УДК 519.24 Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2024. Т. 11 (69). Вып. 3
MSC 62K05

D-оптимальные планы для двумерной полиномиальной модели*

П. В. Шпилев

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

Для цитирования: *Шпилев П. В.* D-оптимальные планы для двумерной полиномиальной модели // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2024. Т. 11 (69). Вып. 3. С. 537–548. https://doi.org/10.21638/spbu01.2024.310

Для двумерной полиномиальной регрессионной модели исследовано влияние аффинного преобразования пространства планирования на число точек носителя D-оптимального плана. Для модели полного ранга степени n получен результат, определяющий структуру D-оптимального. Доказано, что для симметричной относительно нуля области планирования оптимальный план является симметричным. Полученный результат позволяет значительно уменьшить размерность целевой оптимизационной задачи и лежит в основе алгоритма, разработанного автором для нахождения D-оптимальных планов для моделей неполного ранга на несимметричных областях планирования. Исследована D-эффективность планов, сконцентрированных в равноотстоящих точках.

Ключевые слова: многомерные регрессионные модели, двумерные полиномиальные регрессионные модели, D-оптимальные планы, D-эффективность.

1. Введение. В литературе по планированию наиболее изученными являются оптимальные планы для линейных по параметрам одномерных регрессионных моделей (см. [1–3]). Данные модели достаточно универсальны и получили широкое распространение на практике, однако не всегда позволяют описать исследуемую зависимость с требуемой точностью, вследствие чего возникает необходимость использовать более сложные, многомерные модели. Вместе с тем такие модели изучены относительно мало. Общие результаты для многомерных моделей были получены для случая, когда регрессионная функция представлена в виде прямого произведения функций одной переменной (см. монографию [4]). Для многочленов 2-го порядка были аналитически построены D-оптимальные планы на гиперкубе, гипершаре и симплексе (см. [5, 6]), а также планы для оценивания экстремума таких многочленов [7] и D-оптимальные планы для сферических гармонических функций [8]. Недавно был предложен подход к построению D-оптимальных планов для многомерной полиномиальной модели, основанной на использовании моментов (см. [9]).

Как правило, исследователи ограничиваются рассмотрением фиксированной области планирования, на которой ищется оптимальное решение. Вопрос о том, как влияет изменение области планирования на структуру и размерность решения обычно остается открытым. Вместе с тем задача нахождения оптимального плана с минимальным числом точек носителя имеет большое практическое значение, так как

*Исследование выполнено за счет совместного гранта Российского научного фонда и Санкт-Петербургского научного фонда № 23-21-10013, https://rscf.ru/project/23-21-10013/.

использование таких планов позволяет уменьшить расходы на проведение экспериментов. В серии недавних работ [10–12], посвященных изучению вышеозначенного вопроса, нам удалось показать, что в некоторых случаях трансформация области планирования может приводить как к уменьшению, так и к увеличению числа точек оптимального плана, что означает, что выбор подходящей области может сократить количество требуемых (при заданной точности) измерений.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния аффинного преобразования пространства планирования на структуру D-оптимального плана для двумерной полиномиальной модели. Во втором разделе даны базовые понятия и определения. Третий раздел посвящен исследованию D-оптимальных планов для модели полного ранга степени n. В четвертом разделе рассматривается вопрос влияния аффинного преобразования пространства планирования на структуру оптимального плана для моделей неполного ранга и предлагается итерационный алгоритм построения оптимальных планов, обеспечивающий сходимость к решению.

2. Постановка задачи. Рассмотрим классическую регрессионную модель:

$$y = \eta(x, \theta) + \epsilon, \tag{1}$$

где переменная x принадлежит компактному пространству $\mathcal{X} \subset R^k$, а случайная величина $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$, $\sigma^2 > 0$. Вектор $\theta \in \Theta \subset R^p$ есть вектор неизвестных параметров, а $\eta\colon R^k \to R^1$ – заданная регрессионная функция (см. [2]).

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

$$\xi = \begin{pmatrix} (x_{11}, x_{21}) & \dots & (x_{1n}, x_{2n}) \\ \omega_1 & \dots & \omega_n \end{pmatrix}, \quad (x_{1i}, x_{2i}) \in \mathcal{X}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

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 $\omega_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \omega_i = 1$.

В настоящей работе предполагается линейность функции регрессии относительно параметров, что означает, что $\eta(x, \theta)$ имеет следующий вид:

$$\eta(x, \theta) = f^T(x)\theta, \tag{2}$$

где $f(x) = (f_1(x), \dots, f_p(x))^T \in R^p$ — вектор регрессионных функций $f_i(x)\colon R^k \to R^1$, $i = 1, \dots, p$.

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

$$M(\xi) = \int_{\mathcal{X}} f(x) f^T(x) d\xi(x). \tag{3}$$

Говорят, что план ξ^* D-оптимален, если он максимизирует функционал $\Phi(\xi) = \log|M(\xi)|$, т. е.

$$\Phi(\xi^*) = \sup_{\xi \in \Xi} \log|M(\xi)|, \tag{4}$$

где Ξ — множество непрерывных планов на $\mathcal{X}$.

Удобным инструментом проверки заданного плана ξ на D-оптимальность является теорема Кифера—Вольфовица (см. [13]).

