

Робастные планы для дискриминации тригонометрических регрессионных моделей*

В. Б. Мелас, П. В. Шпилев, О. Ю. Николаева

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

Для цитирования: Мелас В. Б., Шпилев П. В., Николаева О. Ю. Робастные планы для дискриминации тригонометрических регрессионных моделей // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2019. Т. 6 (64). Вып. 1. С. 98–109. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2019.107>

Данная работа посвящена задаче построения робастных T-оптимальных планов для дискриминации двух тригонометрических регрессионных моделей, отличающихся не более, чем тремя старшими членами. Для решения этой задачи в работе используются байесовский и стандартизированный максиминный подходы. В ряде специальных случаев робастные T-оптимальные дискриминационные планы найдены в явном виде. В общем случае, в силу высокой сложности оптимизационной задачи, соответствующий план нелегко найти в явном виде, но он может быть найден численно. Результаты проиллюстрированы примерами.

Ключевые слова: робастные T-оптимальные планы, стандартизированные максиминные планы, байесовские планы, тригонометрические модели, задачи дискриминации.

1. Введение. Большинство работ по теории планирования регрессионных экспериментов посвящено задачам построения планов, позволяющих оценить наиболее точно в некотором, строго определенном смысле один или нескольких неизвестных параметров заданной модели. Вместе с тем на практике, например в экспериментах в области химической кинетики (см. [1–3]), возникают ситуации, когда исследователю требуется выбрать одну наиболее подходящую модель из некоторого множества альтернатив. Хорошо известно, что разумно определенный экспериментальный план позволяет увеличить мощность теста по проверке гипотезы о предпочтении одной модели перед другими. Для решения этой задачи предлагались разные критерии оптимальности. Одним из наиболее распространенных является T-критерий, введенный в работах [4, 5].

T-оптимальные планы рассматривались в значительном количестве работ (см., например, [3, 6, 7] или [8]). Однако до последнего времени построение таких планов осуществлялось численными методами, за исключением самых простейших моделей и случая аппроксимации многочленов m -й степени многочленами $(m - 1)$ -й степени. Недавно в работах [9] и [10] были аналитически изучены T-оптимальные планы для дискриминации двух полиномиальных моделей, отличающихся на два порядка, а также, для дискриминации двух тригонометрических моделей, отличающихся не более, чем тремя старшими членами. Однако у T-оптимальных планов есть существенное ограничение: они являются локально-оптимальными, т. е. зависят от значения оцениваемого параметра, и уже в пионерской работе [4] было предложено

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 17-01-00161-а).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2019

изучать планы, оптимальные в смысле байесовского и минимаксного (максиминно-го) подхода.

В работе [11] исследованы байесовские и стандартизированные максиминно-Т-оптимальные планы для дискриминации двух полиномиальных моделей, отличающихся на два порядка. В ряде случаев планы были найдены в явном виде. Полученное решение основано на теореме об оптимальных планах для оценивания двух старших коэффициентов полиномиальной модели, полученной в работе [12], и изучения вспомогательной максиминной задачи.

В настоящей работе исследуются робастные (байесовские и стандартизированные максиминно-эффективные) планы для дискриминации двух тригонометрических моделей. Построение во многом аналогично решению задач для полиномиальных моделей (а в ряде случаев получается заменой аргумента). Поэтому в разделе 3 мы дадим краткое изложение результатов, уже полученных в [11] для полиномиальных моделей. Для тригонометрических моделей, отличающихся двумя старшими членами, получено аналитическое решение задачи. Для тригонометрических моделей, отличающихся тремя старшими членами, в ряде случаев удается установить связь с полиномиальной моделью и использовать соответствующие результаты. В общем случае, в силу сложности задачи, оптимальные планы предлагается находить с помощью численных методов.

2. Постановка задачи дискриминации моделей. Пусть результаты эксперимента описываются функцией регрессии:

$$y = \eta(x, \theta) + \varepsilon, \quad x \in \mathfrak{X},$$

где \mathfrak{X} — множество планирования эксперимента; $x \in \mathfrak{X}$ — условие проведения эксперимента; $\eta(x, \theta)$ — есть либо $\eta_1(x, \theta_1)$, либо $\eta_2(x, \theta_2)$, η_1 и η_2 — две различные непрерывные на \mathfrak{X} функции, заданные с точностью до векторов неизвестных параметров $\theta_1 \in R^{m_1}$; $\theta_2 \in R^{m_2}$; $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ — случайная ошибка.

Результаты различных экспериментов предполагаются независимыми. Под планом ξ понимается вероятностная мера на множестве \mathcal{X} с конечным носителем $\text{supp}(\xi) = (x_1, \dots, x_n)$ и распределением $\omega(\xi) = (\omega_1, \dots, \omega_n)$, определяющим относительные доли (веса) общего числа наблюдений, проводимых в соответствующих точках [13].

