

ФМ

718738

В. В. ФЕДОРОВ

Т  
Теория  
ОПТИМАЛЬНОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА

БИ

Физико-  
Математическая  
Библиотека  
Инженера

---

В. В. ФЕДОРОВ

# ТЕОРИЯ ОПТИМАЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

(ПЛАНИРОВАНИЕ  
РЕГРЕССИОННЫХ  
ЭКСПЕРИМЕНТОВ)

718738



**ВОЛОГОДСКАЯ  
областная библиотека  
им. И. В. Бабушкина**

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»  
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ  
МОСКВА 1971

517.8

Ф 33

517.83

УДК 510+519.24/27

**Теория оптимального эксперимента (планирование регрессионных экспериментов).** Федоров В. В., монография, Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», 1971.

Монография посвящена современным статистическим методам планирования оптимальных экспериментов, с которыми приходится сталкиваться при выяснении механизмов явлений. С математической точки зрения в монографии рассматриваются вопросы, связанные с проблемой анализа и планирования регрессионных экспериментов. Оптимальными считаются такие эксперименты, которые позволяют получить наибольшее количество сведений об изучаемых явлениях при заданных затратах (время, денежные или материальные затраты). Методы планирования подобных экспериментов начали интенсивно развиваться лишь в последнем десятилетии.

Таблиц 10, рисунков 35, библиография — 77 названий.

*Валерий Вадимович Федоров*

**ТЕОРИЯ ОПТИМАЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА**

М., 1971 г., 312 стр. с илл.

Редактор *Г. Я. Мякишев*

Техн. редактор *Л. А. Пыжова*

Корректор *Т. С. Вайсберг*

Сдано в набор 10/VI 1971 г. Подписано к печати 17/XI 1971 г. Бумага 84×108<sup>1/2</sup>. Физ. печ. л. 9,75. Условн. печ. л. 16,38. Уч.-изд. л. 16,75. Тираж 19 000 экз. Т-16865. Цена книги 1 р. 06 к. Заказ № 1800

Издательство «Наука»

Главная редакция физико-математической литературы  
117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15.

Ордена Трудового Красного Знамени Ленинградская типография № 1  
«Печатный Двор» им. А. М. Горького Главполиграфпрома  
Комитета по печати при Совете Министров СССР,  
г. Ленинград, Гатчинская ул., 26.

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	5
Введение . . . . .	7
<b>Глава 1. Регрессионный анализ и критерии оптимальности регрессионных экспериментов . . . . .</b>	<b>17</b>
§ 1.1. Основные элементы матричной алгебры . . . . .	17
§ 1.2. Общие требования, предъявляемые к оценкам . . . . .	26
§ 1.3. Наилучшие линейные оценки . . . . .	28
§ 1.4. Поиск оценок при нелинейной параметризации. Наилучшая квазилинейная оценка . . . . .	38
§ 1.5. Оценка дисперсии результатов наблюдений. Эффективность эксперимента . . . . .	41
§ 1.6. Регрессионный анализ при наличии ошибок в определении контролируемых переменных . . . . .	45
§ 1.7. Анализ экспериментальных данных в случае одновременного измерения нескольких величин . . . . .	55
§ 1.8. Способы сравнения результатов экспериментов . . . . .	57
§ 1.9. Функция потерь для регрессионных экспериментов . . . . .	61
§ 1.10. Понятие плана эксперимента. Непрерывные нормированные планы . . . . .	63
<b>Глава 2. Непрерывные оптимальные планы (статические методы) . . . . .</b>	<b>70</b>
§ 2.1. Основные свойства информационной матрицы . . . . .	70
§ 2.2. Эквивалентность $D$ -оптимальных и минимаксных планов. Основные свойства этих планов . . . . .	74
§ 2.3. Полиномиальная одномерная регрессия . . . . .	89
§ 2.4. Тригонометрическая регрессия на отрезке . . . . .	101
§ 2.5. Численные методы построения $D$ -оптимальных планов . . . . .	104
§ 2.6. Некоторые особенности итерационной процедуры построения $D$ -оптимальных планов . . . . .	113
§ 2.7. Усеченные $D$ -оптимальные планы . . . . .	124
§ 2.8. Нелинейная параметризация поверхностей отклика. Локально $D$ -оптимальные планы . . . . .	130
§ 2.9. Линейные критерии оптимальности . . . . .	132
§ 2.10. Итерационный метод построения линейно оптимальных планов . . . . .	143
§ 2.11. Планы, минимизирующие $\text{Sp } \mathbf{D}(\epsilon)$ . . . . .	148
§ 2.12. Планы, минимизирующие среднее по области значение дисперсии оценки поверхности отклика . . . . .	153
§ 2.13. Экстраполяция в точку . . . . .	156
§ 2.14. Квадратичные потери . . . . .	164

<b>Глава 3. Свойства и методы построения точных оптимальных планов</b> . . . . .	167
§ 3.1. Дискретные планы . . . . .	167
§ 3.2. Свойства и методы построения точных $D$ -оптимальных планов . . . . .	173
§ 3.3. Построение точных линейно оптимальных планов . . . . .	180
§ 3.4. Построение квазиоптимальных планов при неадекватных моделях . . . . .	184
<b>Глава 4. Последовательные методы планирования экспериментов по уточнению и определению оценок искоемых параметров</b> . . . . .	184
§ 4.1. Некоторые особенности современных экспериментальных исследований . . . . .	194
§ 4.2. Последовательные $D$ -оптимальные планы (линейная параметризация и постоянная во времени эффективность эксперимента) . . . . .	196
§ 4.3. Последовательные линейно оптимальные планы (линейная параметризация и постоянная во времени эффективность эксперимента) . . . . .	207
§ 4.4. Последовательное планирование при нелинейной параметризации . . . . .	210
§ 4.5. Планирование при неизвестной функции эффективности эксперимента . . . . .	224
§ 4.6. Планирование при наличии ошибок в определении контролируемых переменных . . . . .	227
§ 4.7. Построение оптимальных планов при изменении во времени экспериментальных условий . . . . .	228
<b>Глава 5. Планирование экспериментов в случае одновременного измерения нескольких величин</b> . . . . .	234
§ 5.1. Основные свойства информационной матрицы . . . . .	234
§ 5.2. $D$ -оптимальные планы . . . . .	236
§ 5.3. Линейно оптимальные планы . . . . .	246
§ 5.4. Последовательное планирование . . . . .	249
<b>Глава 6. Дискриминирующие эксперименты</b> . . . . .	251
§ 6.1. Постановка задачи . . . . .	251
§ 6.2. Критерии опирающиеся на меры, зависящие от разности сумм взвешенных квадратичных отклонений . . . . .	256
§ 6.3. Метод отношения вероятностей . . . . .	277
§ 6.4. Дискриминация на основе энтропийной меры информации . . . . .	284
<b>Глава 7. Обобщенные критерии оптимальности</b> . . . . .	293
§ 7.1. Эксперименты, минимизирующие обобщенные потери . . . . .	293
§ 7.2. Информационный подход к общей проблеме поиска истинной математической модели . . . . .	296
<b>Литература</b> . . . . .	309

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Данная монография посвящена недавно возникшему и быстро развивающемуся направлению — планированию экспериментов. Основное внимание уделяется планированию экспериментов по поиску математических моделей изучаемых процессов.

В гл. 1 излагаются сведения из регрессионного анализа, в размере, необходимом для построения математического аппарата планирования экспериментов. В основу построения схемы регрессионного анализа положено понятие наилучшей линейной оценки (или наилучшей квазилинейной оценки для случая нелинейной зависимости математических моделей от неизвестных параметров). Подобный подход позволяет развить теорию оптимального эксперимента по определению оценок неизвестных параметров, не опираясь на конкретный вид функции распределения результатов наблюдений. Первый параграф указанной главы носит вспомогательный характер и содержит сведения из матричной алгебры. Цель его — собрать воедино необходимые при регрессионном анализе и планировании эксперимента основные формулы матричной алгебры, разбросанные по разным источникам, и тем самым облегчить читателю ознакомление с основным материалом. Заключительные параграфы первой главы посвящены формулировке основных критериев оптимальности экспериментов по определению и уточнению неизвестных параметров. Там же вводится формальное определение эксперимента и плана эксперимента.

Гл. 2 посвящена изложению основных свойств непрерывных статических оптимальных планов для различных критериев оптимальности. Здесь же исследуются как аналитические, так и численные методы построения

подобных планов. Приводятся таблицы характеристик оптимальных планов.

Свойства и методы построения оптимальных планов, учитывающих дискретный характер затрат при осуществлении реального эксперимента, изучаются в гл. 3.

В гл. 4 приводятся результаты по последовательным методам планирования экспериментов, по определению и уточнению оценок неизвестных параметров. Эти методы наиболее перспективны при нелинейной параметризации поверхности отклика.