Теорема 2.1. *Если множество информационных матриц компактно, то следующие условия эквивалентны:*

(a) план ξ^* *— D-оптимальный;*

(b) план ξ^* *минимизирует* $\max_{x\in\mathcal{X}} f^T(x)M^{-1}(\xi)f(x)$;

(c) $\max_{x\in\mathcal{X}} f^T(x)M^{-1}(\xi^*)f(x) = p$.

Причем если план ξ^* *сосредоточен в конечном числе точек, то последнее равенство достигается в точках* x_i^* *оптимального плана* ξ^**. Кроме того, информационные матрицы всех оптимальных планов совпадают. В условиях теоремы план* $\xi^* \in \Xi$.

Замечание 2.1. *Функцию* $\varphi(x,\xi) = f^T(x)M^{-1}(\xi)f(x)$ *в литературе часто называют экстремальным полиномом плана* ξ*. Теорема Кифера — Вольфовица позволяет в некоторых случаях упростить исходную оптимизационную задачу, сводя ее к задаче нахождения максимумов экстремального полинома.*

3. D-оптимальные планы для двумерной полиномиальной модели. Рассмотрим двумерную полиномиальную модель на прямоугольнике:

$$y = \eta(x,\theta) + \epsilon = \theta^T f(x_1,x_2) + \epsilon,\ \mathcal{X} = [a_1,a_2]\times[b_1,b_2], a_1,a_2,b_1,b_2 \in \mathbb{R}, \tag{5}$$

где $\theta \in R^p$ — вектор неизвестных параметров; $f(x_1,x_2) \in R^p$ — вектор регрессионных функций, состоящий из одночленов (с единичными коэффициентами), а случайная величина $\epsilon \sim N(0,\sigma^2),\ \sigma^2 > 0$.

Мы будем говорить, что модель (5) является моделью полного ранга степени n, если ее вектор регрессионных функций содержит все возможные сочетания компонент $x_1^i x_2^j,\ i,j = 0,\dots,n$ (при ограничении $i+j \le n$). В этом случае $p = \frac{n^2+3n+2}{2} = C_{n+2}^2$ и скалярное произведение $\theta^T f(x_1,x_2)$ можно представить в виде двойной суммы:

$$\theta^T f(x_1,x_2) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{i} \theta_{\frac{i^2+i}{2}+j} x_1^{i-j} x_2^j. \tag{6}$$

Будем называть план ξ симметричным планом 2-го порядка (и обозначать ξ_{sym}), если для неотрицательных целых α_1 и α_2 ($\alpha_1+\alpha_2 \le 2n$) выполняются следующие соотношения:

$$\lambda_{\alpha_1,\alpha_2} = \int_{\mathcal{X}} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} d\xi(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } \alpha_1 \text{ или } \alpha_2 \text{ — нечетное,} \\ \ne 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{7}$$

Информационная матрица плана ξ_{sym} (после соответствующих перестановок элементов вектора регрессионных функций) имеет следующий вид:

$$M(\xi_{sym}) = \begin{pmatrix} M_1(\xi_{sym}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M_2(\xi_{sym}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_3(\xi_{sym}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M_4(\xi_{sym}) \end{pmatrix},$$

где блоки

$$M_1(\xi) \in R^{k_1(n)\times k_1(n)} = \{\lambda_{2i,2j}\}_{i,j=0,2,\dots,2\lfloor\frac{n}{2}\rfloor},\ i+j \le n,$$

$$M_2(\xi) \in R^{k_2(n)\times k_2(n)} = \{\lambda_{2i,2j}\}_{i=1,3,\dots,2\lfloor\frac{n+1}{2}\rfloor-1,j=0,2,\dots,2\lfloor\frac{n}{2}\rfloor},\ i+j\le n,$$
$$M_3(\xi) \in R^{k_2(n)\times k_2(n)} = \{\lambda_{2j,2i}\}_{i=1,3,\dots,2\lfloor\frac{n+1}{2}\rfloor-1,j=0,2,\dots,2\lfloor\frac{n}{2}\rfloor},\ i+j\le n,$$
$$M_4(\xi) \in R^{k_3(n)\times k_3(n)} = \{\lambda_{2i,2j}\}_{i,j=1,3,\dots,\lfloor\frac{n+1}{2}\rfloor-1},\ i+j\le n,$$
$$k_1(n)=k_2(n)=\frac{n^2+4n+3}{8},\ k_3(n)=\frac{n^2-1}{8},\quad \text{если } n \text{ — нечетное},$$
$$k_1(n)=\frac{n^2+6n+8}{8},\ k_2(n)=k_3(n)=\frac{n^2+2n}{8},\quad \text{если } n \text{ — четное}.$$

В случае, когда область планирования — квадрат (с центром в нуле) и $n=2$, определитель информационной матрицы плана ξ_{sym} вычисляется по следующей формуле (см. [5, с. 74, теорема 3]):

$$|M(\xi_{sym})| = \lambda_{2,0}^2\lambda_{2,2}(\lambda_{4,0}-\lambda_{2,2})(\lambda_{4,0}+\lambda_{2,2}-2\lambda_{2,0}^2). \tag{8}$$

