0 = 1$	5.95	-1.09	0.132	-0.00633
$\theta_0 = 10$	7.45	-1.13	0.05	0.00157
$\theta_0 = 100$	4.88	0.224	-0.134	0.00877

и

$$F_2(\theta_1, \theta_2) = (\text{tr}M^{-1}(\xi_2)'_{\bar{\omega}_1})^2 + (\text{tr}M^{-1}(\xi_2)'_{\bar{\omega}_2})^2 + (\text{tr}M^{-1}(\xi_2)'_{\bar{t}_1})^2 + (\text{tr}M^{-1}(\xi_2)'_{\bar{t}_2})^2 + (\varphi((1, 1), \xi_2) - \text{tr}M^{-1}(\xi_2))^2 = 0, \quad (8)$$

где $\varphi(x, y, \xi)$ — экстремальный многочлен из теоремы 1, а ξ_1^* и ξ_2^* — планы следующего вида:

$$\xi_1 = \begin{pmatrix} (t_1, 0) & (b_1, 0) & (t_2, 1) & (1, 1) \\ \omega_1 & \omega_2 & 0 & \omega_3 \end{pmatrix}, \quad \xi_2 = \begin{pmatrix} (\bar{t}_1, 0) & (b_1, 0) & (\bar{t}_2, 1) & (1, 1) \\ \bar{\omega}_1 & \bar{\omega}_2 & \bar{\omega}_3 & 0 \end{pmatrix}$$

соответственно. Нас интересуют функции $\theta_2^{(1)} = F_{Left}(\theta_1)$ и $\theta_2^{(2)} = F_{Right}(\theta_1)$, доставляющие равенства в уравнения (7) и (8). Анализ данных уравнений показывает, что в явном виде эти функции найти невозможно, вместе с тем можно построить разложение этих функций в ряд Тейлора с помощью функционального подхода [20]. В таблице представлены первые несколько коэффициентов построенных разложений ($\bar{F}_{Left}(\theta_1)$ и $\bar{F}_{Right}(\theta_1)$) в точках $\theta_1^{(1)} = 2.5$ и $\theta_1^{(2)} = 6$. Поведение этих функций (в зависимости от значения параметра θ_0) можно видеть на рис. 3.

Сформулируем теорему, отражающую полученный результат.

Теорема 2. Пусть \mathcal{X}' — гомотетия $\mathcal{X} \rightarrow \gamma\mathcal{X}$ с центром $(0, 0)$ и коэффициентом $\gamma > 0$. Будем считать, что $b_1 = b_2 = b$. Обозначим $\theta_i b$ за λ_i , $i = 0, 1, 2$. В силу определения информационной матрицы, не теряя общности, можем считать, что измерения проводятся в области $[0, 1] \times [0, 1]$. Обозначим: $\tilde{b} = \gamma b$, $\tilde{\lambda}_i = \gamma \lambda_i = \theta_i \tilde{b}$, $i = 0, 1, 2$. Тогда тип оптимального плана (при заданном значении $\tilde{\lambda}_0$) определяется тем, какой области принадлежит точка $(\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2)$.

Так, если $(\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2) \in \Lambda_4$:

$$\Lambda_4 = \{(\lambda_1, \lambda_2) : (0 < \lambda_1 \leq \lambda^*, \lambda_2 \leq F_{Left}(\lambda_1))\} \cup \{(\lambda_1, \lambda_2) : (\lambda^* \leq \lambda_1, \lambda_2 \leq F_{Right}(\lambda_1))\},$$

оптимальный план является избыточным (4-точечным), в противном случае — насыщенным (3-точечным). Критическое значение λ^* также зависит от $\tilde{\lambda}_0$ и может быть найдено как корень уравнения $F_{Left}(\tilde{\lambda}_1) = F_{Right}(\tilde{\lambda}_1)$.