Гл. 5 обобщает результаты, полученные в предыдущих главах, на случай, когда возможно одновременное измерение нескольких, вообще говоря, коррелированных между собой величин.

Гл. 6 содержит сведения об испытании статистических гипотез в применении к задаче поиска истинной математической модели и о различных методах планирования соответствующих экспериментов. В отличие от пяти предыдущих глав результаты гл. 6 существенно опираются на вид функции распределения результатов наблюдений.

В заключительной гл. 7 обсуждаются методы планирования экспериментов, опирающиеся на обобщенные критерии оптимальности, благодаря которым удается одновременно решать проблему выделения истинной математической модели и проблему уточнения неизвестных параметров. Основное внимание при этом уделяется критерию, базирующемуся на энтропийной мере информации.

Изложение материала строилось таким образом, что основные теоретические результаты формулировались в виде теорем. Подобная форма, кроме того, что дает возможность акцентировать внимание на наиболее важных результатах, позволяет читателю, впервые сталкивающемуся с математическими методами планирования оптимальных экспериментов, ограничиться при первом чтении лишь разбором содержания теорем и пояснений, опуская наиболее сложные и громоздкие доказательства.

Теоремы, леммы нумеруются следующим образом: первая цифра — номер главы, вторая цифра — номер параграфа, последние цифры — порядковый номер в данном параграфе; формулы сопровождаются аналогичными номерами.

*В. Федоров*

## ВВЕДЕНИЕ

I. При современном уровне развития науки и техники многие исследования в физике, биологии, химии, металлургии и так далее требуют постановки сложных и дорогостоящих экспериментов.

Измерение любой экспериментальной величины всегда осуществляется при воздействии некоторых помех, которые, несмотря на стремление исследователя свести их к минимуму, никогда не могут быть полностью устранены. В силу этого исследователь имеет дело не с детерминированными, а со случайными величинами. В некоторых случаях измеряемые величины являются случайными по своей природе. С измерением подобных величин приходится сталкиваться в квантовомеханических, биологических исследованиях, в некоторых задачах химической кинетики и ряде других отраслей науки.

Необходимость применения аппарата математической статистики при обработке результатов измерений, где случайная составляющая соизмерима с самими результатами, очевидна, и соответствующие методы обработки уже давно используются в экспериментальной практике.

Долгое время внимание математической статистики было обращено к совершенствованию методов обработки при заданном способе проведения эксперимента. Выбор самого эксперимента, т. е. как, где и когда проводить измерения, определялся, в основном, интуицией экспериментатора.

До тех пор, пока приходилось сталкиваться с задачами сравнительно простыми как с теоретической точки зрения, так и с точки зрения их экспериментального осуществления и не требующими при этом значительных затрат (денежных средств, времени, определенных



материальных ресурсов), издержки, связанные с ошибочностью интуитивных решений о способе проведения эксперимента, встречались не очень часто и не приводили к существенным потерям.

Развитие науки и техники привело к естественному усложнению теоретического истолкования получаемых результатов и способов реализации необходимых экспериментальных исследований. Усложнение экспериментальных установок вызвало резкое повышение стоимости экспериментальных исследований. В качестве одного из примеров можно привести исследования в области физики элементарных частиц, где необходимость создания мощных ускорителей делает измерения крайне дорогими.

Поэтому проблема извлечения наибольшего количества сведений об изучаемых процессах при ограниченных затратах является в настоящее время весьма актуальной. Интуиция экспериментатора при решении указанной проблемы становится все менее и менее надежной опорой.

В связи с этим оказывается совершенно необходимым широкое применение методов, которые давали бы не только способ обработки экспериментальных данных, но и позволяли бы оптимальным образом организовывать эксперимент.

Математический аппарат, используемый при оптимальной организации эксперимента, базируется на композиции методов математической статистики и методов решения экстремальных задач.

Чаще всего математическая статистика нужна для разумного построения и выяснения основных свойств критерия оптимальности эксперимента, после чего проблема оптимальной организации эксперимента (или более кратко — планирования эксперимента) сводится к решению некоторой экстремальной задачи.

Отметим, что планирование целесообразно лишь в тех случаях, когда экспериментатор четко представляет конечную цель проводимого исследования. К этому следует также добавить, что статистические методы планирования являются инструментом, который облегчает достижение поставленной цели. И так же как эффективность использования любого инструмента (или прибора) существенно зависит от того, насколько правильно его используют и в сколь квалифицированных руках он

находится, так же и эффективность применения указанных методов планирования экспериментов во многом зависит от того, насколько хорошо ими владеют и насколько уместно их использование. Например, вряд ли при проведении элементарных, не требующих больших затрат экспериментов необходимо применение методов, требующих вычислений, затраты на которые могут значительно превышать стоимость самого эксперимента.

II. К настоящему времени можно выделить два основных направления в математической теории планирования экспериментов: планирование экстремальных экспериментов и планирование экспериментов по выяснению механизма явлений.

Планирование первого типа применяется в тех случаях, когда экспериментатора интересуют условия, при которых изучаемый процесс удовлетворяет некоторому критерию оптимальности. Например, при разработке новых химико-технологических процессов критерий оптимальности состоит в требовании максимальной выхода продукта реакции. Планирование при этом заключается в поиске таких значений температуры, давления реагентов, их процентного соотношения и т. д., при которых выполняется поставленное требование.

Нередко экспериментатору необходимо выяснить поведение исследуемого объекта в целом или, как мы будем говорить в дальнейшем, выяснить механизм явления. Например, при изучении химико-технологического процесса может возникнуть необходимость выяснить зависимость выхода продукта реакции от температуры, давления, реагентов и т. д. На языке математики задача подобного рода формулируется следующим образом: необходимо найти такую функцию, которая определяет связь между выходом продукта реакции и величинами, влияющими на ход реакции (температура, процентное содержание реагентов и т. д.), — или более кратко: найти математическую модель данного процесса.

Таким образом, под выяснением механизма явления, здесь, в отличие от обычного использования данного термина, подразумевается не прямое исследование взаимодействий на уровне элементарных частиц, молекул и т. п., а изучение феноменологической стороны явления. Иными словами, нам безразлично, например, каким образом взаимодействуют две молекулы, а важна лишь

зависимость выхода какого-либо продукта от процентного содержания реагентов, которая соответствует этому взаимодействию и которая может непосредственно измеряться в данном эксперименте.

Предоставив исследователю математический вид зависимости некоторой величины от соответствующих факторов, мы тем самым дадим ему информацию, на основе которой он как специалист данной отрасли науки, привлекая необходимый теоретический аппарат, может сделать выводы о конкретном виде элементарных взаимодействий.

Планирование экстремальных экспериментов довольно тщательно изучено. Изложению соответствующего математического аппарата посвящено значительное число статей и обзоров. Результаты большинства из них изложены в книге В. В. Налимова и Н. А. Черновой [1]. Следует отметить переводную книгу Ч. Хикса [2], которая особенно полезна при первом ознакомлении с рассматриваемой проблемой.

Наряду с обширной литературой, излагающей математические аспекты планирования экстремальных экспериментов, имеется много работ, посвященных практическому применению методов планирования подобных экспериментов (см., например, [3]—[6]).

Существенно меньше внимания в современной литературе уделено планированию экспериментов по поиску математических моделей, описывающих исследуемые объекты. Из отечественной литературы здесь можно назвать лишь книгу Н. П. Клепикова и С. Н. Соколова [7], в которой имеется краткий раздел, посвященный планированию подобных экспериментов и, отчасти, [4].

Лишь ничтожное (по сравнению с числом работ по экстремальному планированию) количество работ посвящено практическому применению методов планирования экспериментов по поиску математической модели.

Настоящая книга ставит своей целью изложить наиболее важные и доступные с точки зрения практического применения математические методы планирования экспериментов по определению математической модели, описывающей исследуемый объект. Для наиболее четкого выяснения возможностей и области применимости каждого из рассматриваемых ниже методов теоретический материал сопровождается значительным числом примеров.

**III.** Рассмотрим подробнее математическую постановку проблемы планирования экспериментов по выяснению механизма явления. Обычно измеряемая величина зависит от одного или нескольких факторов, которые иногда мы будем называть «контролируемыми переменными», стремясь подчеркнуть тем самым, что значения каждого из факторов могут быть выбраны произвольно из некоторой заданной области. В качестве контролируемых переменных в зависимости от типа эксперимента могут фигурировать самые разнообразные величины, например: время, угол рассеяния падающих на мишень частиц, температура, напряжение, подаваемое на испытываемый прибор, процентное содержание реагентов в химических или биологических исследованиях и т. д.