В силу того, что для квадратичной модели оптимальный план сконцентрирован в точках с координатами $|x_i|=1,0;\ i=1,2,\ \lambda_{2,0}^*=\lambda_{4,0}^*$ и моментные соотношения $\lambda_{2,0}$ и $\lambda_{2,2}$ линейно зависят от весов ω_1,ω_2, величины $\lambda_{2,0}^*,\lambda_{2,2}^*$, доставляющие максимум $|M(\xi)|$, могут быть найдены как решение системы соответствующих частных производных:

$$\begin{cases} \lambda_{2,0}^* = \frac{35}{64}+\frac{5\sqrt{57}}{192} \\ \lambda_{2,2}^* = \frac{135}{512}+\frac{65\sqrt{57}}{1536}. \end{cases} \tag{9}$$

Данное решение может быть обобщено на случай k-мерной модели, а решения соответствующей системы для моментных соотношений могут быть использованы для нахождения весов оптимального плана (см. [5, с. 74, теорема 4]).

Однако уже для модели третьего порядка ($n=3$) и квадратной области планирования (с центром в нуле) ситуация значительно сложнее и этот подход работать не будет. Так, например, в этом случае определитель матрицы $M(\xi_{sym})$ имеет вид

$$|M(\xi_{sym})| = \\ = -(2\kappa_1^2-\kappa_2-\kappa_4)(-\kappa_4+\kappa_2)(\kappa_1\kappa_3\kappa_5-\kappa_1\kappa_5^2-\kappa_2^2\kappa_5+2\kappa_2\kappa_4\kappa_5-\kappa_3\kappa_4^2)^2\kappa_4, \tag{10}$$

где $\kappa_1=\lambda_{2,0}=\lambda_{0,2}$, $\kappa_2=\lambda_{4,0}=\lambda_{0,4}$, $\kappa_3=\lambda_{6,0}=\lambda_{0,6}$, $\kappa_4=\lambda_{2,2}$, $\kappa_5=\lambda_{4,2}=\lambda_{2,4}$ и соответствующая система уравнений частных производных оказывается неразрешима в радикалах. С другой стороны, непосредственное представление определителя информационной матрицы в виде функции от точек и весов плана ξ_{sym} приводит к еще более сложной системе уравнений, также не имеющей решения в радикалах.

Следующий результат позволяет существенно упростить задачу построения оптимального плана для модели порядка n.

Теорема 3.1. *Для модели* (5) *полного ранга порядка n и квадратной области планирования* $\mathcal{X}=[-a,a]\times[-a,a]$ *D-оптимальный план* ξ_D *принадлежит классу симметричных планов второго порядка и может быть представлен в виде линейной комбинации следующих планов:*

$$\xi_D = \frac{1}{4}\xi_{0,0}+\frac{1}{4}\xi_{0,1}+\frac{1}{4}\xi_{0,1}+\frac{1}{4}\xi_{1,1}, \tag{11}$$

где план $\xi_{0,0}$ задается следующими матрицами точек носителя $P_{0,0}$ и весов $W_{0,0}$:

$$P_{0,0} = \begin{pmatrix} \left(x_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}, x_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}\right) & \dots & \left(x_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, 2}, x_{1, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}\right) & \left(x_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, 1}, a\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \left(x_{1, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1}, x_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, 2}\right) & \dots & (x_{1,2}, x_{1,2}) & (x_{1,1}, a) \\ \left(a, x_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, 1}\right) & \dots & (a, x_{1,1}) & (a, a) \end{pmatrix},$$

$$W_{0,0} = \begin{pmatrix} \omega_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1} & \dots & \omega_{1, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1, 1} & \dots & \omega_{1,1} \end{pmatrix},$$

при этом $\omega_{i,j} = \omega_{j,i}$ и $\sum_{i,j=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor+1} \omega_{i,j} = 1$.

Точки планов $\xi_{i,j}, i, j = 0, 1$ задаются умножением первой координаты соответствующей точки плана $\xi_{0,0}$ на $(-1)^i$, а второй — на $(-1)^j$. Например, первая точка плана $\xi_{0,1}$ — $(a, -a)$ с весом $\omega_{1,1}$. В случае, если n — четное, имеют место равенства $x_{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor, j} \equiv 0$, $j = 1, \dots, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1$.

Доказательство теоремы 3.1. То, что план ξ_D, определенный в теореме, принадлежит классу симметричных планов второго порядка, проверяется непосредственной подстановкой:

$$\int_{\mathcal{X}} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} d\xi(x) = \frac{1}{4} \int_{\mathcal{X}} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} d\xi_{0,0}(x) + \frac{1}{4} \int_{\mathcal{X}} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} d\xi_{1,0}(x) + \frac{1}{4} \int_{\mathcal{X}} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} d\xi_{0,1}(x) +$$

$$+ \frac{1}{4} \int_{\mathcal{X}} x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} d\xi_{1,1}(x) = \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^{n-1} x_{1(ij)}^{\alpha_1} x_{2(ij)}^{\alpha_2} (1 + (-1)^{\alpha_1} + (-1)^{\alpha_2} + (-1)^{\alpha_1+\alpha_2}) \omega_{i,j} = 0,$$