Замечание. Вид соответствующих областей для различных значений параметра $\lambda_0 = 1, 10$ представлен на рис. 3. Так как функции $F_{Left}(\lambda_1)$, $F_{Right}(\lambda_1)$ невозможно найти в явном виде, вместо них предлагается использовать их разложения в ряд Тейлора: $\bar{F}_{Left}(\lambda_1)$ и $\bar{F}_{Right}(\lambda_1)$ в заданных точках $\lambda_1^{(1)}$ и $\lambda_1^{(2)}$.

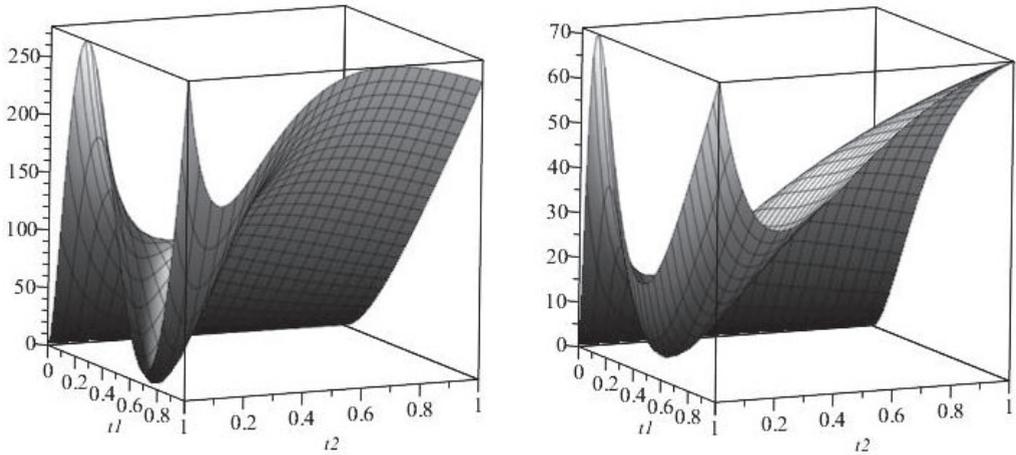


Рис. 1. Поведение функции $\varphi((t_1, t_2), \xi^*)$ из теоремы 1 для различных типов (в зависимости от значений параметров θ_1 и θ_2) оптимальных планов $\theta_1 = 1, \theta_2 = 3$ (слева) и $\theta_1 = 5, \theta_2 = 5$ (справа). В обоих случаях $b_1 = 1, b_2 = 1$ и $\theta_0 = 10$.