Каждому набору указанных величин сопоставляется вектор-столбец

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_k \end{pmatrix},$$

координаты которого  $x_1, x_2, \dots, x_k$  равны значениям контролируемых переменных, занумерованных в удобном для экспериментатора порядке.

Пространство размерности  $k$ , в котором определен вектор  $\mathbf{x}$ , называется факторным пространством или пространством контролируемых переменных. Совокупность точек этого пространства, где измерения возможны (т. е. соответствующие значения контролируемых переменных  $x_1, x_2, \dots, x_k$  могут быть реализованы экспериментатором), называется областью возможных измерений или областью действия и в тексте книги обозначается через  $X$ . Определение границ области  $X$  играет важную роль при планировании оптимальных экспериментов. В некоторых случаях эти границы определяются самой природой контролируемой переменной. Например, процентное содержание реагентов не может быть меньше нуля и больше 100%, размеры исследуемых деталей — отрицательными и т. д. В других случаях, встречающихся значительно чаще, границы области действия определяются характеристиками аппаратуры, которой обладает исследователь, или видом исследуемого процесса. Действительно, верхняя граница температуры будет

определяться либо мощностью источника тепла, либо свойствами теплоизоляционных материалов; верхний предел для скорости рассеиваемых элементарных частиц определяется параметрами ускорителя. Читатель без труда сможет продолжить перечень аналогичных примеров, обращаясь к реальным экспериментам, встречающимся в знакомых ему разделах науки.

Задачей эксперимента по поиску математической модели, как уже отмечалось выше, является отыскание связи между измеряемыми переменными. Так как результаты наблюдений — величины случайные, то в большинстве случаев имеет смысл говорить о связи средних значений исследуемых величин с контролируруемыми переменными. В дальнейшем будем предполагать, что эта связь может быть описана некоторой функцией:

$$E(y/\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}),$$

где  $E(y/\mathbf{x})$  — среднее значение исследуемой величины  $y$  при значениях контролируемых переменных, определяемых координатами вектора  $\mathbf{x}$ , функция  $\eta(\mathbf{x})$  зависит от неизвестных параметров  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$  и в общем случае ее вид может быть также неизвестен. В статистической литературе данная функция обычно называется поверхностью отклика.

Приступая к поиску математической модели (функции  $\eta(\mathbf{x})$ ), экспериментатор обладает некоторой априорной информацией. Степень его информированности можно характеризовать тремя основными уровнями.

1. Функция  $\eta(\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \theta)$  известна. Требуется определить или уточнить неизвестные параметры

$$\theta = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \dots \\ \theta_m \end{pmatrix}.$$

2. Известно, что функция  $\eta(\mathbf{x})$  совпадает с одной из функций

$$\eta(\mathbf{x}) = \begin{cases} \eta_1(\mathbf{x}, \theta_1) \\ \eta_2(\mathbf{x}, \theta_2) \\ \dots \\ \eta_v(\mathbf{x}, \theta_v) \end{cases}.$$

Размерность векторов  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_v$  может быть различна. Требуется определить, какая из функций  $\eta_1(\mathbf{x}, \theta_1), \eta_2(\mathbf{x}, \theta_2), \dots, \eta_v(\mathbf{x}, \theta_v)$  является истинной, и найти неизвестные параметры.

3. Вид функции  $\eta(\mathbf{x})$  не известен. Известно лишь, что функция  $\eta(\mathbf{x})$  в интересующей экспериментатора области может быть достаточно хорошо аппроксимирована конечным рядом по некоторой системе (или системам) наперед заданных функций. Требуется найти наилучшее описание функции  $\eta(\mathbf{x})$ .

Хотя разбиение 1—3 довольно грубо и можно найти примеры, когда действительная экспериментальная ситуация занимает промежуточное состояние между какими-либо двумя указанными уровнями, оно удобно с точки зрения существующих методов планирования эксперимента и в то же время хорошо описывает большинство реальных случаев.

Математический аппарат планирования экспериментов при априорных сведениях, соответствующих уровню 1, начал развиваться около полутора десятка лет назад и к настоящему времени его построение с идейной точки зрения практически завершено.

Для данного случая развиты эффективные методы статического и последовательного планирования экспериментов.

Под статическим планированием эксперимента здесь понимается априорное планирование всего эксперимента в целом; под последовательным планированием — планирование эксперимента по этапам, т. е. планируется одно или несколько измерений, затем эти измерения реализуются, проводится обработка полученных данных и затем вновь приступают к планированию и т. д.

Для широкого класса функций  $\eta(\mathbf{x})$  статическое планирование экспериментов заключается, по существу, в использовании готовых таблиц, описывающих характеристики оптимальных планов.

Методы планирования экспериментов по поиску истинной модели из некоторой заданной совокупности моделей (уровень 2) появились лишь в самое последнее время и, несомненно, будут еще совершенствоваться как с идейной, так и вычислительной точек зрения.

В связи с этим основное внимание в книге уделялось наиболее простым и завершенным методам; для более

сложных или менее завершенных в теоретическом отношении методов изложение материала местами носит скорее описательный характер.

Большинство рассматриваемых методов планирования экспериментов при априорных сведениях, соответствующих уровню 2, являются по своей природе последовательными.

Следует отметить, что указанные методы планирования экспериментов тем эффективней, чем меньше число конкурирующих моделей  $\eta_1(\mathbf{x}, \theta_1), \eta_2(\mathbf{x}, \theta_2), \dots, \eta_v(\mathbf{x}, \theta_v)$ . Здесь сказывается основная закономерность планирования вообще: чем больше мы знаем, тем лучше, эффективней можем планировать. Поэтому задача экспериментатора как специалиста той отрасли науки, которая порождает необходимость проведения данного исследования, — отыскать на основе тщательного анализа имеющихся теоретических и экспериментальных данных наименьшую совокупность возможных моделей.

Наиболее трудной и наименее разработанной является задача планирования экспериментов, когда функция  $\eta(\mathbf{x})$  совершенно неизвестна (уровень 3)

Вряд ли вообще возможно спланировать эксперимент, который позволил бы разрешить сформулированную задачу в целом. Однако ее решение можно свести к некоторой последовательной процедуре, которая подразумевает чередование экспериментов (планирование и практическое осуществление) следующих видов:

а) Функциональный вид поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \theta)$  известен. Требуется определить или уточнить параметры  $\theta$ .

б) На основании теоретического анализа происходящих процессов или в результате предыдущих экспериментов выдвинуто две (или несколько) гипотезы о виде поверхности отклика:

$$\eta(\mathbf{x}) = \begin{cases} \eta_1(\mathbf{x}, \theta_1) \\ \eta_2(\mathbf{x}, \theta_2) \end{cases}$$

Требуется найти зависимость  $\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)$ , наилучшим образом описывающую изучаемый объект.

Более подробно последовательный процесс поиска математической модели представлен на приведенной ниже схеме.

Блок 1 соответствует экспериментальному этапу работы, т. е. техническому осуществлению спланированных ранее опытов. Обычно проведению планируемых экспериментов предшествует проведение некоторого «затравочного» эксперимента, который позволяет получить грубую информацию об исследуемом процессе, так как при полном отсутствии априорной информации планирование невозможно.

Следующим этапом работы (блок 2) является вычисление оценок параметров  $\theta$  в предположении, что функциональный вид  $\eta(x, \theta)$  известен. Иногда вычислению оценок параметров предшествует анализ экспериментальных данных с точки зрения дискриминации конкурирующих моделей.





После того как найдены оценки параметров, необходимо проверить, согласуется ли поведение функции  $\tilde{\eta}(\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \tilde{\theta})$ , где  $\tilde{\theta}$  — значения оценок, с экспериментальными данными (блок 3).

Если функция  $\tilde{\eta}(\mathbf{x})$  достаточно хорошо удовлетворяет экспериментальным данным, то в зависимости от обстоятельств эксперимент либо прекращается, либо планируется дополнительный эксперимент по уточнению всей совокупности параметров или некоторой наиболее интересной для экспериментатора их группы (блок 4).

Если функция  $\tilde{\eta}(\mathbf{x})$  не удовлетворяет экспериментальным данным, то возникает необходимость более тщательного анализа происходящих явлений. При отсутствии каких-либо доводов в пользу выдвижения новой модели следует обратиться к планированию уточняющего эксперимента. Если же имеются факты, которые говорят о возможности описания изучаемых явлений некоторой иной по сравнению с первоначальной моделью, то необходимо приступить к планированию эксперимента, который позволил бы выяснить, какая из этих моделей наилучшим образом описывает изучаемый объект (блок 6).

Таким образом, стратегию проведения эксперимента по выяснению математической модели при априорных сведениях, соответствующих уровню 3, можно представить в виде последовательности циклов 4—1—2—3 и 5—6—1—2—3 (см. схему). Порядок чередования этих циклов определяется результатами проверки согласия между моделью и данными (блок 3).