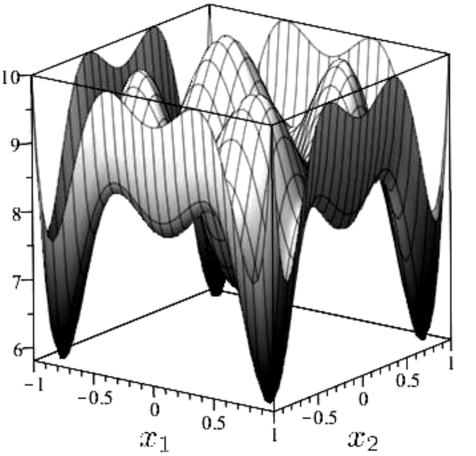
если α_1 или α_2 — нечетные. Точки $(x_{1(ij)}, x_{2(ij)})$ являются точками носителя плана $\xi_{0,0}$ и определяются элементами матрицы $P_{0,0}$ (элемент, стоящий на позиции (i, j), соответствует точке плана $(x_{1(ij)}, x_{2(ij)})$.

В силу того, что D-оптимальный план не зависит от θ (вектора параметров модели), и вследствие теоремы 2.1, согласно которой информационные матрицы D-оптимальных планов совпадают, для моделей $\eta(x, \theta)$ и $\eta(-x, \theta)$ (на симметричной, относительно нуля области планирования) совпадают сами D-оптимальные планы, из чего следует, в свою очередь, что экстремальный полином $\varphi((x_1, x_2), \xi^*)$ является четной функцией относительно своих аргументов. Из этого также следует, что функция $\varphi((x_1, x_2), \xi^*)$ симметрична относительно плоскостей, проходящих через прямые $x_1 = x_2$ и $x_1 = -x_2$ и параллельных оси аппликат. □

Замечание 3.1. *В общем случае, когда в качестве области планирования выступает прямоугольная область $\mathcal{X} = [a_1, a_2] \times [b_1, b_2]$, соответствующий D-оптимальный план получается из плана ξ_D с помощью аффинного преобразования его точек носителя.*

Проиллюстрируем на примерах, как можно использовать данную теорему в задачах построения D-оптимальных планов.

Пример 3.1. *Рассмотрим модель* (5) *третьей степени ($n = 3$) и квадратную область планирования $\mathcal{X} = [-1, 1] \times [-1, 1]$. В силу теоремы 3.1 задача построения*



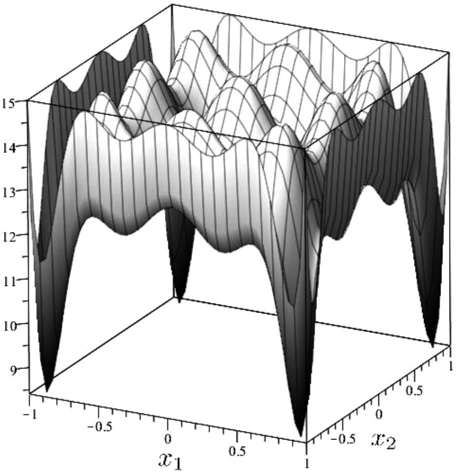


Рис. 1. Поведение экстремального полинома $\varphi((x_1, x_2), \xi_D)$ из теоремы 2.1 для D-оптимальных планов $\xi_D^{(3)}$ (слева) и $\xi_D^{(4)}$ (справа), структура которых определяется в теореме 3.1 для модели (5) третьей и четвертой степени ($n = 3, 4$).

D-оптимального плана сводится к нахождению всего 4 неизвестных ($x_{1,1}$, $x_{1,2}$, $\omega_{1,1}$, $\omega_{1,2}$):

$$\xi_{0,0} = \begin{pmatrix} (1,1) & (1, x_{1,1}) & (x_{1,1}, 1) & (x_{1,2}, x_{1,2}) \\ \omega_{1,1} & \omega_{1,2} & \omega_{1,2} & 1 - \omega_{1,1} - 2\omega_{1,2} \end{pmatrix},$$

веса и точки в матричной форме:

$$P_{0,0} = \begin{pmatrix} (x_{1,2}, x_{1,2}) & (x_{1,1}, 1) \\ (1, x_{1,1}) & (1,1) \end{pmatrix}, \ W_{0,0} = \begin{pmatrix} 1 - \omega_{1,1} - 2\omega_{1,2} & \omega_{1,2} \\ \omega_{1,2} & \omega_{1,1} \end{pmatrix}.$$

Численное решение соответствующих систем уравнений дает следующие значения: $x_{1,1} = 0.3587$, $x_{1,2} = 0.4801$, $\omega_{1,1} = 0.3674$, $\omega_{1,2} = 0.2305$. Поведение экстремального полинома оптимального плана $\xi_D^{(3)} = \frac{1}{4}\xi_{0,0} + \frac{1}{4}\xi_{0,1} + \frac{1}{4}\xi_{0,1} + \frac{1}{4}\xi_{1,1}$ изображено на рис. 1 (слева).