Рассмотрим случай

$$\begin{aligned} \eta_1(x, \theta_1) &= \sum_{i=0}^{m_1-1} \theta_{1,i} f_i(x), \\ \eta_2(x, \theta_2) &= \sum_{i=0}^{m_2-1} \theta_{2,i} f_i(x), \quad m_2 < m_1, \end{aligned}$$

где $f_0(x), \dots, f_{m_1-1}(x)$ — линейно независимые функции при $x \in \mathfrak{X}$.

Введем следующие обозначения: $m = m_1 - 1$, $s = m_1 - m_2$, $b = (b_1, \dots, b_s)$ и $q = (q_1, \dots, q_{m-s})$, где $b_i = \theta_{1,m-s+i}$ и $q_j = \theta_{1,j} - \theta_{2,j}$. Определим разность моделей η_1 и η_2 :

$$\bar{\eta}(x, q, b) = \sum_{i=1}^s b_i f_{m-s+i}(x) + \sum_{i=0}^{m-s} q_i f_i(x). \quad (1)$$

Также введем функционал, который определяет аппроксимацию одной модели с помощью другой:

$$R_\xi(b) = \min_{q \in \mathbb{R}^{m-s+1}} \int_{\mathfrak{X}} (\bar{\eta}(x, q, b))^2 \xi(dx). \quad (2)$$

Заметим, что значения параметров b_i , $i = 1, \dots, s$, обычно неизвестны в практических задачах. Вместе с тем, часто можно сделать обоснованные априорные предположения об этих значениях. В связи с этим представляют интерес байесовские оптимальные планы, а также стандартизированные максиминные планы, которые для задач оценивания параметров предлагались в работах [14–17] и многих других. Для дискриминации тригонометрических моделей такие планы, насколько известно авторам, до сих пор не изучались. Соответствующие задачи будут рассмотрены далее. Нам потребуются следующие определения.

Определение 2.1. План ξ^* называется *T-оптимальным планом*, если

$$\xi^* = \arg \max_{\xi} R_\xi(b).$$

Пусть вектор b априорно принадлежит замкнутому множеству $\mathfrak{B} \subset \mathbb{R}^{s-1}$, и на этом множестве задано распределение $\bar{\pi}$.

Определение 2.2. План ξ^* называется *байесовским T-оптимальным планом*, если он максимизирует величину

$$\int_{\mathfrak{B}} R_{\xi^*}(b) \bar{\pi}(db).$$

Обозначим значение $R_{\xi^*}(b)$ на T-оптимальном плане как

$$\bar{R}(b) = \max_{\xi} R_\xi(b) = \min_{q \in \mathbb{R}^{m-1}} \max_{x \in \mathfrak{X}} (\bar{\eta}(x, q, b))^2. \quad (3)$$

С учетом этого, стандартизированный максиминный T-оптимальный план определим следующим образом.

Определение 2.3. План ξ^* называется *стандартизированным максиминным T-оптимальным планом*, если он максимизирует величину *эффективности*

$$\text{eff}(\xi^*) = \inf_{b \in \mathfrak{B}} \frac{R_{\xi^*}(b)}{\bar{R}(b)}. \quad (4)$$

3. Оптимальные планы для дискриминации полиномиальных моделей. Рассмотрим задачу дискриминации двух полиномиальных моделей, отличающихся на два порядка, по результатам наблюдений на промежутке $\mathfrak{X} = [-1, 1]$:

$$\eta(x, \theta_1) = \sum_{i=0}^m \theta_{1,i} x^i, \quad \eta(x, \theta_2) = \sum_{i=0}^{m-2} \theta_{2,i} x^i.$$

Рассмотрим разность этих моделей

$$\bar{\eta}(x, q, b) = x^m + bx^{m-1} + \sum_{i=0}^{m-2} q_i x^i$$

в предположении, что \mathfrak{B} — произвольное замкнутое множество из \mathbb{R} , симметричное относительно нуля, а $\bar{\pi}$ — априорное распределение на множестве \mathfrak{B} , симметричное относительно нуля и имеющее конечное математическое ожидание (как следствие, равное нулю) и конечную дисперсию.

Пусть $m \geq 2$. Определим план $\xi_{Poly,m,\beta}$, зависящий от положительного параметра β , опорные точки которого располагаются в нулях $-1 = x_0 < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m = 1$ многочлена

$$(x^2 - 1)(U_{m-1}(x) + \beta U_{m-3}(x)),$$

где $U_n(x) = \frac{\sin((n+1)\arccos x)}{\sin(\arccos x)}$ — многочлен Чебышёва второго рода, а веса которого равны

$$\omega_0 = \omega_m = \frac{1 + \beta}{2(m + \beta(m - 2))}, \quad \omega_j = \left[m - 1 - \frac{(1 + \beta)U_{m-2}(x_j)}{U_m(x_j) + \beta U_{m-2}(x_j)} \right]^{-1},$$

$$j = 1, \dots, m - 1.$$

При сделанных предположениях в работе [11] доказана следующая теорема.