Во многих случаях аналогичную стратегию можно применить и к планированию экспериментов, соответствующих второму уровню априорных сведений.

## ГЛАВА 1

# РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ И КРИТЕРИИ ОПТИМАЛЬНОСТИ РЕГРЕССИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

### § 1.1. Основные элементы матричной алгебры

Настоящий параграф носит справочный характер. Подробное истолкование определений и доказательства основных результатов, излагаемых ниже, можно найти в [8]—[11].

#### 1. Основные свойства матриц.

*Определение 1.* Прямоугольная таблица чисел

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{vmatrix}$$

называется матрицей.

Если  $m=n$ , то матрица называется квадратной, а число  $m$ , равное  $n$ , — ее порядком. Если  $m=1$  или  $n=1$ , то матрица называется соответственно вектором-строкой или вектором-столбцом. В общем случае матрица называется прямоугольной (с размерами  $m \times n$ ) или  $m \times n$ -матрицей. Числа, составляющие матрицу, называются ее элементами.

При двухиндексном обозначении элементов первый индекс указывает номер строки, а второй — номер столбца. При  $m=1$  или  $n=1$  один из индексов опускается.

Матрицу  $m \times n$  будем обозначать одной буквой  $A$  или

$$\|A_{ik}\| \quad (i=1, 2, \dots, m; \quad k=1, 2, \dots, n).$$

Если  $\mathbf{A}$  — квадратная матрица, то используется обозначение  $\|A_{ik}\|_1^m$ .

*Определение 2.* Прямоугольная матрица  $\mathbf{A}^T$  размера  $n \times m$  называется транспонированной матрицей  $\mathbf{A}$  размера  $m \times n$ , если

$$A_{ik}^T = A_{ki} \quad (i=1, 2, \dots, m; \quad k=1, 2, \dots, n).$$

Легко проверить, что  $(\mathbf{A}^T)^T = \mathbf{A}$ .

*Определение 3.* Суммой двух прямоугольных матриц  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  одинаковых размеров  $m \times n$  называется матрица  $\mathbf{C}$  тех же размеров, элементы которой равны суммам соответствующих элементов матриц  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$ :

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} + \mathbf{B},$$

если

$$C_{ik} = A_{ik} + B_{ik} \quad (i=1, 2, \dots, m; \quad k=1, 2, \dots, n).$$

Из определения 3 непосредственно следует:

- 1)  $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A}$ ;
- 2)  $(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} = \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C})$ ;
- 3)  $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^T = \mathbf{A}^T + \mathbf{B}^T$ .

Здесь  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$  — произвольные прямоугольные матрицы одинаковых размеров.

*Определение 4.* Произведением матрицы  $\mathbf{A}$  на число  $\alpha$  называется матрица  $\mathbf{C}$ , элементы которой получаются из соответствующих элементов матрицы  $\mathbf{A}$  умножением их на число  $\alpha$ :

$$\mathbf{C} = \alpha \mathbf{A},$$

если

$$C_{ik} = \alpha A_{ik} \quad (i=1, 2, \dots, m; \quad k=1, 2, \dots, n).$$

Легко видеть, что

- 1)  $\alpha(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \alpha \mathbf{A} + \alpha \mathbf{B}$ ;
- 2)  $(\alpha + \beta) \mathbf{A} = \alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{A}$ ;
- 3)  $(\alpha\beta) \mathbf{A} = \alpha(\beta \mathbf{A})$ ;
- 4)  $(\alpha \mathbf{A})^T = \alpha \mathbf{A}^T$ .

Разность двух матриц определяется равенством

$$\mathbf{A} - \mathbf{B} = \mathbf{A} + (-1) \mathbf{B}.$$

*Определение 5.* Произведением двух прямоугольных матриц  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  размеров  $m \times n$  и  $n \times q$  соответственно называется матрица  $\mathbf{C}$  размером  $m \times q$ , элементы которой

равны:

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} C_{kj} \quad (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, q).$$

Непосредственно, опираясь на определение 5, легко проверить, что

- 1)  $(\mathbf{AB})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{BC})$ ;
- 2)  $(\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{AC} + \mathbf{BC}$ ;
- 3)  $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC}$ ;
- 4)  $(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$ .

Заметим, что, вообще говоря,  $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$ .

*Определение 6.* Квадратная матрица  $\mathbf{A}^{-1}$  порядка  $m$  называется матрицей, обратной матрице  $\mathbf{A}$ , если

$$\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}_m,$$

где  $\mathbf{I}_m = \|\delta_{ik}\|_1^m$  — квадратная матрица, диагональные элементы которой  $\delta_{ii}$  равны единице, а остальные — нулю.

Из определения 6 следует:

- 1)  $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ , если  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  — квадратные матрицы одного размера;
- 2)  $(\alpha\mathbf{A})^{-1} = \alpha^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ ;
- 3)  $(\mathbf{A}^T)^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^T$ ;
- 4)  $(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}$ .

**II. Определитель квадратной матрицы.**

*Определение 7.* Определителем  $m$ -го порядка или определителем квадратной матрицы  $\mathbf{A}$  порядка  $m$  называется число, полученное из элементов этой матрицы по формуле

$$\begin{aligned} |\mathbf{A}| &= |A_{ik}|_1^m = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1m} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mm} \end{vmatrix} = \\ &= \sum (-1)^k A_{1k_1} A_{2k_2} \dots A_{mk_m}, \end{aligned}$$

где  $k_1, k_2, \dots, k_m$  пробегают все возможные  $m!$  перестановок из чисел  $1, 2, \dots, m$ ;  $k$  равно числу инверсий в каждой перестановке.

Определители, составленные из части элементов (подматрицы) матрицы  $A$ , обозначаются следующим образом:

$$A \begin{pmatrix} i_1, i_2, \dots, i_p \\ k_1, k_2, \dots, k_p \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} A_{i_1 k_1} & A_{i_1 k_2} & \dots & A_{i_1 k_p} \\ A_{i_2 k_1} & A_{i_2 k_2} & \dots & A_{i_2 k_p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{i_p k_1} & A_{i_p k_2} & \dots & A_{i_p k_p} \end{vmatrix}.$$

Из определения 7 следует:

- 1)  $|A| = |A^T|$ ;
- 2)  $|A| = |A^{-1}|^{-1}$ ;
- 3)  $|\alpha A| = \alpha^m |A|$ ,

где  $m$  — порядок матрицы  $A$ .

*Определение 8.* Если определитель матрицы равен нулю, то такая матрица называется особенной.

*Определение 9.* Рангом произвольной матрицы  $A$  называется размер наибольшей квадратной подматрицы, определитель которой отличен от нуля.

**Теорема 1.1.1** (формула Бине—Коши). Если  $C = AB$ , где  $A$  — матрица размера  $m \times n$  и  $B$  — размера  $n \times m$ , то

$$|C| = \sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_m \leq n} A \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & m \\ k_1 & k_2 & \dots & k_m \end{pmatrix} B \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & \dots & m \\ 1 & 2 & \dots & m \end{pmatrix}.$$

Отсюда, например, следует, что для квадратных матриц

$$|AB| = |A| \cdot |B|.$$

Если  $C = AB$  и  $r_A, r_B, r_C$  — ранги матриц  $A, B, C$ , то, опираясь на формулу Бине—Коши, можно получить, что

$$r_C \leq \min(r_A, r_B).$$

**Теорема 1.1.2.** Пусть матрица  $A$  имеет размер  $n \times m$  и матрица  $B$  — диагональная ( $B_{ik} = 0$ , если  $i \neq k$ ;  $1 \leq i, k \leq m$ ); тогда

$$|ABA^T| = \sum \left[ A^2 \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ i_1 & i_2 & \dots & i_n \end{pmatrix} \prod_{\alpha=1}^n B_{i_\alpha i_\alpha} \right],$$

где сумма распространяется на все возможные миноры, составленные из  $n$  строк и  $n$  столбцов с номерами  $i_1, i_2, \dots, i_n$ .

### III. Операции с блочными матрицами.

Разобьем матрицу  $A$  на прямоугольные блоки:

$$A = \left\| \begin{array}{cccc} \overbrace{A_{11}}^{n_1} & \overbrace{A_{12}}^{n_2} & \dots & \overbrace{A_{1t}}^{n_t} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2t} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{s1} & A_{s2} & \dots & A_{st} \end{array} \right\| \begin{array}{l} \} m_1 \\ \} m_2 \\ \dots \\ \} m_t \end{array}$$

Действия над блочными матрицами производятся по тем же формальным правилам, как и в случае, когда вместо блоков имеются числовые элементы (см. раздел I). При этом разбиение на блоки должно быть таково, чтобы там, где это необходимо, имели смысл операции  $A_{p_1 q_1} + B_{p_1 q_1}$  и  $A_{p_1 q_1} \cdot B_{p_2 q_2}$ .