Теперь рассмотрим модель (5) четвертой степени ($n = 4$) на такой же области планирования. В силу теоремы 3.1 точки и веса плана $\xi_{0,0}$ определяются матрицами

$$P_{0,0} = \begin{pmatrix} (0,0) & (0, x_{1,3}) & (0,1) \\ (x_{1,3}, 0) & (x_{1,2}, x_{1,2}) & (x_{1,1}, 1) \\ (1,0) & (1, x_{1,1}) & (1,1) \end{pmatrix}, \quad W_{0,0} = \begin{pmatrix} \omega_{3,3} & \omega_{2,3} & \omega_{1,3} \\ \omega_{2,3} & \omega_{2,2} & \omega_{1,2} \\ \omega_{1,3} & \omega_{1,2} & \omega_{1,1} \end{pmatrix},$$

и задача построения D-оптимального плана сводится к нахождению 7 неизвестных ($x_{1,1}$, $x_{1,2}$, $x_{1,3}$, $\omega_{1,1}$, $\omega_{1,2}$, $\omega_{1,3}$ и $\omega_{2,2}$). Поведение экстремального полинома оптимального плана $\xi_D^{(4)}$ изображено на рис. 1 (справа).

4. D-оптимальные планы для двумерной полиномиальной модели неполного ранга. В данном разделе мы рассмотрим, как аффинное преобразование пространства планирования влияет на структуру D-оптимального плана. Нам понадобится ввести несколько дополнительных понятий.

Определение 4.1. Будем говорить, что модель (5) степени n является моделью неполного ранга, если размерность вектора регрессионных функций $p < C^2_{n+2}$.

Определение 4.2. Будем говорить, что модель (5) робастна относительно аффинного преобразования пространства планирования, если в результате этого преобразования множество элементов функции регрессии этой модели остается неизменным. Если множество элементов остается неизменным при аффинном преобразовании пространства планирования лишь по одной оси координат (x_1 или x_2), будем называть модель полуробастной.

Следующий результат дает достаточные условия сохранения структуры D-оптимального плана при аффинном преобразовании пространства планирования.

Теорема 4.1. *Достаточным условием того, что D-оптимальный план сохраняет свою структуру при аффинном преобразовании пространства планирования, является робастность модели (относительно данного преобразования). При этом точки нового D-оптимального плана получаются в результате аффинного преобразования соответствующих точек исходного плана, а веса остаются неизменными.*

Доказательство теоремы 4.1. Пусть $\eta(x,\theta)$ — полиномиальная функция регрессии модели (5) (не обязательно полного ранга), а $\gamma : \mathcal{X} \to \tilde{\mathcal{X}}$ — соответствующее аффинное преобразование. Обозначим за ξ^* D-оптимальный план для исходного пространства планирования, а за $\widetilde{\xi^*}$ — D-оптимальный план для $\tilde{\mathcal{X}}$. Утверждение теоремы следует из определения D-оптимального плана, в соответствии с которым точки и веса плана не зависят от вектора параметров регрессионной модели, и значит, в силу робастности, модель $y = \eta(x,\theta) + \epsilon$ на области $\mathcal{X}$ эквивалентна модели $y = \eta(\gamma^{-1}(x),\theta) + \epsilon$ на области $\tilde{\mathcal{X}}$. А в силу теоремы 2.1 для заданной области планирования и фиксированной функции регрессии информационные матрицы $D-$оптимальных планов совпадают, что, в свою очередь, означает, что экстремальный полином $\varphi(x,\widetilde{\xi^*}) = \varphi(\gamma^{-1}(x),\xi^*)$, $x \in \tilde{\mathcal{X}}$. □

Рассмотрим небольшой пример, показывающий, что условие робастности, сформулированное в теореме 4.1, не является необходимым.

Пример 4.1. *Рассмотрим модель* (5) *степени 2, неполного ранга. В качестве вектора регрессионных функций выберем вектор* $f(x_1,x_2) = (1, x_2, x_1^2)^T$. *Данная модель является полуробастной (по* x_2*). Вместе с тем с помощью прямых вычислений легко убедиться, что при* $a_2 > a_1 \geq 0$ *на прямоугольнике* $\mathcal{X} = [a_1,a_2]\times[b_1,b_2]$ *для данной модели оптимальный план сосредоточен с равными весами в вершинах области планирования:*

$$\xi_D = \begin{pmatrix} (a_1,b_1) & (a_1,b_2) & (a_2,b_1) & (a_2,b_2) \\ 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, оптимальный план сохраняет свою структуру при аффинных преобразованиях интервалов $[a_1,a_2]$ *и* $[b_1,b_2]$ *в том случае, если интервал* $[a_1,a_2]$ *не включает ноль. В противном случае* D*-оптимальный план имеет следующий вид:*

$$\xi_D = \begin{cases} \xi_l, & a_1 + a_2 > 0; \\ (1-\alpha)\xi_l + \alpha\xi_r, & a_1 + a_2 = 0; \\ \xi_r, & a_1 + a_2 < 0, \end{cases}$$