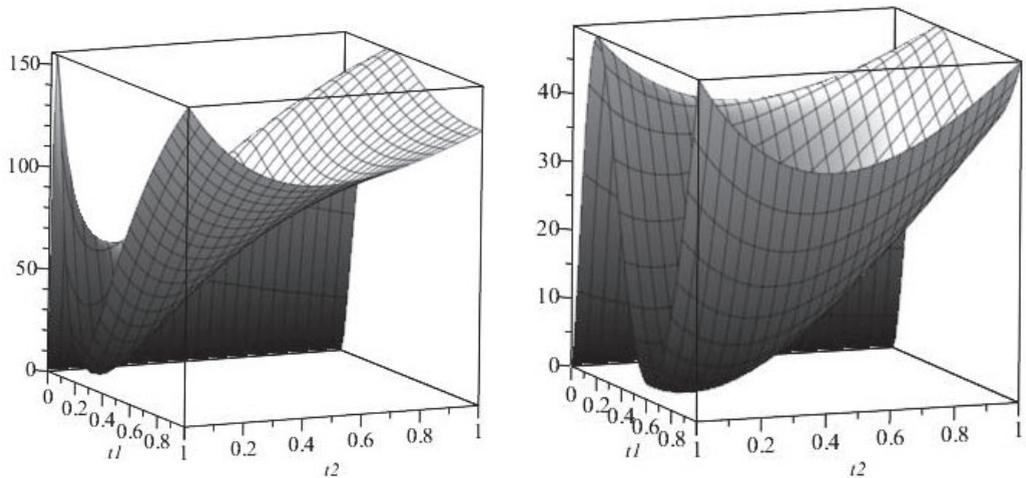


Рис. 2. Поведение функции $\varphi((t_1, t_2), \xi^*)$ из теоремы 1 для различных типов (в зависимости от значений параметров θ_1 и θ_2) оптимальных планов $\theta_1 = 15, \theta_2 = 4$ (слева) и $\theta_1 = 2, \theta_2 = 0.5$ (справа). В обоих случаях $b_1 = 1, b_2 = 1$ и $\theta_0 = 10$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 2. Данная теорема является следствием теоремы о неявной функции (в силу гладкости соответствующих функций) и теоремы эквивалентности для L -оптимального плана. Подробное доказательство не приводится из соображений краткости. \square

Давайте проиллюстрируем, как работает теорема 2 на примере.

Пример. Пусть $\theta_0 = 1, \theta_1 = 0.1, \theta_2 = 0.2, \underline{b}_1 = b_2 = b = 1$. Предположим, что $\gamma = 1$. Тогда $\lambda_0 = \gamma b \theta_0 = 1, \lambda_1 = \gamma b \theta_1 = 0.1, \lambda_2 = \gamma b \theta_2 = 0.2$ (поведение функций $\bar{F}_{Left}(\lambda_1)$ и $\bar{F}_{Right}(\lambda_1)$ в этом случае представлено на рис. 3 слева). Согласно теореме 2, точка (λ_1, λ_2) принадлежит области Λ_4 и, следовательно, оптимальным является избыточный план ξ_{VI}^* . Ниже записаны точки и веса данного плана, най-

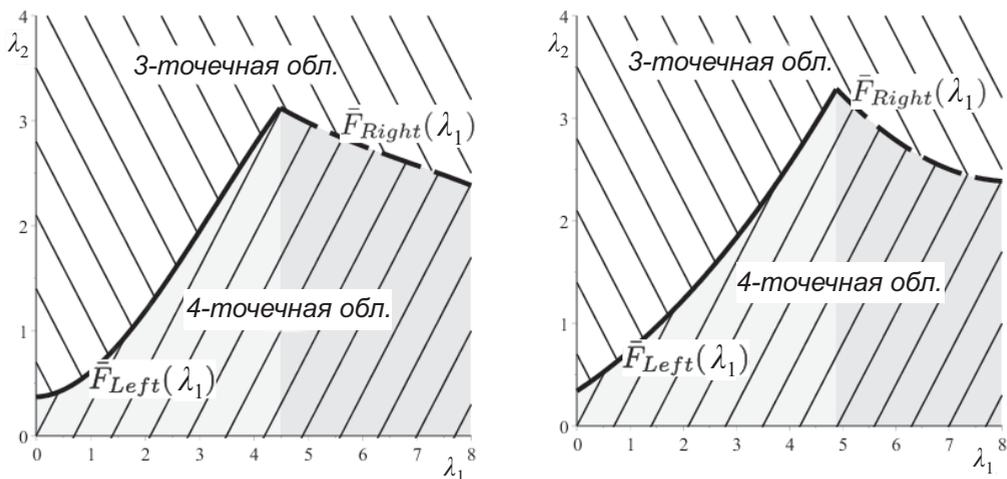


Рис. 3. Поведение функций $\bar{F}_{Left}(\lambda_1)$ и $\bar{F}_{Right}(\lambda_1)$ в зависимости от значений $\lambda_0(\theta_0)$. На левом графике для $\lambda_0 = 1$ ($\theta_0 = 1$), на правом — для $\lambda_0 = 10$ ($\theta_0 = 10$).