**Теорема 1.1.3.** Пусть

$$\Delta = \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix},$$

тогда

$$\Delta = |A| \cdot |D - CA^{-1}B| = |A - BD^{-1}C| \cdot |D|.$$

**Теорема 1.1.4** (формула Фробениуса). Пусть

$$M = \begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix},$$

тогда

$$M^{-1} = \begin{vmatrix} A^{-1} + A^{-1}BH^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}BH^{-1} \\ -H^{-1}CA^{-1} & H^{-1} \end{vmatrix}, \quad (1.1.1)$$

если  $|A| \neq 0$ , и

$$M^{-1} = \begin{vmatrix} K^{-1} & -K^{-1}BD^{-1} \\ -D^{-1}CK^{-1} & D^{-1} + D^{-1}CK^{-1}BD^{-1} \end{vmatrix}, \quad (1.1.2)$$

если  $|D| \neq 0$ .

В (1.1.1) и (1.1.2) использованы обозначения  $H = D - CA^{-1}B$  и  $K = A - BD^{-1}C$ .

**Теорема 1.1.5.** Если  $B = A^{-1}$ , то при любых  $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq n$

$$B \begin{pmatrix} i_1, i_2, \dots, i_p \\ k_1, k_2, \dots, k_p \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{\sum_{\nu=1}^p i_{\nu} + \sum_{\nu=1}^p k_{\nu}} \cdot A \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & \dots & k_{n-p} \\ i_1 & i_2 & \dots & i_{n-p} \end{pmatrix}}{A \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & m \\ 1 & 2 & \dots & m \end{pmatrix}},$$

где  $i_1 < i_2 < \dots < i_p$  вместе с  $i'_1 < i'_2 < i'_3 < \dots < i'_{n-p}$ , а  $k_1 < k_2 < \dots < k_p$  вместе с  $k'_1 < k'_2 < \dots < k'_{n-p}$  составляют полную систему индексов.

Если  $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$  и

$$\mathbf{B} = \begin{vmatrix} \mathbf{B}_{rr} & \mathbf{B}_{rq} \\ \mathbf{B}_{qr} & \mathbf{B}_{qq} \end{vmatrix} \quad \text{и} \quad \mathbf{A} = \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{rr} & \mathbf{A}_{rq} \\ \mathbf{A}_{qr} & \mathbf{A}_{qq} \end{vmatrix},$$

то из теоремы 1.1.5, в частности, следует

$$|\mathbf{B}_{rr}| = \frac{|\mathbf{A}_{qq}|}{|\mathbf{A}|} \quad (1.1.3)$$

**IV. Положительно определенные матрицы.**

*Определение 10.* Квадратная матрица  $\mathbf{A} = \|A_{ik}\|_i^m$  называется симметричной, если  $A_{ik} = A_{ki}$  (или  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ ).

В дальнейшем, если это не будет оговорено особо, рассматриваются только действительные матрицы, т. е. такие матрицы, элементы которых — действительные числа.

*Определение 11.* Симметричная матрица  $\mathbf{A}$  называется положительно определенной, если квадратичная форма

$$Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{i,j=1}^m A_{ij} x_i x_j$$

положительна для всех нетривиальных систем значений действительных переменных  $x_i$ , т. е. для

$$\mathbf{x}^T = \|x_1, x_2, \dots, x_m\| \neq \|0, 0, \dots, 0\|.$$

Если при тех же условиях  $Q(\mathbf{x}) \geq 0$ , то матрица  $\mathbf{A}$  называется положительно полуопределенной.

**Теорема 1.1.6.** Для того чтобы симметричная матрица  $\mathbf{A}$  порядка  $m$  была положительно определенной, необходимо и достаточно, чтобы

$$A \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & k \\ 1 & 2 & \dots & k \end{pmatrix} > 0, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Отсюда можно вывести, что для положительно определенной матрицы все ее главные миноры больше нуля:

$$A \begin{pmatrix} i_1 & i_2 & \dots & i_k \\ i_1 & i_2 & \dots & i_k \end{pmatrix} > 0$$

$$(1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq m; k = 1, 2, \dots, m),$$

в частности, все ее диагональные элементы должны быть больше нуля.

**Теорема 1.1.7.** Для того чтобы симметричная матрица  $A$  была положительно полуопределенной, необходимо и достаточно, чтобы все ее главные миноры были неотрицательны:

$$A \begin{pmatrix} i_1, & i_2, & \dots, & i_k \\ i_1, & i_2, & \dots, & i_k \end{pmatrix} \geq 0$$

$$(1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n; k = 1, 2, \dots, n).$$

**Определение 12.** Рассмотрим матрицу  $\lambda I_m - A$ . Определитель этой матрицы называется характеристическим многочленом матрицы  $A$ . Корни  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$  уравнения

$$|\lambda I_m - A| = 0$$

называются характеристическими числами матрицы  $A$ .

**Теорема 1.1.8.** Симметричная матрица  $A$  является положительно определенной (полуопределенной) в том и только в том случае, когда все ее характеристические числа положительны (неотрицательны), т. е. когда она представима в виде

$$A = U \|\lambda_i \delta_{ik}\|_i^m U^T, \quad \lambda_i > 0 \quad (\lambda_i \geq 0),$$

где  $U U^T = I_m$  ( $U$  — ортогональная матрица).

Из данной теоремы следует, что любую положительно полуопределенную матрицу  $A$  можно представить в виде:

$$A = F F^T,$$

где  $F = U \|\sqrt{\lambda_i} \delta_{ik}\|_i^m U^T$ .

**Теорема 1.1.9.** Если матрица  $A$  представима в виде

$$A = F F^T,$$

то она — положительно полуопределенная. Если матрица  $F$  — квадратная и  $|F|^2 > 0$ , то матрица  $A$  — положительно определенная.

**Теорема 1.1.10.** Пусть даны две матрицы одного порядка  $A$  и  $B$  и пусть матрица  $A$  положительно определена. Тогда найдется такая матрица  $T$ , что

$$T B T^T = A, \quad \Lambda_{ik} = \lambda_i \delta_{ik} \quad (i, k = 1, 2, \dots, m)$$

и

$$T A T^T = I_m.$$



## V. Основные неравенства.

**Теорема 1.1.11.** (неравенство Адамара). Пусть  $A$  — квадратная действительная матрица порядка  $m$ , тогда

$$|A|^2 \leq \prod_{i=1}^m \sum_{j=1}^m A_{ij}^2.$$

Если при этом  $A$  — положительно определенная, то

$$|A| \leq \prod_{i=1}^m A_{ii}$$

и (обобщенное неравенство Адамара)

$$|A| \leq A \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & p \\ 1 & 2 & \dots & p \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} p+1 & \dots & n \\ p+1 & \dots & n \end{pmatrix}.$$

В дальнейшем неравенство  $C > 0$  ( $\geq 0$ ) означает, что матрица  $C$  — положительно определенная (полуопределенная). Неравенство  $A > B$  ( $A \geq B$ ) эквивалентно тому, что

$$A - B > 0 \quad (\geq 0).$$

**Теорема 1.1.12.** Если  $A$  и  $B$  — положительно определенные матрицы, то

$$\alpha A^{-1} + (1 - \alpha) B^{-1} \geq [\alpha A + (1 - \alpha) B]^{-1}, \quad 0 < \alpha < 1,$$

причем знак равенства имеет место, если только  $A = B$ .

**Теорема 1.1.13.** Если матрицы  $A_j$  имеют размер  $n \times t$  и  $B_j$  — квадратные положительно определенные матрицы порядка  $t_j$  ( $j = 1, 2$ ), то

$$\begin{aligned} (1 - \alpha) A_1 B_1^{-1} A_1^T + \alpha A_2 B_2^{-1} A_2^T &\geq \\ &\geq [(1 - \alpha) A_1 + \alpha A_2] \cdot [(1 - \alpha) B_1 + \alpha B_2]^{-1} \cdot [(1 - \alpha) A_1^T + \alpha A_2^T], \\ &0 < \alpha < 1. \end{aligned}$$

**Теорема 1.1.14.** Если  $A$  и  $B$  — положительно определенные матрицы порядка  $m$  и  $0 < \alpha < 1$ , то

$$|\alpha A + (1 - \alpha) B| \geq |A|^\alpha \cdot |B|^{1-\alpha},$$

причем равенство имеет место, если только  $A = B$ .