Теорема 3.1 ([11]). *Справедливы следующие утверждения.*

1. При $\beta = \min\{1, \int b^2 \bar{\pi}(db)\}$ план $\xi_{Poly,m,\beta}$ есть единственный байесовский T -оптимальный план, дискриминирующий модели степеней m и $m - 2$.
2. Обозначим через h^* единственную на интервале $[0, \frac{1}{2}]$ точку максимума функции

$$\inf_{b \in \mathfrak{B}} \frac{b^2 + h}{R(b)}(1 - h).$$

При $\beta = 1 - 2h^*$ план $\xi_{m,\beta}$ есть единственный стандартизированный максиминный T -оптимальный план, дискриминирующий модели степеней m и $m - 2$.

4. Оптимальные планы для дискриминации тригонометрических моделей. Пусть интервал планирования $\chi = [0, 2\pi]$. В качестве моделей $\eta_1(x, \theta_1)$ и $\eta_2(x, \theta_2)$ рассмотрим следующие:

$$\eta_1(x, \theta_1) = \sum_{i=1}^m \theta_{1,2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=0}^m \theta_{1,2i} \cos(ix) \quad (5)$$

и

$$\eta_2(x, \theta_2) = \sum_{i=1}^{k_1} \theta_{2,2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=0}^{k_2} \theta_{2,2i} \cos(ix). \quad (6)$$

Разность (1) в этом случае имеет следующий вид:

$$\bar{\eta}(x, q, \bar{b}) = \sum_{i=1}^{k_1} q_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=0}^{k_2} q_{2i} \cos(ix) +$$

$$+ \sum_{i=1}^{m-k_1} b_{2i-1} \sin((k_1 + i)x) + \sum_{i=1}^{m-k_2} b_{2i} \cos((k_2 + i)x). \quad (7)$$

4.1. Аналитические результаты. В данном подразделе мы рассмотрим специальные случаи, для которых получены аналитические решения:

$$k_1 = k_2 = m - 1,$$

$$k_1 = m - 1, k_2 = m - 2, \quad \begin{cases} b_2 \equiv 1, b_1 \equiv 0, b_4 \neq 0, \\ b_2 \equiv 1, b_1 \neq 0, b_4 \equiv 0, \end{cases} \quad \begin{matrix} (8.1) \\ m - \text{нечетное}, \end{matrix} \quad (8.2)$$

$$k_1 = m - 2, k_2 = m - 1, \quad b_1 \neq 0, b_2 \equiv 1, b_3 \equiv 0, \quad m - \text{четное} \quad (8.3)$$

4.1.1. Случай $k_1 = k_2 = m - 1$. Для данного случая функция (7) принимает вид

$$\bar{\eta}(x, q, \bar{b}) = \sum_{i=1}^{m-1} q_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=0}^{m-1} q_{2i} \cos(ix) + b_1 \sin(mx) + b_2 \cos(mx).$$

В работе [10] показано, что $\bar{R}(b)$ в этом случае имеет вид

$$\bar{R}(b) = b_1^2 + b_2^2.$$

Функцию эффективности (4) можно переписать следующим образом:

$$\text{eff}(\xi) = \inf_{b \in \mathfrak{B}} \min_{q \in \mathbb{R}^{2m-1}} \int_{\mathfrak{X}} \frac{(b_1 \sin(mx) + b_2 \cos(mx) + Q(x))^2}{b_1^2 + b_2^2} \xi(dx), \quad (9)$$

где $Q(x)$ — тригонометрический многочлен степени не выше $m - 1$. В работе [10, теорема 3.1] показано, что минимум по q достигается при $Q(x) \equiv 0$.

Теорема 4.1. Пусть $k_1 = k_2 = m - 1$. Справедливы следующие утверждения.

1. При $\mathfrak{B} = [-d, d] \times [-d, d] \setminus \{0, 0\}, d \in (0, \infty)$ D -оптимальный план

$$\xi_1^* = \left(\begin{array}{ccc} x_1 & \cdots & x_{2m+1} \\ \frac{1}{2m+1} & \cdots & \frac{1}{2m+1} \end{array} \right), \quad \text{где } x_{2i-1} = \frac{2\pi(i-1)}{2m+1}, \quad i = 1, \dots, 2m+1,$$

является стандартизированным максиминным T -оптимальным планом, дискриминирующим модели (5) и (6). Функция эффективности имеет вид $\text{eff}(\xi_1^*) \equiv \frac{1}{2}$.

