

ИЗБЫТОЧНОСТЬ ЛОКАЛЬНО D -ОПТИМАЛЬНЫХ ПЛАНОВ И ГОМОТЕТИИ*

Ю. Д. Григорьев¹, В. Б. Мелас², П. В. Шпилев²

¹ С.-Петербургский государственный электротехнический университет им. В. И. Ульянова (Ленина), Российская Федерация, 197376, Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, 5

² Санкт-Петербургский государственный университет, Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Статья посвящена исследованию влияния гомотетии области планирования на число опорных точек оптимального плана при фиксированных значениях параметров регрессионной модели. Рассматривается двумерная, нелинейная по параметрам модель Эйна—Петерса, которая используется в аналитической химии. Показано, что в зависимости от некоторых условий число опорных точек оптимального плана может быть больше или равно числу параметров модели. Планы с минимальным числом точек найдены в явном виде. Для нахождения планов с большим числом точек (в статье такие планы предлагается называть *избыточными*) используются численные алгоритмы. Библиогр. 16 назв. Ил. 2. Табл. 2.

Ключевые слова: избыточный план, локально D -оптимальные планы, преобразование гомотетии, модель Эйна—Петерса, метод исключения.

1. Введение. В серии работ [1–4] рассмотрен вопрос о переносе на нелинейный случай знаменитого результата де ла Гарза [5] об условиях, при которых число n опорных точек в оптимальных планах ξ для одномерных линейных моделей регрессии минимально, т. е. совпадает с числом p неизвестных параметров $\theta \in \Theta \subseteq R^p$ модели $\eta(x, \theta)$. В частности, в [5] показано, что для полиномиальных моделей регрессии D -оптимальные планы всегда являются насыщенными. В работе [6] этот результат назван *феноменом де ла Гарза*. С другой стороны, для нелинейных по параметрам моделей нередки случаи, в которых появляются оптимальные планы с числом опорных точек $n > p$. По аналогии с Хури мы предлагаем называть такие случаи *феноменом избыточности*, а сами планы — *избыточными*.

В работах [1, 3] сформулированы достаточные условия для определения верхней границы числа опорных точек в оптимальных планах $\xi = \xi(\theta)$, которая, как правило, меньше вытекающей из теоремы Каратеодори оценки $n = p(p + 1)/2$ для D -оптимальных планов. В ряде случаев метод Янга прямо приводит к выводу, что локально оптимальный план $\xi = \xi(\theta)$ для рассматриваемой модели является насыщенным. Понизить верхнюю оценку для числа опорных точек в методе Янга—Стафкена удается за счет анализа структуры элементов информационной матрицы. Очевидно, что если среди них есть одинаковые элементы или они обладают некоторыми специфическими свойствами, то учет этой информации приводит к понижению верхней оценки.

Принципиальное ограничение, связанное с методом Янга—Стафкена и его уточнениями, состоит в том, что данный метод применим только для одномерных моделей регрессии, т. е. для моделей с одной объясняющей переменной $x \in \mathcal{X} \subseteq R^1$, в то время как многие модели регрессии, используемые на практике, являются многомерными.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 17-01-00267-а, 17-01-00161-а) и СПбГУ (проект «Актуальные проблемы планирования и анализа для регрессионных моделей», 6.38.435.2015).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2017

В большой степени это связано с тем, что в многомерном случае не существует чебышёвских систем функций [4].

Аналогичный феномен избыточности оптимальных планов хорошо известен в байесовском и максимин-оптимальном подходах к планированию. В данном случае в дополнение к указанным причинам избыточности для локально оптимальных планов этот феномен связан как со свойствами пространства параметров Θ , так и с заданным на нем априорным распределением параметров $\pi(\theta)$. Феномен избыточности для байесовских планов на эмпирическом уровне подробно исследован в [7], где на примере логистической модели и равномерного относительного опорных точек априорного распределения $\pi(\theta)$ показано увеличение числа точек плана $\xi(\theta)$ при возрастании дисперсии $D_{\pi}\theta$ априорного распределения. Там же приводятся ссылки и на более ранние работы, в которых равномерное распределение рассматривалось в более простом варианте: равномерными предполагались не только спектр плана, но и веса опорных точек.

Феномен избыточности имеет место и при локально оптимальном планировании для многомерных моделей. Цель настоящей статьи заключается в исследовании этого феномена на примере двумерной модели Эйена—Петерса [8]. Данная модель используется для описания каталитических реакций. С позиций последовательного D -оптимального планирования эксперимента эта модель изучалась, в частности, в книге Химмельблау [9, пример 8.4.2]. Однако ни аналитический вид оптимального плана, ни феномен избыточности для этой модели не исследовались. В нашей работе мы показываем, что в случае некоторых гомотетий $T: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}'$ области планирования \mathcal{X} насыщенные локально D -оптимальные планы для двумерной модели могут становиться избыточными и наоборот.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 приводятся основные теоретические сведения — теорема эквивалентности для локально D -оптимальных планов и определение преобразования гомотетии, и ставится задача исследования феномена избыточности при преобразованиях гомотетии области планирования. В разделе 3 исследуются локально D -оптимальные планы для модели Эйена—Петерса, иллюстрирующие идею избыточности. В разделе 4 обсуждается вычислительный аспект построения избыточных планов, описываются численные методы построения локально D -оптимальных планов. В разделе 5 приводятся заключительные замечания на основе полученных в статье результатов.