денные численно:

$$\xi_{VI}^* = \begin{pmatrix} (1, 0) & (0.3915, 0) & (1, 1) & (0.5074, 1) \\ 0.293 & 0.669 & 0.022 & 0.016 \end{pmatrix}.$$

Теперь предположим, что $\gamma = 10$. Тогда $\tilde{\lambda}_0 = \gamma b \theta_0 = 10$, $\tilde{\lambda}_1 = \gamma b_1 \theta_1 = 1$, $\tilde{\lambda}_2 = \gamma b_2 \theta_2 = 2$ (поведение функций $\bar{F}_{Left}(\lambda_1)$ и $\bar{F}_{Right}(\lambda_1)$ в этом случае представлено на рис. 3 справа). По теореме 2 точка $(\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2)$ не принадлежит области Λ_4 и, следовательно, оптимальным является насыщенный план ξ_{III}^* . Ниже записаны точки и веса данного плана, найденные численно:

$$\xi_{III}^* = \begin{pmatrix} (10, 0) & (2.6244, 0) & (10, 10) \\ 0.3499 & 0.5476 & 0.1025 \end{pmatrix}.$$

4. Некоторые аналитические результаты и эффективность. Как было показано в предыдущем разделе, граница области значений параметров θ_1 и θ_2 , определяющей тип оптимального плана, зависит от значения параметра θ_0 . В связи с этим представляет интерес получение априорной оценки данного параметра. Для этого можно использовать e_1 -оптимальный план, позволяющий оценить параметр θ_0 наиболее точно. Данный план является разновидностью L -оптимального плана для матрицы $L = \text{diag}\{1, 0, 0\}$. Следующий результат определяет вид e_1 -оптимального плана для модели Лэйбла.

Теорема 3. *Рассмотрим модель, имеющую e_1 -оптимальный план следующего вида:*

$$\xi_{e_1}^* = \begin{pmatrix} (t_1^*, 0) & (b_1, 0) \\ \omega_1^* & 1 - \omega_1^* \end{pmatrix}, \quad \text{где } t_1^* = \frac{b_1}{\sqrt{2}(b_1\theta_1 + 1) + 1}, \quad \omega_1^* = \frac{1}{b_1\theta_1(3\sqrt{2} - 4) + \sqrt{2}}.$$

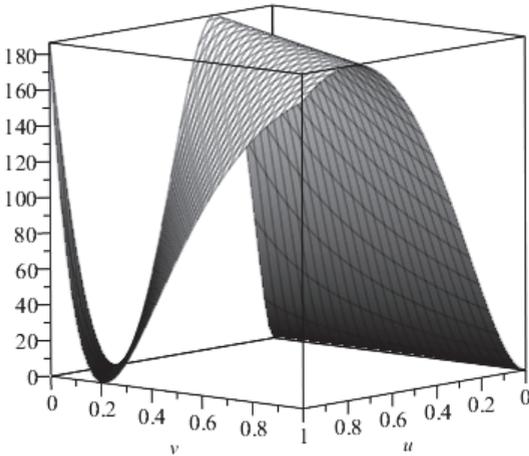


Рис. 4. Поведение функции $\varphi((u, v), \xi_{e_1}^*)$ для e_1 -оптимального плана из теоремы 3 для $\theta_0 = \theta_1 = 1, \theta_2 = 2, b_1 = b_2 = 1$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Для доказательства достаточно воспользоваться теоремой эквивалентности (теорема 1). Непосредственные вычисления показывают, что план $\xi_{e_1}^*$ принадлежит Ξ_L^* , а его экстремальный многочлен имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi((u, v), \xi_{e_1}^*) &= \\ &= \frac{u^2(b_1(2\sqrt{2}v\theta_2 - u\theta_1 + 2v\theta_2 + 2\sqrt{2} + 2) - u(2\sqrt{2} + 3))^2(b_1\theta_1 + 2\sqrt{2} + 3)^2(b_1\theta_1 + 1)^4}{(u\theta_1 + v\theta_2 + 1)^4\theta_1^8 b_1^8}. \end{aligned}$$

Анализ данной функции показывает, что она принимает свое максимальное значение, равное $\text{tr}LM^+(\xi_{e_1}^*) = (b_1\theta_1 + 2\sqrt{2} + 3)^2(b_1\theta_1 + 1)^2/(b_1^4\theta_1^4)$, в точках плана $\xi_{e_1}^*$, и, следовательно, по теореме 1 данный план является e_1 -оптимальным. Поведение экстремального полинома $\varphi((u, v), \xi_{e_1}^*)$ для значений параметров $\theta_0 = \theta_1 = 1, \theta_2 = 2, b_1 = b_2 = 1$ отобразено на рис. 4. Теорема доказана. \square