Обозначим сумму диагональных элементов квадратной матрицы  $A$  через  $\text{Sp } A$ :

$$\text{Sp } A = \sum_{i=1}^m A_{ii}.$$

Легко проверить, что

$$\text{Sp} \mathbf{AB} = \text{Sp} \mathbf{BA}, \quad \text{Sp} \mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{U}^T = \text{Sp} \mathbf{A}, \quad (1.1.4)$$

где  $\mathbf{U}$  — ортогональная матрица. Из (1.1.4), в частности, следует, что

$$\text{Sp} \mathbf{A} = \sum_{i=1}^m \lambda_i,$$

где  $\lambda_i$  — характеристические числа матрицы  $\mathbf{A}$ .

**Теорема 1.1.15.** Если  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  — положительно определенные матрицы порядка  $m$ , то

$$\text{Sp} \mathbf{AB} \geq m |\mathbf{A}|^{\frac{1}{m}} \cdot |\mathbf{B}|^{\frac{1}{m}}.$$

**Теорема 1.1.16.** Если  $\mathbf{A} > \mathbf{B}$ , то  $|\mathbf{A}| > |\mathbf{B}|$ .

**Теорема 1.1.17.** Если  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  — положительно полуопределенные матрицы ранга  $r_A$  и  $r_B$  соответственно, то матрица  $\mathbf{C} = \mathbf{A} + \mathbf{B}$  имеет ранг

$$r_C \leq r_A + r_B.$$

## VI. Дифференцирование и интегрирование матриц.

**Определение 13.** Элементы матрицы  $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$  равны производным от соответствующих элементов матрицы  $\mathbf{A}$ :

$$\left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)_{ik} = \frac{\partial A_{ik}}{\partial t} \quad (i = 1, 2, \dots, m; \quad k = 1, 2, \dots, m).$$

Непосредственно из определения следует, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{AB}) &= \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{B} + \mathbf{A} \left( \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right), \\ \frac{\partial}{\partial t} \text{Sp} \mathbf{A} &= \text{Sp} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \end{aligned}$$

Если  $\mathbf{A}$  — квадратная матрица и  $|\mathbf{A}| \neq 0$ , то

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}^{-1} &= -\mathbf{A}^{-1} \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) \mathbf{A}^{-1}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \ln |\mathbf{A}| &= \text{Sp} \mathbf{A}^{-1} \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right). \end{aligned} \quad (1.1.5)$$

**Определение 14.** Элементы матрицы  $\int \mathbf{A} dt$  равны интегралам от соответствующих элементов матрицы  $\mathbf{A}$ :

$$\left( \int \mathbf{A} dt \right)_{ik} = \int A_{ik} dt \quad (i = 1, 2, \dots, m; \quad k = 1, 2, \dots, n).$$

## § 1.2. Общие требования, предъявляемые к оценкам

Будем предполагать, что результаты измерений являются случайными величинами, причем

$$E(y/\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \theta), \quad (1.2.1)$$

где  $y$  — результат измерения в точке  $\mathbf{x}$ ,  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  — функция, вид которой известен,  $\theta^T = \|\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m\|$  — неизвестные параметры, оператор  $E$  соответствует операции усреднения.

Пусть целью анализа экспериментальных данных является определение оценок неизвестных параметров  $\theta$  или оценки поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  в некоторой заданной области  $X_0$ . Так как результаты наблюдений — случайные величины (в простейшем случае результат наблюдения является суммой истинного значения  $y_{\text{ист}}$  и случайной помехи), то, опираясь на них, мы, вообще говоря, не можем получить истинных значений  $\theta_{\text{ист}}$  для неизвестных параметров.

Вместо  $\theta_{\text{ист}}$  приходится использовать те или иные случайные величины  $\tilde{\theta}$ , которые некоторым образом зависят от результатов наблюдений:

$$\tilde{\theta} = \Psi(y_1/\mathbf{x}_1, y_2/\mathbf{x}_2, \dots, y_n/\mathbf{x}_n),$$

где  $y_i$  — результат наблюдения в точке  $\mathbf{x}_i$ . Величины  $\tilde{\theta}$  называются  $\mathbf{x}_i$  (точечными) оценками для  $\theta_{\text{ист}}$ . Некоторые значения  $\mathbf{x}_i$  могут для различных  $i$  совпадать между собой.

Эксперименты, цель которых — поиск оценок неизвестных параметров или неизвестной поверхности отклика в предположении справедливости (1.2.1), мы будем называть регрессионными. Процедуру поиска этих оценок будем называть регрессионным анализом.

Чтобы оценки  $\tilde{\theta}$  имели практическую ценность, они должны обладать, по возможности, такими свойствами, как состоятельность, несмещенность, достаточность, эффективность (см., например, [12] — [17]).

В дальнейшем мы будем наиболее часто использовать понятие несмещенности, состоятельности и эффективности. Сформулируем эти понятия в применении к задачам, рассматриваемым в данной книге.

**Несмещенность.** Оценки  $\tilde{\theta}$  — несмещенные, если их математические ожидания равны истинным значениям параметров:

$$E[\tilde{\theta}] = \theta_{\text{ист.}}$$

**Состоятельность.** Оценки  $\tilde{\theta}_N$  состоятельные, если они сходятся по вероятности к истинным значениям параметров:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P[(\tilde{\theta}_N - \theta_{\text{ист.}})^T (\tilde{\theta}_N - \theta_{\text{ист.}}) \geq \varepsilon] = 0.$$

Здесь индекс « $N$ » означает, что оценка  $\tilde{\theta}_N$  получена после  $N$  измерений;  $\varepsilon$  — любое наперед заданное положительное число; величина  $P[A \geq \varepsilon]$  есть вероятность того, что  $A \geq \varepsilon$ .

**Эффективность.** Несмещенные оценки  $\tilde{\theta}$  — эффективны, если имеет место неравенство

$$D(\tilde{\theta}) \leq D(\tilde{\tilde{\theta}}),$$

где  $D(\tilde{\theta})$  — дисперсионная матрица оценок  $\tilde{\theta}$ , а  $D(\tilde{\tilde{\theta}})$  — дисперсионная матрица любых других несмещенных оценок  $\tilde{\tilde{\theta}}$ .

Для каждой функции  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  и каждого закона распределения результатов наблюдений  $p(y/\mathbf{x})$  будут, вообще говоря, иметься свои «наилучшие» оценки  $\tilde{\theta}$ , т. е. такие оценки, для которых выполнялись перечисленные выше свойства (или, по крайней мере, большая часть из них).

Подобная зависимость от вида функций  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  и  $p(y/\mathbf{x})$  крайне неудобна на практике (для каждой экспериментальной ситуации — свой алгоритм анализа и планирования эксперимента). Поэтому разумно поступиться точным выполнением какого-либо из указанных свойств, но построить оценки, которые вычислялись бы по одному и тому же алгоритму для любого вида  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  и  $p(y/\mathbf{x})$ .

Ниже будет рассмотрен метод анализа экспериментов, который опирается лишь на вторые моменты и совершенно не использует вид функции  $p(y/\mathbf{x})$ . Независимость от вида функций  $p(y/\mathbf{x})$  особенно важна, так как на практике закон распределения результатов наблюдений обычно неизвестен.

### § 1.3. Наилучшие линейные оценки

Предположим, что функция  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  линейна по параметрам, т. е.

$$E(y/\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \theta) = \theta^T \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (1.3.1)$$

где  $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) = \|f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})\|$  — известные функции.

Предположим также, что в точках  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  были проведены независимые измерения  $y_1, y_2, \dots, y_n$  с дисперсиями  $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2$ .

Подчеркнем, что никаких предположений о виде  $p(y/\mathbf{x})$ , кроме существования конечных вторых моментов, мы не делаем. Ограничимся рассмотрением только линейных оценок для  $\theta_{\text{ист}}$ , т. е. таких оценок  $\tilde{\theta}$ , которые можно представить в виде

$$\tilde{\theta} = \mathbf{T}y, \quad (1.3.2)$$

где  $y^T = \|y_1, y_2, \dots, y_n\|$ ,  $\mathbf{T}$  — матрица  $m \times n$ . Можно найти оценки  $\tilde{\theta}$  для  $\theta_{\text{ист}}$ , которые являются состоятельными, несмещенными и обладают наименьшими дисперсиями  $D(\theta_a)$  среди множества всех линейных несмещенных оценок. Такие оценки называются наилучшими линейными оценками.

Прежде чем приступить к изложению основной теоремы о наилучших линейных оценках, сформулируем следующую хорошо известную в теории вероятностей теорему.

**Теорема 1.3.1.** Пусть случайные величины  $u$  являются линейной комбинацией случайных величин  $v$ :

$$u = \mathbf{L}v. \quad (1.3.3)$$

Тогда

1) средние значения  $E(u)$  и  $E(v)$  связаны между собой соотношением

$$E(u) = \mathbf{L}E(v); \quad (1.3.4)$$

2) дисперсионные матрицы  $\mathbf{D}(u) = E\{[u - E(u)][u - E(u)]^T\}$  и  $\mathbf{D}(v) = E\{[v - E(v)][v - E(v)]^T\}$  связаны между собой соотношением

$$\mathbf{D}(u) = \mathbf{L}\mathbf{D}(v)\mathbf{L}^T. \quad (1.3.5)$$

Доказательство данной теоремы можно найти, например, в [16].