2. Теорема эквивалентности и преобразования гомотетии. Пусть

$$E(y|x) = \eta(x, \theta), \quad x \in \mathcal{X} \subset R^k, \quad \theta \in \Theta \subset R^p, \quad (1)$$

— модель наблюдений, в которой y — скалярная случайная величина, принадлежащая экспоненциальному семейству распределений, $\theta \in \Theta \subset R^p$ — неизвестный параметр, $x \in \mathcal{X} \subset R^k$ — независимая переменная, принимающая значения в компактном множестве \mathcal{X} , $\eta: R^k \rightarrow R^1$ — заданная функция регрессии. Предполагаем, что наблюдения y , проводимые в различных точках x области планирования \mathcal{X} , независимы, а $\sigma^2 > 0$ — дисперсия наблюдений y , одинаковая для всех точек $x \in \mathcal{X}$. Всюду далее, для краткости, полагаем $\sigma^2 = 1$.

Непрерывный план ξ для модели (1) — это вероятностная мера на множестве \mathcal{X} с конечным носителем (спектром) $\text{supp}(\xi) = (x_1, \dots, x_n)$ и распределением $\omega(\xi) = (\omega_1, \dots, \omega_n)$, определяющим относительные доли (веса) общего числа наблюдений, проводимых в соответствующих точках [10, 11]. План ξ называется *насыщенным*, если

$n = p$, и избыточным, если $n > p$. Информационная матрица плана $\xi = (\text{supp}(\xi), \omega(\xi))$ определяется выражением

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

где $f(x, \theta) = \frac{\partial}{\partial \theta} \eta(x, \theta) \in R^p$. Говорят, что план ξ^* локально D -оптимален, если он максимизирует функционал $\Phi(\xi, \theta) = \log |M(\xi, \theta)|$, т. е.

$$\Phi(\xi^*, \theta) = \sup_{\xi \in \Xi} \log |M(\xi, \theta)|, \quad \text{где } \Xi \text{ — множество непрерывных планов на } \mathcal{X}. \quad (3)$$

В работе [7] предложено обобщение теоремы эквивалентности Кифера—Вольфовица на случай нелинейных моделей. Мы будем использовать данную теорему в следующей формулировке.

Теорема 2.1 (Чалонер и Ларнц [7]). Пусть Φ — функционал, определяемый согласно (3). Тогда имеют место следующие утверждения:

(1) локально D -оптимальный план ξ^* характеризуется любым из трех эквивалентных условий:

- (i) ξ^* максимизирует $\Phi(\xi, \theta)$,
- (ii) ξ^* минимизирует $\sup_{x \in \mathcal{X}} d(\xi, x)$,
- (iii) $\sup_{x \in \mathcal{X}} d(\xi^*, x) = p$;

(2) носитель $\text{supp}(\xi^*)$ локально D -оптимальной меры ξ^* состоит из точек $x \in \mathcal{X}$, для которых $d(\xi^*, x) = p$ почти наверное относительно меры ξ^* .

Функция дисперсии $d(\xi, x)$, фигурирующая в теореме 2.1, для D -критерия имеет вид

$$d(\xi, x) = f^T(x, \theta) M^{-1}(\xi, \theta) f(x, \theta). \quad (4)$$

Данная теорема является мощным инструментом для проверки плана на оптимальность.

Пусть $y \in \mathcal{Y} \subset R^v$, R^v — аффинное пространство. Аффинное преобразование $T: \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{Y}'$, имеющее в координатной записи вид

$$y' - a = \gamma(y - a),$$

называется гомотетией с центром в точке Q с координатами a . Два множества \mathcal{Y} и \mathcal{Y}' в аффинном пространстве, переводимые друг в друга гомотетией, называются гомотетичными.

В нашей работе мы будем исследовать влияние гомотетии пространства планирования \mathcal{X} на вид оптимального плана. В частности, на примере модели Эйна—Петерса, мы сформулируем условия, при которых гомотетия приводит к появлению избыточного плана.

3. Модель Эйна—Петерса. В работе [12] рассмотрена реакция каталитического восстановления окиси азота



Для описания механизма этой двусторонней реакции в работе [8] высказано предположение, что реакция протекает между каждой адсорбированной молекулой NO

и одной находящейся рядом адсорбированной молекулой водорода. В соответствии с этой гипотезой для описания скорости протекания такой реакции в [8] предложена дробно-рациональная модель:

$$\eta(x, \theta) = \frac{\theta_0 \theta_1 \theta_2 x_1 x_2}{(1 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2)^2}, \quad x \in \mathcal{X} = [0, b_1] \times [0, b_2]. \quad (6)$$

Содержательный смысл входящих в модель (6) величин следующий:

- x_1, x_2 — парциальные давления окиси азота NO и водорода H_2 соответственно;
- θ_1, θ_2 — адсорбционные равновесные константы для окиси азота NO и водорода H_2 соответственно;
- θ_0 — константа скорости прямой реакции.