2. При $\mathfrak{B} = [c, d] \times [c, d], c, d \in (-\infty, 0) \vee c, d \in (0, \infty)$ план

$$\xi_2^* = \left(\begin{array}{ccc} x_1 & \cdots & x_{2m} \\ \frac{1}{2m} & \cdots & \frac{1}{2m} \end{array} \right), \quad \text{где}$$

$$x_i = \frac{\pi}{4m} + \frac{\pi}{m}(i-1), \quad i = 1, \dots, 2m,$$

является стандартизированным максиминным T -оптимальным планом, дискриминирующим модели (5) и (6). Функция эффективности определяется равенством

$$\text{eff}(\xi_2^*) = \frac{1}{2} + \frac{cd}{c^2 + d^2}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 4.1. Введем следующие обозначения:

$$\sin(\alpha) = \frac{b_1}{\sqrt{b_1^2 + b_2^2}}, \quad \cos(\alpha) = \frac{b_2}{\sqrt{b_1^2 + b_2^2}}. \quad (10)$$

1. Пусть $\mathfrak{B} = [-d, d] \times [-d, d] \setminus \{0, 0\}$, $d \in (0, \infty)$. В этом случае (9) (в силу (10), тождества $Q(x) \equiv 0$ и известной формулы $\cos(a - b) = \sin(a)\sin(b) + \cos(a)\cos(b)$) можно переписать следующим образом:

$$\text{eff}(\xi) = \inf_{\alpha \in [0, \pi]} \sum_{i=1}^n (\cos(\alpha - mx_i))^2 \omega_i.$$

Воспользуемся формулой $\cos^2(t) = \frac{1}{2}(1 + \cos(2t))$ и заметим, что для любых x_1, x_2 выполнено неравенство

$$\inf_{\alpha \in [0, \pi]} (\cos^2(\alpha - x_1) + \cos^2(\alpha - x_2)) \leq 1 + \inf_{\alpha' \in [0, 2\pi]} \frac{1}{2} (\cos(\alpha') + \cos(\alpha' - x'_1)) \leq 1,$$

где $\alpha' = 2\alpha - 2x_2$, $x'_1 = 2x_1 - 2x_2$; причем равенство достигается тогда и только тогда, когда $x'_1 = \pi \pmod{2\pi}$, что равносильно $x_1 = x_2 + \frac{\pi}{2} \pmod{\pi}$.

С другой стороны, для любых x_1, x_2, x_3 выполнено неравенство

$$\begin{aligned} \inf_{\alpha \in [0, \pi]} (\cos^2(\alpha - x_1) + \cos^2(\alpha - x_2) + \cos^2(\alpha - x_3)) &\leq \\ \leq \frac{3}{2} + \inf_{\alpha' \in [0, 2\pi]} \underbrace{\frac{1}{2} (\cos(\alpha' - x'_1) + \cos(\alpha') + \cos(\alpha' - x'_3))}_{\text{обозначим за } P(\alpha')} &= \frac{3}{2} + \inf_{\alpha' \in [0, 2\pi]} P(\alpha') \leq \frac{3}{2}, \end{aligned}$$

где $\alpha' = 2\alpha - 2x_2$, $x'_1 = 2x_1 - 2x_2$, $x'_3 = 2x_3 - 2x_2$; причем равенство достигается тогда и только тогда, когда $x'_1 = -\frac{2\pi}{3} \pmod{2\pi}$, $x'_3 = \frac{2\pi}{3} \pmod{2\pi}$ (в силу того, что $\cos(\alpha' - \frac{2\pi}{3}) + \cos(\alpha' + \frac{2\pi}{3}) = 2\cos(\alpha')\cos(\frac{2\pi}{3}) = -\cos(\alpha')$), что равносильно $x_1 = x_2 - \frac{\pi}{3} \pmod{\pi}$, $x_3 = x_2 + \frac{\pi}{3} \pmod{\pi}$.

Из этого следует (доказательство по индукции), что

$$\inf_{\alpha \in [0, \pi]} \sum_{i=1}^n (\cos(\alpha - mx_i))^2 \leq \frac{n}{2} \Rightarrow \text{eff}(\xi) \leq \frac{n}{2} \cdot \frac{1}{n} = \frac{1}{2}.$$

Путем несложных вычислений можно убедиться, что $\text{eff}(\xi_1^*) = \frac{1}{2}$. Пункт 1 доказан.

2. Пусть $\mathfrak{B} = [c, d] \times [c, d]$, $c, d \in (-\infty, 0) \vee c, d \in (0, \infty)$. В этом случае оптимальным является план, доставляющий максимум выражению

$$\begin{aligned} \text{eff}(\xi) &= \inf_{\alpha \in [c_1, d_1]} \sum_{i=1}^n (\cos(\alpha - mx_i))^2 \omega_i, \\ c_1 &= \arccos\left(\frac{|d|}{\sqrt{c^2 + d^2}}\right), \quad d_1 = \arccos\left(\frac{|c|}{\sqrt{c^2 + d^2}}\right). \end{aligned}$$

Заметим, во-первых, что $(c_1 + d_1)/2 = \pi/4$. Отметим также, что в силу монотонности косинуса на интервале $[c_1, d_1]$, для любого x и $m > 0$ выполнено неравенство

$$\inf_{\alpha \in [c_1, d_1]} \cos(\alpha - mx)^2 \leq \cos\left(c_1 - \frac{d_1 + c_1}{2}\right)^2 = \cos\left(c_1 - \frac{\pi}{4}\right)^2 = \frac{1}{2} + \frac{cd}{c^2 + d^2},$$

причем равенство достигается тогда и только тогда, когда $x = \frac{\pi}{4m} \pmod{\frac{\pi}{m}}$.