Представленный в теореме 3 план позволяет получить априорную оценку параметра θ_0 до проведения экспериментов для оценивания параметров θ_1 и θ_2 . Используя полученную оценку и варьируя коэффициент гомотетии γ , исследователь может подобрать тип плана (насыщенный или избыточный), являющийся наиболее удобным для практической реализации.

В заключение рассмотрим эффективность D -оптимального плана (исследованного в нашей недавней работе [11]) относительно L -(A -)оптимального. Для заданного плана ξ (такого, что $0 < \text{tr}LM(\xi, \theta)^+ < \infty$) функция L -эффективности определяется следующим образом:

$$Eff_L(\xi) = \frac{\inf_{\xi \in \Xi_L} \text{tr}LM(\xi^*, \theta)^+}{\text{tr}LM(\xi, \theta)^+}. \quad (9)$$

Поведение функции эффективности для различных значений параметра $\theta_0 = 1, 10, 100$ можно видеть на рис. 5 и 6. Как показывают численные наблюдения, L -эффективность D -оптимального плана составляет не менее 55 %.

Ключевая идея развиваемого нами подхода (в настоящей работе и в серии работ [5, 10, 11]) заключается в использовании теоремы эквивалентности не только для построения опорных точек и весов оптимальных планов, но и для нахождения

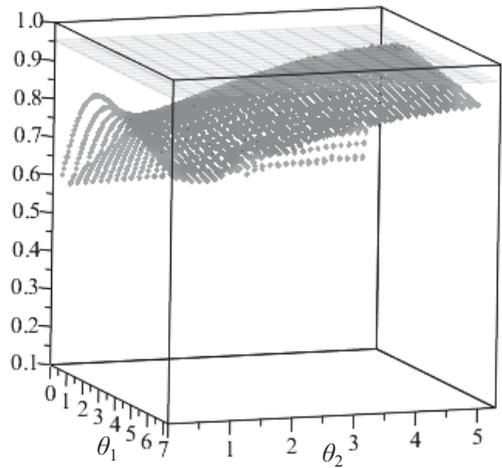
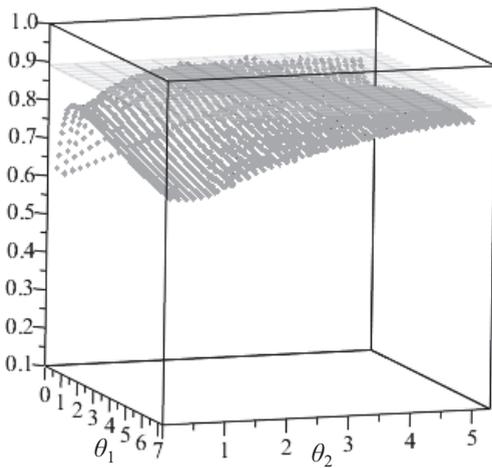


Рис. 5. Поведение функции эффективности $Eff_L(\xi)$ для различных значений параметра θ_0 : $\theta_0 = 1$ (слева) и $\theta_0 = 10$ (справа). В обоих случаях $b_1 = b_2 = 1$.

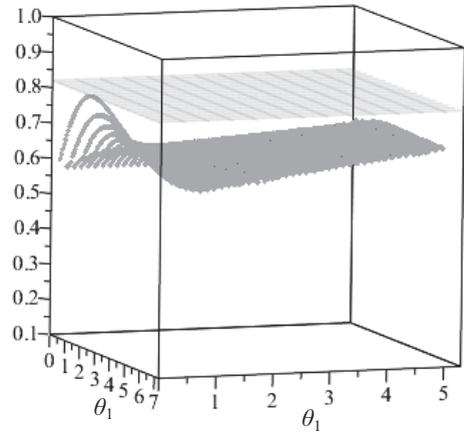


Рис. 6. Поведение функции эффективности $Eff_L(\xi)$ для $\theta_0 = 100$, $b_1 = b_2 = 1$.