Введем масштабированные переменные $z_1 = \theta_1 x_1, z_2 = \theta_2 x_2$, для которых верхними границами будут $\lambda_1 = b_1 \theta_1$ и $\lambda_2 = b_2 \theta_2$ соответственно. Будем рассматривать случай $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$. Тогда $\mathcal{Z} = [0, \lambda]^2$ — область планирования для новых переменных. Обозначим Ξ_n — класс n -точечных планов. Рассмотрим насыщенные планы $\xi_3, \bar{\xi}_3 \in \Xi_3$, и избыточный — $\xi_4 \in \Xi_4$ со спектрами вида

$$\text{supp}(\xi_3) = \left\{ A = \left(\frac{z_0}{\theta_1}, b_2 \right), B = \left(b_1, \frac{z_0}{\theta_2} \right), D = (b_1, b_2) \right\}, \quad (7)$$

$$\text{supp}(\bar{\xi}_3) = \left\{ \bar{A} = \left(\frac{\bar{z}_0}{\theta_1}, b_2 \right), \bar{B} = \left(b_1, \frac{\bar{z}_0}{\theta_2} \right), \bar{C} = \left(\frac{\bar{z}_1}{\theta_1}, \frac{\bar{z}_1}{\theta_2} \right) \right\}, \quad (8)$$

$$\text{supp}(\xi_4) = \left\{ \tilde{A} = \left(\frac{\tilde{z}_0}{\theta_1}, b_2 \right), \tilde{B} = \left(b_1, \frac{\tilde{z}_0}{\theta_2} \right), \tilde{C} = \left(\frac{\tilde{z}_1}{\theta_1}, \frac{\tilde{z}_1}{\theta_2} \right), D = (b_1, b_2) \right\}, \quad (9)$$

где координаты $z_0(\lambda), \bar{z}_0(\lambda), \bar{z}_1(\lambda), \tilde{z}_0(\lambda), \tilde{z}_1(\lambda)$ подлежат определению из условия (3).

Теорема 3.1. Пусть выполнены условия:

(а) $\mathcal{Z} = [0, \lambda]^2$ — область планирования;

(б) λ_1^* удовлетворяет условию $\sup_{x \in (0, \lambda_1^*)^2} d(\xi_3, x) = 3$;

(в) λ_2^* — корень уравнения $d(\bar{\xi}_3, D) = 3$;

(г) $\mathcal{Z}^* = [0, \lambda_1^*]^2$; $Z = \gamma \mathcal{Z}^*$ — гомотетия $\mathcal{Z}^* \rightarrow \mathcal{Z}$ с центром $O = (0, 0)$ и коэффициентом γ .

Тогда имеют место следующие утверждения:

(1) $\lambda_1^* = 0.2649875882$ и $\lambda_2^* = 6.071435739$ определены однозначно;

(2) если $\gamma \leq 1$, то насыщенный план $\xi_3 \in \Xi_3$, имеющий структуру (7), является локально D -оптимальным для модели (6) при

$$z_0(\lambda) = 1 + 2\lambda - \sqrt{3\lambda^2 + 3\lambda + 1}; \quad (10)$$

(3) если $1 < \gamma < \frac{\lambda_2^*}{\lambda_1^*} \approx 22.9121514$, то $\xi_4 \in \Xi_4$ — избыточный локально D -оптимальный план для модели (6) со структурой (9), координаты которого $\tilde{z}_0 = \tilde{z}_0(\lambda)$ и $\tilde{z}_1 = \tilde{z}_1(\lambda)$ и распределение затрат $\omega(\xi_4)$ подлежат определению численно;

(4) если $22.9121514 \leq \gamma$, то насыщенный план $\bar{\xi}_3 \in \Xi_3$, имеющий структуру (8), является локально D -оптимальным для модели (6) при

$$\begin{aligned} \bar{z}_0(\lambda) &= 2A \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{B^3 - 3BA^2 + \lambda^3 + \lambda^2}{2A^3} \right) + \frac{\pi}{3} \right) + B, \\ A &= \sqrt{\frac{10}{9}\lambda^2 + \lambda + 1}, \quad B = \frac{2}{3}\lambda + 1; \\ \bar{z}_1(\lambda) &= \frac{\lambda + \bar{z}_0(\lambda)}{\lambda + \bar{z}_0(\lambda) + 3}. \end{aligned} \tag{11}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 3.1. Оптимальность планов ξ_3 , $\bar{\xi}_3$, ξ_4 проверяется непосредственно с помощью теоремы 2.1. Мы не приводим здесь подробное доказательство ввиду его громоздкости. Пусть ξ^* — оптимальный план. Характер изменения функции $d(\xi^*, x)$ в зависимости от λ демонстрируют рис. 1, 2. При небольших значениях λ (рис. 1) функция $d(\xi^*, x)$ имеет три глобальных максимума. При увеличении λ у функции $d(\xi^*, x)$ возникает локальный максимум внутри области \mathcal{X} , и при достижении некоторого критического значения λ_1^* число ее глобальных максимумов становится равным 4 (рис. 2). При дальнейшем увеличении λ и достижении критического значения λ_2^* число глобальных максимумов функции $d(\xi^*, x)$ вновь становится равным 3 (рис. 1). Величины λ_1^* и λ_2^* находятся путем прямых вычислений. Данные величины являются *характеристическими постоянными* модели Эйна–Петерса. Их содержательный смысл состоит в том, что имея априорную информацию о равновесных константах θ_i ($i = 1, 2$), можно подбирать такие диапазоны варьирования парциальных давлений b_i ($i = 1, 2$), при которых локально D -оптимальный план эксперимента будет либо насыщенным, либо избыточным.