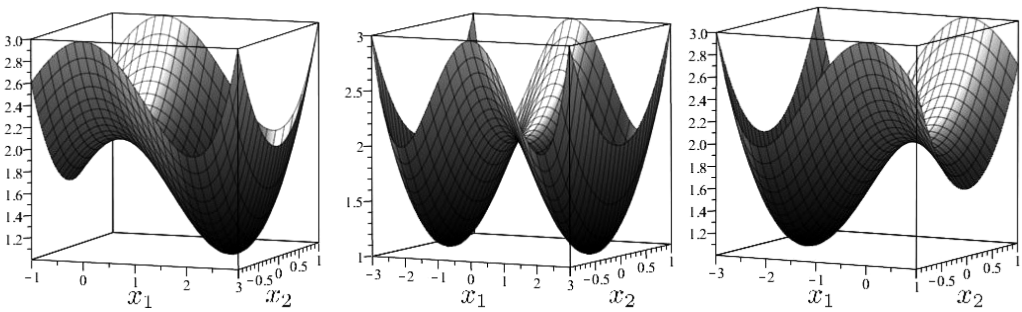


Рис. 2. Поведение экстремального полинома $\varphi((x_1, x_2), \xi_D)$ из теоремы 2.1 для D-оптимального плана ξ_D из примера 4.1 на прямоугольнике $\mathcal{X} = [a_1, a_2] \times [-1, 1]$ для случаев $a_1 = -1$, $a_2 = 3$ (слева), $a_1 = -3$, $a_2 = 3$ (центр), $a_1 = 3$, $a_2 = -1$ (справа).

где α — произвольно выбранное число от 0 до 1,

$$\xi_l = \begin{pmatrix} (0, b_1) & (0, b_2) & (a_2, b_1) & (a_2, b_2) \\ 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \end{pmatrix},$$

$$\xi_r = \begin{pmatrix} (a_1, b_1) & (a_1, b_2) & (0, b_1) & (0, b_2) \\ 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \end{pmatrix}.$$

Поведение экстремального многочлена этого плана можно видеть на рис. 2.

Одна из ключевых проблем, связанная с построением оптимальных планов для моделей неполного ранга, заключается в том, что неудачный выбор размерности (т. е. числа точек носителя) кандидата в оптимальный план приводит к тому, что решение, полученное численными методами, оказывается не оптимальным (вследствие «застревания» в локальном минимуме). Ниже предлагается алгоритм, основанный на использовании свойства симметрии оптимального плана (теорема 3.1), позволяющий избежать этой проблемы.

Пусть модель (5) не является робастной относительно аффинного преобразования, и нашей задачей является построение D-оптимального плана на прямоугольнике: $\mathcal{X} = [a_1, a_2] \times [b_1, b_2]$. Для определенности будем считать, что $|b_2| \geq |b_1|$ и $|a_2| \geq |a_1|$. Для построения можно использовать следующий алгоритм.

Алгоритм 4.1. Построение D-оптимального плана

Шаг 1. Проводится оценка степени модели по каждому из аргументов. Обозначим за n_1 степень модели по x_1 при фиксированном значении аргумента x_2, а за n_2 — по x_2 при фиксированном значении аргумента x_1.

Шаг 2. В качестве начальной точки выбирается план $\xi^{(0)}$, сконцентрированный в N равноотстоящих точках с равными весами. При этом

$$N = \begin{cases} 4\left((\lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor + 1)(\lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor + 1)\right), & \text{если } n_1,\ n_2 \text{ — нечетные;} \\ (4\lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor + 2)(\lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor + 1), & \text{если } n_1 \text{ — четное, } n_2 \text{ — нечетное;} \\ (\lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor + 1)(4\lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor + 2), & \text{если } n_1 \text{ — нечетное, } n_2 \text{ — четное;} \\ 2\lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor(\lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor + 1) + 2\lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor(\lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor + 1) + 1, & \text{если } n_1,\ n_2 \text{ — четные.} \end{cases}$$

Шаг 3. Для нахождения кандидата в оптимальный план применяется какой-либо оптимизационный алгоритм (например, Нелдера—Мида). Найденный план проверяется на оптимальность. В случае положительного результата проверки переходим к шагу 9. В противном случае — к шагу 4.

Шаг 4. В качестве новой области планирования выбирается область $\tilde{\mathcal{X}} = [-a_2, a_2] \times [-b_2, b_2]$.

Шаг 5. Рассчитываются веса и точки симметричного плана $\xi_D^{(0)}$ из теоремы 3.1 (структура точек носителя которого определяется матрицей $P_{0,0} \in R^{(\lfloor \frac{n_1}{2} \rfloor + 1) \times (\lfloor \frac{n_2}{2} \rfloor + 1)}$, а веса матрицей $W_{0,0}$).

Шаг 6. Устанавливаются значения α_0 и β_0 (скоростей адаптации). Соответствующие границы области $\tilde{\mathcal{X}}$ сдвигаются на α_0 и β_0 в направлении соответствующих границ $\mathcal{X}$. Пересчитываются точки и веса плана. Переходим к шагу 7.

Шаг 7. Найденный план проверяется на оптимальность. В случае положительного результата проверки из плана исключаются точки с нулевыми весами (если такие имеются) и повторяется шаг 6 до тех пор, пока $\tilde{\mathcal{X}} \neq \mathcal{X}$, после чего выполняется шаг 9. В противном случае — шаг 8.