Теорема 4.1 доказана. \square

4.1.2. Случаи $k_1 = m - 1$, $k_2 = m - 2$ и $k_1 = m - 2$, $k_2 = m - 1$. В работе [11] показано, что не умаляя общности можно считать, что один из коэффициентов, скажем, b_2 тождественно равен 1. С учетом этого замечания для данных случаев функция (7) принимает вид

$$\bar{\eta}(x, q, \bar{b}) = \sum_{i=1}^{m-1} q_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=0}^{m-2} q_{2i} \cos(ix) + b_1 \sin(mx) + \cos((m-1)x) + b_4 \cos(mx)$$

и

$$\bar{\eta}(x, q, \bar{b}) = \sum_{i=1}^{m-2} q_{2i-1} \sin(ix) + \sum_{i=0}^{m-1} q_{2i} \cos(ix) + b_1 \sin((m-1)x) + b_3 \sin(mx) + \cos(mx)$$

соответственно. Рассмотрим план

$$\xi_{Trig, \alpha} = \begin{pmatrix} \varphi_m + \alpha & \dots & \varphi_1 + \alpha & \varphi_0 + \alpha & 2\pi - \varphi_1 + \alpha & \dots & 2\pi - \varphi_{m-1} + \alpha \\ 2p_m & \dots & p_1 & 2p_0 & p_1 & \dots & p_{m-1} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где $\varphi_i = \arccos(x_i)$, $p_i = \frac{1}{2}\omega_i$, $i = 0, \dots, m$; x_i и ω_i — точки и веса плана $\xi_{Poly, m, \beta}$. Имеет место следующая теорема.

Теорема 4.2. *Предположим, что $b_i \in I = [-d, d]$, $d \in (0, \infty)$, $i = 1, 3, 4$, а $\bar{\pi}$ — априорное распределение на I , симметричное относительно нуля и имеющее конечное математическое ожидание и конечную дисперсию. Тогда справедливы следующие утверждения.*

1. При $\beta = \min\{1, \int 4b_i^2 \bar{\pi}(db)\}$, если имеет место один из случаев (8.1), (8.2) или (8.3), то план $\xi_{Trig, 0}$ (для случая (8.1)) (или план $\xi_{Trig, \frac{\pi}{2}}$ для случаев (8.2) и (8.3)) является байесовским T -оптимальным планом, дискриминирующим модели (5) и (6).
2. Обозначим через h^* единственную на интервале $[0, \frac{1}{2}]$ точку максимума функции

$$\inf_{b_i \in I} \frac{4b_i^2 + h}{R(b)} (1 - h). \quad (12)$$

При $\beta = 1 - 2h^*$, если имеет место один из случаев (8.1), (8.2) или (8.3), то план $\xi_{Trig, 0}$ (для случая (8.1)) (или план $\xi_{Trig, \frac{\pi}{2}}$ для случаев (8.2) и (8.3)) является стандартизированным максиминным T -оптимальным планом, дискриминирующим модели (5) и (6).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 4.2. Как показано в работе [11], в случае, когда интервал I симметричный, оптимальный план принадлежит классу симметричных

планов. С другой стороны, в работе [18] доказано, что для тригонометрической модели информационная матрица симметричного плана ξ после соответствующего преобразования $P \in R^{2m+1 \times 2m+1}$ представима в виде блочно-диагональной:

$$\widetilde{M}(\xi) = PM(\xi)P = \begin{pmatrix} M_s(\xi) & 0 \\ 0 & M_c(\xi) \end{pmatrix},$$

где

$$M_c(\xi) = \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos(it) \cos(jt) d\xi(t) \right)_{i,j=0}^m, \quad M_s(\xi) = \left(\int_{-\pi}^{\pi} \sin(it) \sin(jt) d\xi(t) \right)_{i,j=1}^m.$$