Пример 3.1. Локально-оптимальные планы из теоремы 3.1. Пусть $b_1 = b_2 = 1$. Тогда получим следующие оптимальные планы:

$$(1) \xi_3 = \left(\begin{array}{ccc} (0.4674, 1) & (1, 0.4674) & (1, 1) \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{array} \right) \text{ при } \lambda = 0.1;$$

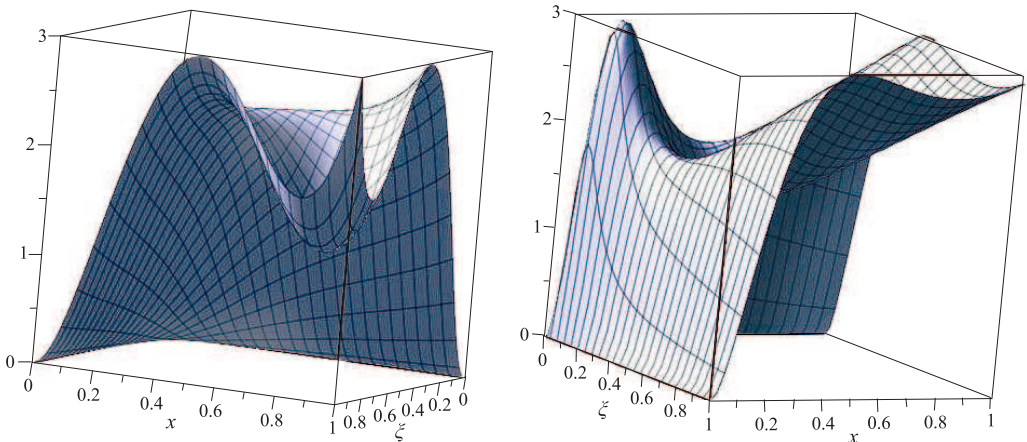


Рис. 1. Функция $d(\xi, x)$ из теоремы 2.1 для оптимальных планов ξ_3 (слева) при $b_1 = b_2 = 1$, $\theta_1 = \theta_2 = 0.1$ и $\bar{\xi}_3$ (справа) при $b_1 = b_2 = 1$, $\theta_1 = \theta_2 = 7$.

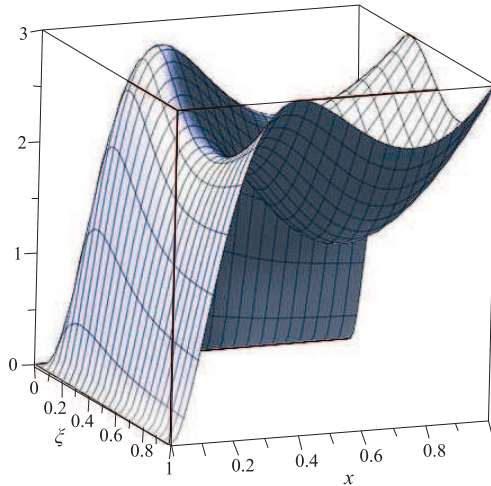


Рис. 2. Функция $d(\xi, x)$ из теоремы 2.1 для оптимального плана ξ_4 при $b_1 = b_2 = 1$, $\theta_1 = \theta_2 = 2$.

$$(2) \bar{\xi}_3 = \begin{pmatrix} (0.4225, 1) & (1, 0.4225) & (0.1098, 0.1098) \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix} \quad \text{при } \lambda = 7.0;$$

$$(3) \xi_4 = \begin{pmatrix} (0.3848, 1) & (1, 0.3848) & (0.2651, 0.2651) & (1, 1) \\ 0.2414 & 0.2414 & 0.2906 & 0.2266 \end{pmatrix} \quad \text{при } \lambda = 2.0.$$

Поведение функции $d(\xi, x)$ для этих планов можно увидеть на рис. 1, 2.

4. Вычислительный аспект. Модель Эйна—Петерса является дробно-рациональной, поэтому все вычисления, связанные с ней, носят алгебраический характер. Это дает возможность использовать для построения локально D -оптимальных планов специальные методы, в том числе метод исключения, который в данном случае допускает понижение размерности пространства переменных (см., например, [13]).

В силу симметрии модели (6) размерность задачи нахождения оптимального плана ξ_4 со спектром (9) можно понизить, что приведет к частному случаю метода исключения — методу результатов. Пусть ξ — n -точечный план со спектром $\text{supp}(\xi) = (x_1, \dots, x_n)$ и весами $\omega_i = \xi(x_i)$ ($i = 1, \dots, n$). Обозначим

$$F = \frac{\partial}{\partial \theta_j} \eta(x_i, \theta) \in R^{n \times p}, \quad W = \text{diag}\{\omega_1, \dots, \omega_n\}.$$

Пусть $F^2(i_1 \dots i_p)$ — квадрат минора, составленного из строк матрицы F с номерами i_1, i_2, \dots, i_p . Тогда согласно формуле Бине—Коши [10] определитель $|M(\xi, \theta)|$ допускает представление вида

$$|M(\xi, \theta)| = |F^T W F| = \sum \left[F^2(i_1 \dots i_p) \prod_{\alpha=1}^p \omega_{i_\alpha} \right], \quad (12)$$

где сумма берется по всем минорам матрицы F порядка p .