областей, определяющих структуру этих планов. Аналитическое решение задачи нахождения зависимости между числом опорных точек локально оптимального плана и областями планирования является очень полезным инструментом, позволяющим исследователю выбрать наиболее подходящую область планирования для снижения экспериментальных затрат. Мы надеемся, что дальнейшее развитие подхода, предложенного в наших статьях, будет полезно для различения классов моделей, для которых гомотетическое преобразование пространства планирования приводит к появлению избыточных планов, и классов моделей, для которых это свойство не имеет места.

Литература

1. Fedorov V. V. *Theory of Optimal Experiment*. New York, Academic Press (1972).
2. Pukelsheim F. *Optimal Design of Experiments*. Philadelphia, SIAM (2006).
3. Atkinson A. C., Donev A. N., Tobias R. D. *Optimum Experimental Designs*. Oxford, Oxford University Press (2007).

4. Garza A. de la. Spacing of information in polynomial regression. *Ann. Math. Statist.* **25**, 123–130 (1954).
5. Григорьев Ю. Д., Мелас В. Б., Шпилев П. В. Избыточность локально D -оптимальных планов и гомотетии. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **4 (62)**, вып. 4, 552–562 (2017). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.403>
6. Yang M., Stufken J. Support points of locally optimal designs for nonlinear models with two parameters. *Annals of Statistics* **37**, 518–541 (2009).
7. Yang M., Stufken J. Identifying locally optimal designs for nonlinear models: a simple extension with profound consequences. *Annals of Statistics* **40** (3), 1665–1681 (2012).
8. Yang M. On the de la Garza phenomenon. *Annals of Statistics* **38**, 2499–2524 (2010).
9. Dette H., Melas V. A note on the de la Garza phenomenon for locally optimal designs. *Annals of Statistics* **39** (2), 1266–1281 (2011).
10. Grigoriev Y. D., Melas V. B., Shpilev P. V. Excess of locally D -optimal designs for Cobb–Douglas model. *Statistical Papers* **59** (4), 1425–1439 (2018).
11. Grigoriev Y. D., Melas V. B., Shpilev P. V. Excess and saturated D -optimal designs for the rational model. *Statistical Papers* **62** (3), 1387–1405 (2021).
12. Seber G. A. F., Wild C. J. *Nonlinear Regression*. New York, John Wiley & Sons (1989).
13. Kiefer J. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Annals of Statistics* **2**, 849–879 (1974).
14. Rao C. *Linear statistical inference and its applications*. New York, Wiley (1968).
15. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Optimal designs for trigonometric regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **141** (3), 1343–1353 (2011).
16. Шпилев П. В. Теорема эквивалентности для вырожденных L -оптимальных планов. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **2 (60)**, вып. 1, 68–74 (2015).
17. Ермаков С. М., Жиглявский А. А. *Математическая теория оптимального эксперимента*. Москва, Наука (1987).
18. Laible J. R. *The kinetics of the catalytic dehydration of certain tertiary and long chain primary alcohols*. Microfilmed Ph. D. Thesis. Madison, University of Wisconsin (1959).
19. Auen R., Peters M. S. Catalytic reduction of nitric oxide. *Ind. Eng. Chem. Process Des.* **1** (3), 204–207 (1962).
20. Melas V. B. *Functional Approach to Optimal Experimental Design*. New York, Springer Science + Business Media (2006).