Шаг 8. Устанавливается пороговый уровень ϵ. Выбирается последний найденный оптимальный план, если все его веса больше ϵ, выбираются новые скорости адаптации $\alpha_{k+1} < \alpha_k$ и $\beta_{k+1} < \beta_k$, выполняется шаг 6. В противном случае из него исключаются точки с весом меньше ϵ, устанавливаются новые скорости адаптации (с учетом оставшихся расстояний между соответствующими границами областей $\tilde{\mathcal{X}}$ и $\mathcal{X}$) и выполняется шаг 6.

Шаг 9. Проверяем, что экстремальный полином в точках оптимального плана имеет единственный экстремум и при необходимости исключаем из плана избыточные точки. Завершаем работу алгоритма.

Данный алгоритм позволяет гарантировать, что численное решение целевой оптимизационной задачи (4) сойдется к глобальному максимуму. Скорости адаптации и пороговый уровень являются настраиваемыми параметрами алгоритма.

Проиллюстрируем работу алгоритма на примере.

Пример 4.2. *Рассмотрим модель* (5) *неполного ранга на области планирования* $[0, 1] \times [-0.5, 1]$ *с вектором регрессионных функций* $f(x_1, x_2) = (1, x_1, x_1x_2, x_2x_1^2, x_1^3)^T$. *Эта модель, очевидно, не является робастной. В данном случае целевая оптимизационная задача исходно (при использовании в качестве начального приближения равномерного плана) имеет 27 неизвестных (12 внутренних точек + 15 весов). В соответствии с первым шагом алгоритма размерность решения может быть уменьшена до 11 неизвестных (4 внутренние точки + 7 весов).*

Шаг 1. $n_1 = 3$, $n_2 = 1$ *(порядки модели по* x_1 *и по* x_2*).*

Предположим, шаг 3 не дал удовлетворительного результата. Выполняем шаги 4 и 5: выбираем $\tilde{\mathcal{X}} = [-1, 1] \times [-1, 1]$ *и рассчитываем веса и точки симметричного плана (в данном случае требуется найти всего 2 (!) неизвестных). Задаем скорости адаптации (например,* $\alpha_0 = 0.5$ *и* $\beta_0 = 0.5$*) и выполняем оставшиеся шаги алгоритма. На рис. 3 отображено поведение экстремальных многочленов оптимальных планов при соответствующей итерации алгоритма. Как свидетельствует правый график (на рис. 3), результирующий* D*-оптимальный план сосредоточен в*

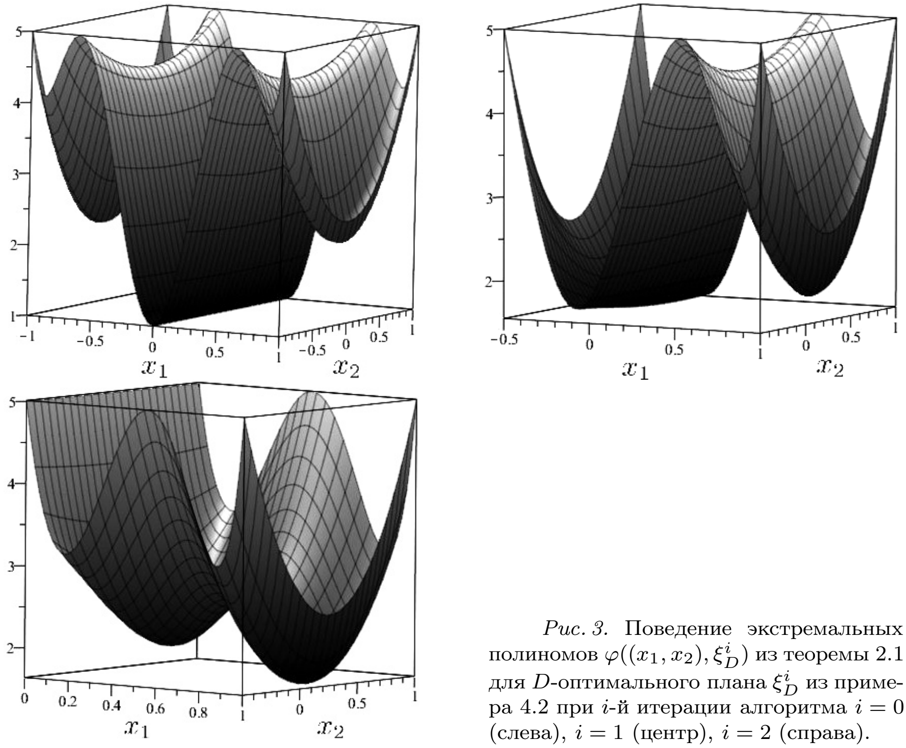


Рис. 3. Поведение экстремальных полиномов $\varphi((x_1, x_2), \xi_D^i)$ из теоремы 2.1 для D-оптимального плана ξ_D^i из примера 4.2 при i-й итерации алгоритма $i = 0$ (слева), $i = 1$ (центр), $i = 2$ (справа).

5 точках с равными весами, т. е. является насыщенным:

$$\xi_D^{(3)} = \begin{pmatrix} (0,t) & (\frac{\sqrt{41}-1}{10}, -0.5) & (\frac{\sqrt{41}-1}{10}, 1) & (1,-0.5) & (1,1) \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix},$$

$$\textit{для } \forall \textit{ фикс. } t \in [-0.5, 1].$$

5. Заключение. В заключение скажем несколько слов об эффективности D-оптимальных планов. Под D-эффективностью плана ξ понимается следующая функция:

$$\mathrm{eff}_D(\xi) = \left(\frac{|M(\xi)|}{|M(\xi_D)|} \right)^{1/p},$$

где ξ_D — D-оптимальный план.