Поставим в соответствие строкам матрицы F точки $\tilde{A} = (\tilde{z}_0/\theta_1, b_2)$, $\tilde{B} = (b_1, \tilde{z}_0/\theta_2)$, $\tilde{C} = (\tilde{z}_1/\theta_1, \tilde{z}_1/\theta_2)$ и $D = (b_1, b_2)$ плана (9) с весами $\omega_1 = \xi(\tilde{A}) = \xi(\tilde{B})$,

$\omega_2 = \xi(\tilde{C})$, $\omega_3 = \xi(\tilde{D}) = 1 - 2\omega_1 - \omega_2$ соответственно. Тогда для плана (9) согласно (12) получаем

$$|M(\xi_4, \theta)| = \omega_1^2 \omega_2 F^2(123) + \omega_1^2 (1 - 2\omega_1 - \omega_2) F^2(124) + \omega_1 \omega_2 (1 - 2\omega_1 - \omega_2) (F^2(134) + F^2(234)). \quad (13)$$

Поскольку $F^2(124)$ не зависит от \tilde{z}_1 , а веса точек \tilde{A} и \tilde{B} совпадают, то условия

$$\frac{\partial |M(\xi_4, \theta)|}{\partial \tilde{z}_1} = 0, \quad \frac{\partial |M(\xi_4, \theta)|}{\partial \omega_2} = 0$$

приводят к уравнению $Q\omega = c$ относительно вектора весов $\omega = (\omega_1, \omega_2)^T$ с коэффициентами Q и правой частью c , зависящими только от миноров $F^2(i_1 \dots i_p)$. Так как план ξ_4 невырожден, то вектор $\omega = Q^{-1}c$ может быть вычислен, что дает возможность исключить веса ω_1 и ω_2 из двух оставшихся неиспользованными уравнений

$$\frac{\partial |M(\xi_4, \theta)|}{\partial \tilde{z}_0} = 0, \quad \frac{\partial |M(\xi_4, \theta)|}{\partial \omega_1} = 0. \quad (14)$$

Решая систему (14) методом результатов, находим \tilde{z}_0 и \tilde{z}_1 , а затем ω_1 и ω_2 . Таким образом, локально D -оптимальный план ξ_4 может быть точно найден.

Наряду с точным решением, можно указать два приближенных решения задачи $|M(\xi, \theta)| \rightarrow \max$, которые определяются с меньшими вычислительными затратами. Для частного случая $\lambda = 1$ эти решения, как и точное, представлены в примере 4.1.

Пример 4.1. Точный и приближенные планы. Обозначим функцию $d(\xi_3, x)$ за $f_d(x_1, x_2)$, где x_1, x_2 — координаты точки x . Пусть $\lambda = 1$. В этом случае будем иметь $z_0(1) = 3 - \sqrt{7}$ и

$$d(\xi_3, x) =: f_d(x_1, x_2) = \frac{3(2663 + 884\sqrt{7}) (x_1 x_2)^2 \{q_0(x_1^2 + x_2^2) + q_1(x_1 x_2) + q_2(x_1 + x_2) + q_3\}}{20017 (1 + x_1 + x_2)^6}, \quad (15)$$

$$q_0 = 20017, \quad q_1 = 1856\sqrt{7} + 9082, \quad q_2 = 3514\sqrt{7} - 54288, \quad q_3 = -16840\sqrt{7} + 83427.$$

Характеристики точного и двух приближенных планов, также построенных методом исключения, представлены в табл. 1. (План ξ_a : $\tilde{z}_0(1) = 3 - \sqrt{7}$, $\tilde{z}_1(1) = x_1^*$, x_1^* — корень уравнения $\partial f_d(x_1, x_1)/\partial x_1 = 0$. План ξ_b : $\tilde{z}_0(1) = 3 - \sqrt{7}$, $\tilde{z}_1(1) = 3 - \sqrt{7}$. План ξ_c — точный план, построенный методом результатов. Веса планов ω_i определяются из соответствующих условий; $|M(\xi_4, \theta)| = K \cdot (\theta_3^2/\theta_1\theta_2)^2$). Из табл. 1 видим, что приближенные планы ξ_a и ξ_b весьма незначительно уступают локально D -оптимальному плану ξ_c .