Статья поступила в редакцию 26 января 2022 г.;
доработана 16 февраля 2022 г.;
рекомендована к печати 3 марта 2022 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

Study of the excess property of the L -optimal design for the Laible model*

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. Study of the excess property of the L -optimal design for the Laible model. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 3, pp. 495–505. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.310> (In Russian)

For a rational two-dimensional nonlinear in parameters Laible model used in analytical chemistry, the problem of constructing L -optimal designs is investigated. It is shown that there are two types of optimal designs for this model: *saturated* (i. e., designs with the

*This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 20-01-00096-a).

number of support points equal to the number of model parameters) and *excess* (i. e., designs with the number of support points greater than the number of model parameters) and that with some homothetic transformations of the design space, locally L -optimal designs can change the type from saturated to excess and vice versa. An analytical solution to the problem of finding the dependence between the number of the optimal design support points and the values of the model parameters based on the application of a functional approach is proposed. The L -efficiency of D -optimal designs is investigated.

Keywords: L -optimal designs; L -efficiency; optimal designs for estimating the individual coefficients; rational regression models; Laible model.

References

1. Fedorov V. V. *Theory of Optimal Experiment*. New York, Academic Press (1972).
2. Pukelsheim F. *Optimal Design of Experiments*. Philadelphia, SIAM (2006).
3. Atkinson A. C., Donev A. N., Tobias R. D. *Optimum Experimental Designs*. Oxford, Oxford University Press (2007).
4. Garza A. de la. Spacing of information in polynomial regression. *Ann. Math. Statist.* **25**, 123–130 (1954).
5. Grigoriev Yu. D., Melas V. B., Shpilev P. V. Excess of locally D -optimal designs and homothetic transformations. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **4** (62), iss. 4, 552–562 (2017). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.403> (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg Univ. Math.* **50**, 329–336 (2017). <https://doi.org/10.3103/S1063454117040082>].
6. Yang M., Stufken J. Support points of locally optimal designs for nonlinear models with two parameters. *Annals of Statistics* **37**, 518–541 (2009).
7. Yang M., Stufken J. Identifying locally optimal designs for nonlinear models: a simple extension with profound consequences. *Annals of Statistics* **40** (3), 1665–1681 (2012).
8. Yang M. On the de la Garza phenomenon. *Annals of Statistics* **38**, 2499–2524 (2010).
9. Dette H., Melas B. A note on the de la Garza phenomenon for locally optimal designs. *Annals of Statistics* **39** (2), 1266–1281 (2011).
10. Grigoriev Y. D., Melas V. B., Shpilev P. V. Excess of locally D -optimal designs for Cobb–Douglas model. *Statistical Papers* **59** (4), 1425–1439 (2018).
11. Grigoriev Y. D., Melas V. B., Shpilev P. V. Excess and saturated D -optimal designs for the rational model. *Statistical Papers* **62** (3), 1387–1405 (2021).
12. Seber G. A. F., Wild C. J. *Nonlinear Regression*. New York, John Wiley & Sons (1989).
13. Kiefer J. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Annals of Statistics* **2**, 849–879 (1974).
14. Rao C. *Linear statistical inference and its applications*. New York, Wiley (1968).
15. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Optimal designs for trigonometric regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference* **141** (3), 1343–1353 (2011).
16. Shpilev P. V. Equivalence theorem for singular L -optimal designs. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **2** (60), iss. 1, 68–74 (2015). (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg Univ. Math.* **48**, 29–34 (2015). <https://doi.org/10.3103/S1063454115010094>].
17. Ermakov S. M., Zhiglyavsky A. A. *Mathematical theory of optimal experiment*. Moscow, Nauka Publ. (1987). (In Russian)
18. Laible J. R. *The kinetics of the catalytic dehydration of certain tertiary and long chain primary alcohols*. Microfilmed Ph. D. Thesis. Madison, University of Wisconsin (1959).
19. Ayen R., Peters M. S. Catalytic reduction of nitric oxide. *Ind. Eng. Chem. Process Des.* **1** (3), 204–207 (1962).
20. Melas V. B. *Functional Approach to Optimal Experimental Design*. New York, Springer Science + Business Media (2006).

Received: January 26, 2022

Revised: February 16, 2022

Accepted: March 3, 2022

Authors' information:

Vyacheslav B. Melas — vbmelas@yandex.ru

Petr V. Shpilev — p.shpilev@spbu.ru