Рассмотрим для определенности случай (8.1) и план $\xi_{Trig,0}$. В остальных случаях доказательство проводится аналогично. Обозначим

$$\begin{aligned} f_{(1)}(x) &= (1, \cos(x), \dots, \cos(x)^{m-2})^T, \quad f_{(2)}(x) = (\cos(x)^{m-1}, \cos(x)^m)^T, \\ M_{ij}(\xi) &= \int f_{(i)}(x) f_{(j)}^T(x) \xi(dx), \quad i, j = 1, 2, \\ \widetilde{M}_c(\xi) &= \begin{pmatrix} M_{11}(\xi) & M_{12}(\xi) \\ M_{21}(\xi) & M_{22}(\xi) \end{pmatrix}, \\ M_{(s)}(\xi) &= M_{22}(\xi) - X^T M_{11}(\xi) X, \end{aligned}$$

где X — любое решение уравнения $M_{11}(\xi)X = M_{12}(\xi)$. (Если это уравнение не имеет решения, матрица $M_{(s)}(\xi)$ остается неопределенной.) Заметим, что

$$R_\xi(b) = \min_{q \in R^{2m-2}} (q_s^T, q_c^T, 1, b_4) \widetilde{M}(\xi) (q_s^T, q_c^T, 1, b_4)^T,$$

где q_s и q_c компоненты вектора q , соответствующие блокам $M_s(\xi)$ и $M_c(\xi)$.

В работе [10, формула 3.15] показано, что существует такой вектор $(\widetilde{q}_c^T, 1, 2b_4)^T$, что

$$(q_c^T, 1, b_4) M_c(\xi) (q_c^T, 1, b_4)^T = (\widetilde{q}_c^T, 1, 2b_4) \widetilde{M}_c(\xi) (\widetilde{q}_c^T, 1, 2b_4)^T.$$

Из вышесказанного и формулы (3.9) работы [11] следует, что

$$R_\xi(b) = \min_{q \in R^{2m-2}} (q_s^T, q_c^T, 1, b_4) \widetilde{M}(\xi) (q_s^T, q_c^T, 1, b_4)^T = (1, 2b_4) M_{(s)}(\xi) (1, 2b_4)^T.$$

В работе [11] показано, что для полиномиальной регрессии максимум достигается при $\xi = \xi_{Poly,m,\beta}$. Используя формулу $\cos(\arccos(x)) = x$, получаем, что $M_{(s)}(\xi_{Trig,0})$ совпадает с соответствующей матрицей для полиномиальной модели.

С учетом вышесказанного, остальные утверждения теоремы 4.2 следуют из теоремы 3.1. Теорема 4.2 доказана. \square

В таблице представлены решения (12) для некоторых значений m (порядок модели) и d (длина интервала). Для получения данных результатов использовалась среда MATLAB, пакет «Optimization Toolbox».

4.2. Пример построения робастного плана в общем случае. В общем случае нахождение максиминных и байесовских планов — сложная вычислительная

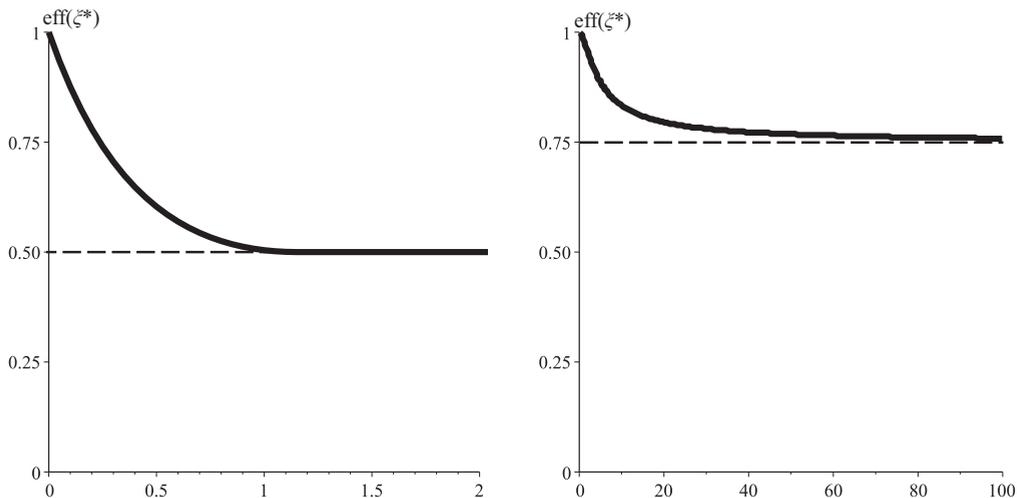


Рис. 1. Поведение функции эффективности (4) для плана $\xi_{[-d,d]}^*$ (слева) и плана $\xi_{[0,d]}^*$ (справа).