Таблица 1. Характеристики трех избыточных планов ξ_a, ξ_b и ξ_c со структурой (9) при $\lambda = 1$

ξ	Координаты узлов		Распределение $\omega(\xi)$			Критерий		
	$\tilde{z}_0(1)$	$\tilde{z}_1(1)$	ω_1	ω_2	ω_3	K	$\log K$	$d(\xi, \{1, 1\})$
ξ_a	0.380867	0.372193	0.2431	0.2957	0.2181	$0.1048 \cdot 10^{-9}$	-22.9785	3.0249
ξ_b	0.380867	0.380867	0.2440	0.2896	0.2224	$0.1060 \cdot 10^{-9}$	-22.9678	3.0018
ξ_c	0.386898	0.373941	0.2478	0.2869	0.2235	$0.1061 \cdot 10^{-9}$	-22.9670	3.0000

Сравним теперь полученные результаты с последовательной стратегией планирования для модели Эйена—Петерса, рассмотренной в книге Химмельблау [9, пример 8.4.2].

Пример 4.2. Последовательный план. Полученный в книге Химмельблау [9, пример 8.4.2] при $\lambda = 0.1$ последовательный план представлен в табл. 2.

Таблица 2. Последовательный план Химмельблау при $\lambda = 0.1$

Парциальные давления	Последовательный план Химмельблау							
	1	2	3	4	5	6	7	8
x_1	0.10	0.06	0.10	0.10	0.04	0.10	0.10	0.03
x_2	0.06	0.10	0.03	0.10	0.10	0.03	0.10	0.03

Согласно теореме 3.1 для трехточечного плана ξ_3 имеем $z_0(0.1) = 0.0467$, что весьма близко к округленным значениям $x_{ij} = 0.03$ и 0.04 . Однако 8-я точка плана Химмельблау, лежащая на диагонали области планирования, указывает на то, что на самом деле оптимальный план ξ является 4-точечным. Действительно, конечные оценки равновесных констант θ_1 и θ_2 равны $\hat{\theta}_1 = 16.9$ и $\hat{\theta}_2 = 20.2$ [9, пример 8.4.2]. Следовательно, $\gamma \in [1.69, 2.02]$, т. е. $\gamma > 1$. Согласно теореме 3.1 это означает, что в оптимальном плане должны быть 4 точки, что и обнаружил Химмельблау. Как последовательный, так и аналитический планы указывают на то, что большая часть экспериментальных точек должна располагаться на границе области \mathcal{X} , т. е. в области высоких парциальных давлений, где только и можно обнаружить падение кривой скорости реакции.

Еще один возможный подход к численному нахождению локально D -оптимальных планов предложен в недавно опубликованной статье [14]. Его можно использовать в тех случаях, когда размерность задачи в методе исключения не удастся понизить или когда он вообще неприменим. Идея подхода заключается в модификации метода имитации отжига [15]. Пусть $f(x)$, $x \in D \in R^s$, — ограниченная по модулю функция. В классическом методе имитации отжига рассматривается плотность

$$\overline{\mathfrak{M}}(T, x) = C(T) \exp(-f(x)/T), \quad (16)$$

где $T \in R^1$ — некоторый параметр, $C = C(T)$ — константа нормировки, зависящая от T . При $T \rightarrow \infty$ данная плотность слабо сходится к δ -функции, сосредоточенной в точке глобального минимума функции $f(x)$. Методом Метрополиса моделируются последовательности плотностей (16) с возрастающими $T_1 < T_2 < \dots < T_n$. На каждом шаге для алгоритма Метрополиса используются реализации случайных величин, полученные на предыдущем шаге.

Модификация, предложенная в работе [14], состоит в следующем: вместо функции плотности $\overline{\mathfrak{M}}(T, X)$ предлагается рассматривать плотность

$$\mathfrak{M}(x, n) = \frac{f^n(x)}{\int_D f^n(x) dx},$$

где параметр n играет роль T . В некоторых случаях при моделировании вместо функции $f(x)$ можно использовать усеченную функцию $f_\epsilon(x)$ (см. [14]). Применение предложенного подхода позволяет находить оптимальные планы с высокой точностью. В примере 4.3 с помощью данного метода построен оптимальный 4-точечный план.

Пример 4.3. Модификация метода отжига. Пусть $\lambda = 6$, $b_1 = b_2 = 1$. Тогда

$$\xi_4 = \begin{pmatrix} (0.4275, 1) & (1, 0.4275) & (0.1235, 0.1235) & (1, 1) \\ 0.3315 & 0.3315 & 0.3331 & 0.0039 \end{pmatrix}.$$

5. Заключение. Численная оптимизация, используемая при построении избыточных байесовских планов (см., например, [7]), обычно опирается на универсальные алгоритмы типа симплексного алгоритма Нелдера—Мида с учетом линейного ограничения на веса точек плана. Для рассмотренной в статье дробно-рациональной модели Эйна—Петерса были использованы модификация метода имитации отжига (предложенная в работе [14]), а также разновидность метода исключения, опирающаяся на теорию результатов (см., например, [13]). Этот метод применяется, в частности, в алгебраической геометрии для отыскания точек пересечения алгебраических кривых.