Докажем теперь, следуя, в основном, [12], теорему о наилучших линейных оценках.

**Теорема 1.3.2.** При сделанных выше предположениях (см. формулу (1.3.1) и пояснения к ней) наилучшими линейными оценками для неизвестных параметров  $\theta$  являются

$$\hat{\theta} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Y}, \quad (1.3.6)$$

где матрица  $\mathbf{M}$  равна

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \quad (1.3.7)$$

и предполагается неособенной,

$$\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^n \omega_i y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \quad (1.3.8)$$

и  $\omega_i = \sigma_i^{-2}$ .

Дисперсионная матрица оценок  $\hat{\theta}$  равна

$$\mathbf{D}(\hat{\theta}) = \mathbf{M}^{-1}. \quad (1.3.9)$$

**Доказательство.** Установим, что оценки 1.3.6 — несмещенные. Согласно теореме 1.3.1

$$E(\hat{\theta}) = E(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{Y}) = \mathbf{M}^{-1} E(\mathbf{Y}). \quad (1.3.10)$$

Используя (1.3.1) и явный вид  $\mathbf{Y}$ , получим

$$\begin{aligned} E(\mathbf{Y}) &= E\left[\sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) y_i\right] = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) E(y_i) = \\ &= \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}} = \mathbf{M} \theta_{\text{ист}}. \end{aligned} \quad (1.3.11)$$

Подставим (1.3.11) в (1.3.10):

$$E(\hat{\theta}) = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \theta_{\text{ист}} = \theta_{\text{ист}},$$

т. е. оценки  $\hat{\theta}$  являются несмещенными.

Докажем теперь, что дисперсии  $D(\theta_{\alpha})$  являются наименьшими среди всех линейных несмещенных оценок.

Рассмотрим произвольные линейные несмещенные оценки (1.3.2). Так как оценки  $\tilde{\theta}$  — несмещенные, то

$$E(\tilde{\theta}) = E(\mathbf{T}y) = \theta_{\text{ист}}$$

или, используя (1.3.1),

$$E(\mathbf{T}\mathbf{y}) = \mathbf{T}E(\mathbf{y}) = \mathbf{T}\mathbf{F}^T\boldsymbol{\theta}_{\text{ист}} = \boldsymbol{\theta}_{\text{ист}}, \quad (1.3.12)$$

где

$$\mathbf{F} = \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_1), \mathbf{f}(\mathbf{x}_2), \dots, \mathbf{f}(\mathbf{x}_n)\|.$$

Из (1.3.12) следует необходимое ниже вспомогательное равенство

$$\mathbf{T}\mathbf{F}^T = \mathbf{I}_m, \quad (1.3.13)$$

$\mathbf{I}_m$  — единичная матрица.

Согласно теореме 1.3.1 дисперсионная матрица оценок  $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$  равна

$$\mathbf{D}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{T}\mathbf{D}(\mathbf{y})\mathbf{T}^T, \quad (1.3.14)$$

где

$$D_{ik}(\mathbf{y}) = \sigma_{ii}^2 \delta_{ik}.$$

Введем матрицы

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \quad \text{и} \quad \mathbf{T} = \mathbf{T}\boldsymbol{\Sigma},$$

где

$$\Sigma_{ik} = \sigma_i \delta_{ik}, \quad \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^T = \mathbf{D}(\mathbf{y}).$$

Выражения (1.3.13) и (1.3.14) можно переписать в виде

$$\mathbf{T}\mathbf{F}^T = \mathbf{I}_m \quad (1.3.15)$$

и

$$\mathbf{D}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{T}\mathbf{T}^T. \quad (1.3.16)$$

Справедливо следующее тождество:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{T}\mathbf{T}^T &\equiv \{(\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{F}\} \{(\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{F}\}^T + \\ &+ \{\mathbf{T} - (\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{F}\} \{\mathbf{T} - (\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{F}\}^T. \end{aligned} \quad (1.3.17)$$

Тождество (1.3.17) легко проверить, раскрыв скобки и воспользовавшись (1.3.15):

$$\begin{aligned} &(\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{F}\mathbf{F}^T(\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1} + \mathbf{T}\mathbf{T}^T - (\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{F}\mathbf{T}^T - \mathbf{T}\mathbf{F}(\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1} + \\ &+ (\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{F}\mathbf{F}^T(\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1} = \\ &= (\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1} + \mathbf{T}\mathbf{T}^T - (\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1}\mathbf{I} - \mathbf{I}(\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1} + (\mathbf{F}\mathbf{F}^T)^{-1} = \mathbf{T}\mathbf{T}^T. \end{aligned}$$

Каждое из слагаемых правой части (1.3.17) есть матрица типа  $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ , диагональные элементы которой

$$\{\mathbf{A}\mathbf{A}^T\}_{\alpha\alpha} = \sum_{\beta} A_{\alpha\beta} A_{\beta\alpha}^T = \sum_{\beta} A_{\alpha\beta}^2$$

не меньше нуля. Следовательно,  $D_{\alpha\alpha}(\hat{\theta})$  будут иметь наименьшее значение при

$$T_0 = (FF^T)^{-1}F.$$

Отсюда следует, что

$$T_0 = (FD^{-1}(y)F^T)^{-1}FD^{-1}(y), \quad (1.3.18)$$

или

$$\hat{\theta} = T_0 y = (FD^{-1}(y)F^T)^{-1}FD^{-1}(y)y = M^{-1}Y, \quad (1.3.19)$$

где  $M$  и  $Y$  определяются формулами (1.3.7) и (1.3.8). Из (1.3.14) и (1.3.18) следует, что

$$D(\hat{\theta}) = (FD^{-1}(y)F^T)^{-1} = M^{-1}. \quad (1.3.20)$$

Сравнивая формулы (1.3.19) и (1.3.20) с формулами (1.3.6) — (1.3.8), нетрудно убедиться в справедливости доказываемой теоремы.

Матрица

$$M = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) f^T(x_i) = \sum_{i=1}^n M(x_i)$$

называется информационной матрицей Фишера.

При построении математического аппарата планирования экспериментов эта матрица будет очень часто встречаться в наших рассуждениях. Отметим следующее важное свойство информационной матрицы.

*Следствие 1.* Информационная матрица Фишера положительно полуопределена.

Действительно,

$$M = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) f^T(x_i) = FF^T.$$

Но по теореме 1.1.9 всякая матрица, которая представима в виде  $AA^T$ , является положительно полуопределенной.

Оцениваемые параметры  $\theta$  являются векторными величинами, и, вообще говоря, точность оценок  $\hat{\theta}$  характеризуется всеми элементами дисперсионной матрицы  $D(\hat{\theta})$ . Поэтому различные оценки для  $\theta$  можно сравнивать не только по диагональным элементам  $D_{\alpha\alpha}(\hat{\theta})$ , как это делалось выше, но и иными способами. Приведем два наиболее распространенных способа сравнения оценок.



1. Оценки  $\hat{\theta}$  предпочтительнее оценок  $\tilde{\theta}$ , если

$$D(\hat{\theta}) = D(\tilde{\theta}) + d,$$

где  $d$  — некоторая положительно определенная матрица, или более кратко,

$$D(\hat{\theta}) > D(\tilde{\theta}).$$

2. Оценки  $\hat{\theta}$  предпочтительнее оценок  $\tilde{\theta}$ , если

$$|D(\hat{\theta})| > |D(\tilde{\theta})|.$$

Определитель  $|D(\hat{\theta})|$  называют обобщенной дисперсией оценок  $\hat{\theta}$ .

Из доказательства теоремы 1.3.2 непосредственно следует, что наилучшая линейная оценка является оптимальной и в смысле обоих из указанных критериев. Более строго этот факт можно сформулировать так.