Максиминные Т-оптимальные планы для случая (8.1)

m	Вид плана $\xi_{Trig,0}$	h^*	I
2	$\begin{pmatrix} 0 & 1.57 & 3.14 & 4.71 \\ 0.32 & 0.18 & 0.32 & 0.18 \end{pmatrix}$	0.36	$[-2, 2]$
3	$\begin{pmatrix} 0 & 1.14 & 2 & 3.14 & 4.28 & 5.14 \\ 0.197 & 0.152 & 0.151 & 0.197 & 0.151 & 0.152 \end{pmatrix}$	0.349	$[-1, 1]$
4	$\begin{pmatrix} 0 & 0.87 & 1.57 & 2.27 & 3.14 & 4.01 & 4.71 & 5.41 \\ 0.143 & 0.129 & 0.1 & 0.128 & 0.143 & 0.128 & 0.1 & 0.129 \end{pmatrix}$	0.328	$[-1, 1]$

задача, решение которой может быть найдено численными методами. В данном разделе мы рассмотрим простейший пример, когда функция $\bar{\eta}(x, q, b)$ не представима в виде полинома от x и оптимальный план нельзя найти с помощью теоремы 4.2.

Рассмотрим в качестве разности (1) следующую функцию:

$$\bar{\eta}(x, b, q) = \sin(2x) + b \cos(x) + q.$$

Путем несложных, но достаточно громоздких вычислений, проведенных в пакете Maple (для нахождения решения системы соответствующих уравнений), получаем

$$\xi_{[-d,d]}^* = \begin{pmatrix} t_1 & \pi - t_1 & \pi + t_1 & 2\pi - t_1 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \quad t_1 = \begin{cases} \arccos(|\frac{1}{4}\sqrt{2d^2 + 8}|), & d \leq \frac{2}{\sqrt{3}}, \\ \arccos\left(\left|\sqrt{\frac{2}{3}}\right|\right), & d > \frac{2}{\sqrt{3}}, \end{cases}$$

$$\xi_{[0,d]}^* = \begin{pmatrix} t_2(d) & \pi - t_2(d) \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \text{где } t_2(d) \text{ — некоторая функция от } d.$$

Функция $t_2(d)$ представима в явном виде, но выражение слишком громоздко, чтобы приводить его здесь. План $\xi_{[-d,d]}^*$ является стандартизированным максиминным Т-оптимальным планом для $b \in [-d, d]$, $d \in (0, \infty)$, план $\xi_{[0,d]}^*$ — для $b \in [0, d]$,

$d \in (0, \infty)$. Поведение функции эффективности (4) для этих планов отображено на рис. 1. Эффективность плана $\xi_{[0,d]}^*$ в своем классе выше, чем у $\xi_{[-d,d]}^*$. Это связано с тем, что для $b \in [0, d]$, $d \in (0, \infty)$, стандартизированный максиминный план оказывается близок к T -оптимальному, который также является двух-точечным. Отметим, что исследование эффективности планов, полученных по теореме 3.1, дало похожие результаты (см. Figure 2 в работе [11]).

Литература

1. Atkinson A., Bogacka B., Bogacki M. D- and t-optimum designs for the kinetics of a reversible chemical reaction // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 1998. Vol. 43. P. 185–198.
2. Asprey S., Macchietto S. Statistical tools for optimal dynamic model building // *Computers and Chemical Engineering*. 2000. Vol. 24. P. 1261–1267.
3. Uciniski D., Bogacka B. T-optimum designs for discrimination between two multiresponse dynamic models // *Journal of the Royal Statistical Society. Ser. B*. 2005. Vol. 67. P. 3–18.
4. Atkinson A. C., Fedorov V. V. The designs of experiments for discriminating between two rival models // *Biometrika*. 1975. Vol. 62. P. 57–70.
5. Atkinson A. C., Fedorov V. V. Optimal design: Experiments for discriminating between several models // *Biometrika*. 1975. Vol. 62. P. 289–303.
6. Wiens D. P. Robust discrimination designs, with Matlab code // *Journal of the Royal Statistical Society. Ser. B*. 2009. Vol. 71. P. 805–829.
7. Tommasi C., López-Fidalgo J. Bayesian optimum designs for discriminating between models with any distribution // *Computational Statistics & Data Analysis*. 2010. Vol. 54, no. 1. P. 143–150.
8. 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*. 2008. Vol. 138. P. 132–144.
9. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. T-optimal designs for discrimination between two polynomial models // *Annals of Statistics*. 2012. Vol. 40, no. 1. P. 188–205.
10. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. T-optimal discriminating designs for fourier regression models. // *Computational Statistics and Data Analysis*. 2017. Vol. 113. P. 196–206.
11. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Robust T-optimal discriminating designs // *Annals of Statistics*. 2013. Vol. 41, no. 1. P. 1693–1715.
12. Gaffke N. Further characterizations of design optimality and admissibility for partial parameter estimation on linear regression // *Annals of Statistics*. 1987. Vol. 15, no. 3. P. 942–957.
13. Pukelsheim F. *Optimal Design of Experiments*. Philadelphia: SIAM, 2006.
14. Mueller C., Pazman A. Applications of necessary and sufficient conditions for maximin efficient designs // *Metrika*. 1998. Vol. 48. P. 1–19.
15. Dette H., Neugebauer H. Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models // *Journal of Statistical Planning and Inference*. 1996. Vol. 52. P. 17–31.
16. Dette H., Neugebauer H. Bayesian d-optimal designs for exponential regression models // *Journal of Statistical Planning and Inference*. 1997. Vol. 60. P. 331–349.
17. Dette H. Designing experiments with respect to “standardized” optimality criteria // *Journal of the Royal Statistical Society*. 1997. Vol. 59. P. 97–110.
18. Dette H., Melas V. B., Shpilev P. Optimal designs for trigonometric regression models // *Journal of Statistical Planning and Inference*. 2011. Vol. 141, no. 3. P. 1343–1353.