С ростом размерности пространства переменных метод исключения становится громоздким и не всегда приводит к цели. Тем не менее, с его помощью в статье были получены планы, подтверждающие, что гомотетии могут приводить к избыточным локально D -оптимальным планам. Мы полагаем, что предложенный в данной работе подход окажется полезным для выделения классов моделей, в которых преобразование гомотетии приводит к избыточным планам, и классов моделей, в которых это свойство не имеет места. Остается открытым вопрос о влиянии на избыточность планов преобразований трансляции $x' = x + c$ (c — вектор переноса) области планирования \mathcal{X} . В методе Янга—Стаффкена крайние точки интервала планирования входят в критерий верхней границы для числа опорных точек в локально D -оптимальных планах. Поэтому они, возможно, влияют на избыточность соответствующих планов. Скажем, непрерывные A -оптимальные планы для линейной модели $\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x$ на положительном отрезке $\mathcal{X} = [a, b]$ ($a \geq 0$, функция эффективности $\lambda(x) = \sigma^{-2}(x) = 1$) имеют вид

$$\xi = \left(\frac{a}{A+B}, \frac{b}{A+B} \right), \quad A = \sqrt{1+a^2}, \quad B = \sqrt{1+b^2}.$$

Таким образом, распределение $\omega(\xi)$ плана ξ зависит от параллельных переносов. В работе [16] показано, что аналогично обстоит дело и с E -оптимальными планами на отрезке (нечебышёвский случай).

На практике часто требуются планы, в которых число опорных точек превышает число неизвестных параметров. В этом случае обычно можно осуществить проверку адекватности модели. В рассмотренной теории основополагающую роль играет мешающий параметр λ , значение которого полностью определяет, какой план, избыточный или насыщенный, является для данного конкретного случая локально D -оптимальным. Но параметр λ — это мультипликативный комплекс вида $\lambda = \theta b$, где θ — предполагаемое или наиболее благоприятное значение неизвестного параметра, a, b — верхняя граница диапазона изменения соответствующей независимой переменной. Поэтому, выбирая при фиксированном θ необходимое значение b , экспериментатор всегда может спланировать и реализовать именно тот избыточный план ξ , который даст ему возможность проверить адекватность модели. При байесовском подходе это достигается за счет увеличения неопределенности информации о параметре $\theta \in \Theta \subseteq R^p$, скажем, за счет увеличения дисперсии априорного распределения $\pi(\theta)$ с носителем $\text{supp}(\pi(\theta)) = \Theta$.

Литература

1. Yang M., Stufken J. Support points of locally optimal designs for nonlinear models with two parameters // *Ann. Statist.* 2009. Vol. 37, N 1. P. 518–541. <https://doi.org/10.1214/07-AOS560>
2. Yang M., Stufken J. Identifying locally optimal designs for nonlinear models: a simple extension with profound consequences // *Ann. Statist.* 2012. Vol. 40, N 3. P. 1665–1681. <https://doi.org/10.1214/12-AOS992>
3. Yang M. On the de la Garza phenomenon // *Ann. Statist.* 2010. Vol. 38, N 4. P. 2499–2524. <https://doi.org/10.1214/09-AOS787>
4. Dette H., Melas B. A note on the de la Garza phenomenon for locally optimal designs // *Ann. Statist.* 2011. Vol. 39, N 2. P. 1266–1281. <https://doi.org/10.1214/11-AOS875>
5. de la Garza A. Spacing of information in polynomial regression // *Math. Statist.* 1954. Vol. 25. P. 123–130.
6. Khuri A. I., Mukerjee B., Sinha B. K., Ghosh M. Design issues for generalized linear models: A review // *Statist. Sci.* 2006. Vol. 21, N 3. P. 376–399. <https://doi.org/10.1214/088342306000000105>
7. Chaloner K., Larntz K. Optimal bayesian experimental design applied to logistic regression experiments // *J. Statist. Plann. Inference.* 1989. Vol. 21, issue 2. P. 191–208. [https://doi.org/10.1016/0378-3758\(89\)90004-9](https://doi.org/10.1016/0378-3758(89)90004-9)
8. Ayen R. J., Peters M. S. Catalic reduction of nitric oxide // *Ind. Eng. Chem. Process Design Develop.* 1962. Vol. 1, issue 3. P. 204–207. <https://doi.org/10.1021/i260003a008>
9. Himmelblau D. M. *Process Analysis by Statistical Methods.* New York—London—Sidney—Toronto: John Wiley & Sons Inc., 1970.
10. Fedorov V. V. *Theory of Optimal Experiment.* New York: Academic Press, 1972.
11. Pukelsheim F. *Optimal Design of Experiments.* Philadelphia: SIAM, 2006.
12. Kittrell J. R., Hunter W. G., Watson C. C. Obtaining precise parameter estimates for nonlinear catalytic rate models // *AIChE Journal.* 1966. Vol. 12, issue 1. P. 5–10. <https://doi.org/10.1002/aic.690120104>
13. van der Waerden B. L. *Modern algebra.* Vol. 2. New York: Frederick Ungar Publishing Co. 1950.
14. Ермаков С. М., Куликов Д. В., Леора С. Н. К анализу метода имитации отжига в многоэкстремальном случае // *Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия.* 2017. Т. 4(62). Вып. 2. С. 220–226. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.205>
15. Metropolis V. N., Rosenbluth A., Rosenbluth M., Teller A., Teller E. Equations of state calculations by fast computing machines // *J. Chem. Phys.* 1953. Vol. 21, issue 6. P. 1087–1092. <https://doi.org/10.1063/1.1699114>
16. Melas V. B. *Functional approach to optimal experimental design.* New York: Springer Science + Business Media Inc., 2006.