Для сравнения будем использовать планы ξ_{unif} (сконцентрированные в равноотстоящих точках с равными весами) с тем же количеством точек, что и у соответствующего D-оптимального плана. Численные результаты показывают, что при увеличении степени модели эффективность равномерных планов стремительно снижается. Так, для модели полного ранга при $n = 1$ эффективность составляет 100 %; при $n = 2$ — 85.4 %; при $n = 3$ — 55.8 %; при $n = 4$ — 22.5 % и при $n = 5$ менее 10 %. То есть для модели пятой степени при использовании равномерного плана для достижения той же точности требуется провести более чем в 10 (!) раз больше измерений, чем при использовании D-оптимального плана. Данные результаты подтверждают целесообразность использования D-оптимальных планов на практике.

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. Schwabe R. *Optimum designs for multi-factor models*. New York, Springer Verlag (1996).

5. Ермаков С. М. *Математическая теория планирования эксперимента*. Москва, Наука (1983).

6. Зедгинидзе И. Г. *Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем*. Москва, Наука (1976).

7. Melas V. B., Pepelyshev A., Cheng R. Designs for estimating an extremal point of quadratic regression models in a hyperball. *Metrika* **58**, 193–208 (2003).

8. Dette H., Melas V. B., Pepelyshev A. N. Optimal designs for three-dimensional shape analysis with spherical harmonic descriptors. *Ann. Statist.* **33** (6), 2758–2788 (2005).

9. Castro Y. De, Gamboa F., Henrion D., Hess R., Lasserre J.-B. Approximate optimal designs for multivariate polynomial regression. *Ann. Statist.* **47** (1), 127–155 (2019).

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. Мелас В. Б., Шпилев П. В. Исследование свойства избыточности L-оптимального плана для модели Лэйбла. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **9** (67), вып. 3, 495–505 (2022). https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.310

13. Kiefer J. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Annals of Statistics* **2**, 849–879 (1974).

Статья поступила в редакцию 25 ноября 2023 г.;
доработана 6 декабря 2023 г.;
рекомендована к печати 22 февраля 2024 г.

Контактная информация:

Шпилев Петр Валерьевич — канд. физ.-мат. наук, доц.; pitshp@hotmail.com, p.shpilev@spbu.ru

D-optimal designs for a two-dimensional polynomial model*

P. V. Shpilev

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

For citation: Shpilev P. V. D-optimal designs for a two-dimensional polynomial model. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2024, vol. 11 (69), issue 3, pp. 537–548. https://doi.org/10.21638/spbu01.2024.310 (In Russian)

The influence of an affine transformation of the design space on the number of support points in the D-optimal design has been studied for a two-dimensional polynomial regression model. For a full rank model of degree n, a result was obtained that determines the structure of the D-optimal plan. It is proven that for a region of design space that is symmetric about zero, the optimal plan is symmetric as well. This result allows for a significant reduction in the dimensionality of the optimization problem and forms the basis of an algorithm developed by the author for finding D-optimal plans for models of incomplete rank in non-symmetric design regions. The D-efficiency of designs concentrated at equidistant points was investigated.

Keywords: multivariate regression models, two-dimensional polynomial regression models, D-optimal designs, D-efficiency.

*The research was funded by the Russian Science Foundation and the St. Petersburg Science Foundation joint grant no. 23-21-10013, https://rscf.ru/project/23-21-10013/.

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. Schwabe R. *Optimum designs for multi-factor models.* New York, Springer Verlag (1996).

5. Ermakov S. M. *Mathematical Theory of Experimental Design.* Moscow, Nauka Publ. (1983). (In Russian)

6. Zedginidze I. G. *Experimental Design for the Study of Multicomponent Systems.* Moscow, Nauka Publ. (1976). (In Russian)

7. Melas V. B., Pepelyshev A., Cheng R. Designs for estimating an extremal point of quadratic regression models in a hyperball. *Metrika* **58**, 193–208 (2003).

8. Dette H., Melas V. B., Pepelyshev A. N. Optimal designs for three-dimensional shape analysis with spherical harmonic descriptors. *Ann. Statist.* **33** (6), 2758–2788 (2005).

9. Castro Y. De, Gamboa F., Henrion D., Hess R., Lasserre J.-B. Approximate optimal designs for multivariate polynomial regression. *Ann. Statist.* **47** (1), 127–155 (2019).

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. Melas V. B., Shpilev P. V. Study of the Excess Property of the L-Optimal Design for the Label Model. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **9** (67), iss. 3, 495–505 (2022). https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.310 (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **55**, iss. 3, 313–320 (2022). https://doi.org/10.1134/S1063454122030128].

13. Kiefer J. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Annals of Statistics* **2**, 849–879 (1974).

Received: November 25, 2023
Revised: December 6, 2023
Accepted: February 22, 2024

Author's information:

Petr V. Shpilev — pitshp@hotmail.com, p.shpilev@spbu.ru