Статья поступила в редакцию 25 августа 2018 г.;
после доработки 13 сентября 2018 г.;
рекомендована в печать 27 сентября 2018 г.

Контактная информация:

Мелас Вячеслав Борисович — д-р физ.-мат. наук, проф.; vbmelas@post.ru
Шпилев Петр Валерьевич — канд. физ.-мат. наук, доц.; p.shpilev@spbu.ru
Николаева Ольга Юрьевна — студент; torbeeva.olya@yandex.ru

Robust designs for discriminating between trigonometric regression models

V. B. Melas, P. V. Shpilev, O. Yu. Nikolaeva

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

For citation: Melas V. B., Shpilev P. V., Nikolaeva O. Yu. Robust designs for discriminating between trigonometric regression models. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2019, vol. 6(64), issue 1, pp. 98–109. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2019.107> (In Russian)

The paper is devoted to the problem of constructing robust T-optimal discriminating experimental designs for two competing trigonometric regression models, which differ by at most three trigonometric functions. To solve this problem we propose to use a Bayesian and standardized maximin approaches. In a number of special cases the robust T-optimal discriminating designs were found explicitly. In general case because of the complexity of the optimization problem, the corresponding optimal designs are not easy to find and have to be determined numerically. The results are illustrated in several examples.

Keywords: robust T-optimal designs; standardized maximin designs; Bayesian designs; trigonometric regression models; discriminating problems.

References

1. 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).
2. Asprey S., Macchietto S., “Statistical tools for optimal dynamic model building”, *Computers and Chemical Engineering* **24**, 1261–1267 (2000).
3. Uciniski 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).
4. Atkinson A. C., Fedorov V. V., “Optimal design: Experiments for discriminating between several models”, *Biometrika* **62**, 289–303 (1975).
5. Atkinson A. C., Fedorov V. V., “The designs of experiments for discriminating between two rival models”, *Biometrika* **62**, 57–70 (1975).
6. Wiens D. P., “Robust discrimination designs, with Matlab code”, *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B* **71**, 805–829 (2009).
7. Tommasi C., López-Fidalgo J., “Bayesian optimum designs for discriminating between models with any distribution”, *Computational Statistics & Data Analysis* **54**(1), 143–150 (2010).
8. 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).
9. Dette H., Melas V. B., Shpilev P., “T-optimal designs for discrimination between two polynomial models”, *Annals of Statistics* **40**(1), 188–205 (2012).
10. Dette H., Melas V. B., Shpilev P., “T-optimal discriminating designs for fourier regression models”, *Computational Statistics and Data Analysis* **113**, 196–206 (2017).
11. Dette H., Melas V. B., Shpilev P., “Robust T-optimal discriminating designs”, *Annals of Statistics* **41**(1), 1693–1715 (2013).
12. Gaffke N., “Further characterizations of design optimality and admissibility for partial parameter estimation on linear regression”, *Annals of Statistics* **15**(3), 942–957 (1987).
13. Pukelsheim F., *Optimal Design of Experiments* (SIAM, Philadelphia, 2006).
14. Mueller C., Pazman A., “Applications of necessary and sufficient conditions for maximin efficient designs”, *Metrika* **48**, 1–19 (1998).
15. Dette H., Neugebauer H., “Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models”, *Journal of Statistical Planning and Inference* **52**, 17–31 (1996).
16. Dette H., Neugebauer H., “Bayesian d-optimal designs for exponential regression models”, *Journal of Statistical Planning and Inference* **60**, 331–349 (1997).

17. Dette H., “Designing experiments with respect to ”standardized” optimality criteria”, *Journal of the Royal Statistical Society* **59**, 97–110 (1997).
18. Dette H., Melas V. B., Shpilev P., “Optimal designs for trigonometric regression models”, *Journal of Statistical Planning and Inference* **141**(3), 1343–1353 (2011).

Received: August 25, 2018
Revised: September 13, 2018
Accepted: September 27, 2018

Author's information:

Viatcheslav B. Melas — vbmelas@post.ru

Petr V. Shpilev — p.shpilev@spbu.ru

Olga Yu. Nikolaeva — torbeeva.olya@yandex.ru