Статья поступила в редакцию 30 апреля 2017 г.; рекомендована в печать 22 июня 2017 г.

Сведения об авторах

Григорьев Юрий Дмитриевич — доктор технических наук, профессор; yuri_grigoriev@mail.ru
Мелас Вячеслав Борисович — доктор физико-математических наук, профессор; vbmelas@post.ru
Шпилев Петр Валерьевич — кандидат физико-математических наук, доцент; p.shpilev@spbu.ru

EXCESS OF LOCALLY D -OPTIMAL DESIGNS AND HOMOTHETIC TRANSFORMATIONS

Yuri D. Grigoriev¹, Viatcheslav B. Melas², Petr V. Shpilev²

¹ St. Petersburg State Electrotechnical University, ul. Professora Popova, 5, St. Petersburg, 197376, Russian Federation; yuri_grigoriev@mail.ru

² St. Petersburg State University, Universitetskaya nab., 7–9, St. Petersburg, 190034, Russian Federation; vbmelas@post.ru, p.shpilev@spbu.ru

The paper is devoted to the study of homothety's influence on the number of optimal design support points under fixed values of regression model's parameters. Two-dimension nonlinear by parameters Ayen—Peters model used in analytical chemistry is considered. It is shown that the number of optimal design support points has to be more or equal to the number of parameters depending on certain conditions. The optimal designs with the minimum number of support points are constructed explicitly. Some numerical methods for construction designs with bigger number (such designs are suggested to call *excess designs*) are used. Refs 16. Figs 2. Tables 2.

Keywords: excess design, locally D -optimal designs, homothetic transformation, Ayen—Peters model, elimination method.

References

1. Yang M., Stufken J., “Support points of locally optimal designs for nonlinear models with two parameters”, *Ann. Statist.* **37**(1), 518–541 (2009). <https://doi.org/10.1214/07-AOS560>
2. Yang M., Stufken J., “Identifying locally optimal designs for nonlinear models: a simple extension with profound consequences”, *Ann. Statist.* **40**(3), 1665–1681 (2012). <https://doi.org/10.1214/12-AOS992>
3. Yang M., “On the de la Garza phenomenon”, *Ann. Statist.* **38**(4), 2499–2524 (2010). <https://doi.org/10.1214/09-AOS787>
4. Dette H., Melas B., “A note on the de la Garza phenomenon for locally optimal designs”, *Ann. Statist.* **39**(2), 1266–1281 (2011). <https://doi.org/10.1214/11-AOS875>
5. de la Garza A., “Spacing of information in polynomial regression”, *Math. Statist.* **25**, 123–130 (1954).
6. Khuri A. I., Mukerjee B., Sinha B. K., Ghosh M., “Design issues for generalized linear models: A review”, *Statist. Sci.* **21**(3), 376–399 (2006). <https://doi.org/10.1214/08834230600000105>
7. Chaloner K., Larntz K., “Ptimal bayesian experimental design applied to logistic regression experiments”, *J. Statist. Plann. Inference* **21**, issue 2, 191–208 (1989). [https://doi.org/10.1016/0378-3758\(89\)90004-9](https://doi.org/10.1016/0378-3758(89)90004-9)
8. Ayen R. J., Peters M. S., “Catalic reduction of nitric oxide”, *Ind. Eng. Chem. Process Design Develop.* **1**, issue 3, 204–207 (1962). <https://doi.org/10.1021/i260003a008>
9. Himmelblau D. M., *Process Analysis by Statistical Methods* (John Wiley & Sons Inc., New York—London—Sidney—Toronto, 1970).
10. Fedorov V. V., *Theory of Optimal Experiment* (Academic Press, New York, 1972).
11. Pukelsheim F., *Optimal Design of Experiments* (SIAM, Philadelphia, 2006).
12. Kittrell J. R., Hunter W. G., Watson C. C., “Obtaining precise parameter estimates for nonlinear catalytic rate models”, *AIChE Journal* **12**, issue 5, 5–10 (1966). <https://doi.org/10.1002/aic.690120104>
13. van der Waerden B. L. *Modern algebra 2* (Frederick Ungar Publishing Co., New York, 1950).
14. Ermakov S. M., Kulikov D. V., Leora S. N., “Towards the analysis of the simulated annealing method in the multiextremal case”, *Vestnik SPbSU. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **4(62)**, issue 2, 220–226 (2017) [in Russian]. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.205>
15. Metropoli V. N., Rosenblut A., Rosenblut M., Teller A., Teller E., “Equations of state calculations by fast computing machines”, *J. Chem. Phys.* **21**, issue 6, 1087–1092 (1953). <https://doi.org/10.1063/1.1699114>
16. Melas V. B. *Functional approach to optimal experimental design* (Springer Science + Business Media Inc., New York, 2006).

Для цитирования: Григорьев Ю. Д., Мелас В. Б., Шпилев П. В. Избыточность локально D -оптимальных планов и гомотетии // Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2017. Т. 4 (62). Вып. 4. С. 552–562. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.403>

For citation: Grigoriev Yu. D., Melas V. B., Shpilev P. V. Excess of locally D -optimal designs and homothetic transformations. *Vestnik SPbSU. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2017, vol. 4 (62), issue 4, pp. 552–562. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.403>