*Следствие 2.* Наилучшие линейные оценки обладают наименьшей дисперсионной матрицей среди всех линейных несмещенных оценок  $\hat{\theta}$ , т. е.

$$D(\hat{\theta}) \leq D(\tilde{\theta}). \quad (1.3.21)$$

Иными словами, наилучшие линейные оценки являются эффективными среди класса линейных несмещенных оценок. Приведенное матричное неравенство является очевидным следствием формулы (1.3.17):

$$\begin{aligned} D(\hat{\theta}) &\equiv \{(FF^T)^{-1}F\} \{(FF^T)^{-1}F\}^T + \\ &+ \{T - (FF^T)^{-1}F\} \{T - (FF^T)^{-1}F\}^T = \\ &= (FF^T)^{-1} + AA^T = D(\hat{\theta}) + AA^T, \end{aligned}$$

где  $A = \{T - (FF^T)^{-1}F\}$ . Матрица  $AA^T$  положительно полуопределенна (см. теорему 1.1.9), следовательно,

$$D(\hat{\theta}) \leq D(\tilde{\theta}).$$

*Следствие 3.* Определитель дисперсионной матрицы наилучших линейных оценок (1.3.6) — наименьший для всех линейных несмещенных оценок:

$$|D(\hat{\theta})| < |D(\tilde{\theta})|. \quad (1.3.22)$$

Результат (1.3.22) непосредственно следует из (1.3.21) и теоремы 1.1.16. Укажем еще на два полезных следствия из теоремы 1.3.2.

*Следствие 4.* Наилучшими линейными оценками произвольной линейной комбинации  $t = C\theta$  являются  $\hat{t} = C\hat{\theta}$ . Дисперсионная матрица оценок  $\hat{t}$  равна  $D(\hat{t}) = CD(\hat{\theta})C^T$ . Если  $\tilde{t}$  — любая линейная несмещенная оценка параметров  $t$ , отличная от  $\hat{t}$ , то

1.  $D_{\alpha\alpha}(\hat{t}) \leq D_{\alpha\alpha}(\tilde{t})$ ;
2.  $D(\hat{t}) \leq D(\tilde{t})$ ;
3.  $|D(\hat{t})| \leq |D(\tilde{t})|$ .

Доказательство следствия 4 легко провести, опираясь на теорему 1.3.1 и формулу (1.3.17). Действительно, применяя формулу преобразования дисперсий (1.3.5) к обеим частям (1.3.17) и затем, дословно повторяя рассуждения теоремы 1.3.2 и ее следствий 2, 3, мы придем к необходимым результатам.

В некоторых случаях оценки  $\hat{t}$  могут быть найдены, когда информационная матрица — особенная и непосредственное применение формулы  $\hat{t} = C\hat{\theta}$  невозможно. Существует несколько приемов вычисления этих оценок и их дисперсионной матрицы [17, 38]. Во многих прикладных задачах наиболее удобным является прием (точнее, его обобщение), предложенный в [38].

Пусть  $\tilde{M}$  — любая положительно определенная матрица. Тогда

$$\hat{t} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} C[M + \alpha\tilde{M}]^{-1} Y, \quad (1.3.23a)$$

$$D(\hat{t}) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} C[M + \alpha\tilde{M}]^{-1} C^T. \quad (1.3.23б)$$

Можно проверить, что соответствующие пределы не зависят от выбора  $\tilde{M}$ .

*Следствие 5.* Наилучшей линейной оценкой поверхности отклика  $\eta(x, \theta)$  в произвольной точке  $x$  является  $\hat{\eta}(x, \theta) = \theta f^T(x)$ . Дисперсия оценки  $\hat{\eta}(x, \theta)$  равна  $d(x) = f^T(x) D(\hat{\theta}) f(x)$ .

Следствие 5, по существу, является важным частным случаем следствия 4 при  $C = f^T(x)$ . В дальнейшем мы будем называть функцию  $d^{1/2}(x)$  коридором ошибок.

Очень часто в экспериментальной практике в каждой точке  $x_i$  проводится по нескольку независимых измере-

ний  $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ir}$ , каждое с дисперсией  $\sigma_i^{-2}$ . Оказывается, что экспериментатору для построений наилучшей линейной оценки нет необходимости хранить все значения  $y_{ir}$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) ( $r=1, 2, \dots, r_i$ ). Достаточно сохранить лишь значения  $y_i = r_i^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} y_{ir}$ . Чтобы показать это, докажем следующее утверждение.

*Следствие 6.* Если в точках  $\mathbf{x}_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) были получены результаты  $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ir}$ , то наилучшими линейными оценками для  $\theta$  будут

$$\hat{\theta} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Y},$$

где матрица  $\mathbf{M}$  предполагается неособенной и равной

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i), \\ \mathbf{Y} &= \sum_{i=1}^n \omega_i y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i), \\ \omega_i &= \frac{r_i}{\sigma_i^2}. \end{aligned} \tag{1.3.24}$$

Действительно, формулы (1.3.7) и (1.3.8) можно в данном случае записать в виде

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^n \sum_{r=1}^{r_i} \sigma_i^{-2} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i),$$

или, используя введенные выше обозначения,

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^n r_i \sigma_i^{-2} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)$$

и

$$\begin{aligned} \mathbf{Y} &= \sum_{i=1}^n \sum_{r=1}^{r_i} \sigma_i^{-2} y_{ir} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) = \\ &= \sum_{i=1}^n r_i \sigma_i^{-2} \sum_{r=1}^{r_i} r_i^{-1} y_{ir} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^n \omega_i y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i). \end{aligned}$$

Сравнение данных выражений с (1.3.24) показывает справедливость нашего утверждения. Формулы (1.3.24) особенно полезны при большом объеме экспериментальных

данных, так как избавляют от необходимости ввода в память электронно-вычислительных машин ненужной, по существу, информации.

Отметим еще одно важное свойство наилучших линейных оценок.

**Теорема 1.3.3.** *Наилучшая линейная оценка  $\hat{\theta}$  минимизирует сумму взвешенных квадратичных отклонений*

$$S(\theta) = \sum_{i=1}^n w_i [y_i - f^T(\mathbf{x}_i)\theta]^2. \quad (1.3.25)$$

**Доказательство.** Найдем минимум  $S(\theta)$  по  $\theta$ . Дифференцируя (1.3.25) по  $\theta_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ) и приравнявая производные нулю, получим

$$\sum_{i=1}^n w_i f_\alpha(\mathbf{x}_i) \left( y_i - \sum_{\beta=1}^m f_\beta(\mathbf{x}_i) \theta_\beta \right) = 0$$

или, в матричном виде,

$$\sum_{i=1}^n w_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) (y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)\theta) = 0.$$

Раскрывая скобки, получим

$$\sum_{i=1}^n w_i y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta$$

или, используя обозначения (1.3.7) и (1.3.8),

$$\mathbf{Y} = \mathbf{M}\theta.$$

Следовательно, минимум (1.3.25) достигается при

$$\hat{\theta} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Y},$$

что и доказывает теорему.

Теорему 1.3.3 можно сформулировать несколько иначе, а именно: в случае линейной параметризации наилучшие линейные оценки  $\hat{\theta}$  совпадают с оценками по методу наименьших квадратов.

Теорема 1.3.3 и следствие 4 показывают, что наилучшие линейные оценки, являясь «наилучшими» в пространстве параметров  $\hat{\theta}$ , одновременно оказываются «наилучшими», т. е. минимизируют  $d(\mathbf{x})$  и  $S(\theta) = \sum_{i=1}^n w_i [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)\theta]^2$ , и в пространстве результат измерения —

контролируемые переменные. Это свойство наилучших линейных оценок будет неоднократно использоваться при построении математического аппарата планирования экспериментов.

Следует отметить, что наилучшие линейные оценки в общем случае не являются достаточными. Однако для некоторых законов распределений результатов наблюдений, например, для нормального закона распределения, они достаточные.

**Пример.** Пусть

$$E(y/x) = \theta_1 + \theta_2 x$$

и пусть измерения проведены в точках  $x_1 = -1$ ,  $x_2 = 0$ ,  $x_3 = +1$  с дисперсиями  $\sigma_1^2 = 8$ ;  $\sigma_2^2 = \frac{8}{6}$ ;  $\sigma_3^2 = 8$  (рис. 1).

Рассмотрим две оценки для параметров  $\theta_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2$ ). В качестве первой выберем наилучшую линейную оценку. Для этой оценки согласно теореме 1.3.2 дисперсионная матрица равна

$$D(\hat{\theta}) = \left[ \sum_{i=1}^3 \omega_i f(x_i) f^T(x_i) \right]^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{vmatrix}^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{vmatrix},$$

где

$$f^T(x) = \| 1, x \|.$$

В качестве второй оценки для  $\theta$  выберем значения  $\tilde{\theta}$ , при которых имеет место минимум квадратичной формы

$$S(\theta) = \sum_{i=1}^3 [y_i - (\theta_1 + \theta_2 x)]^2.$$

Иногда эти оценки называют оценками, построенными по методу наименьших квадратов без учета весов. Непосредственно дифференцируя  $S(\theta)$  по  $\theta_1$  и  $\theta_2$ , после несложных вычислений получим

$$\tilde{\theta} = T y,$$

где

$$T = \begin{vmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{vmatrix}.$$

Легко проверить, что оценка  $\tilde{\theta}$  — несмещенная. Действительно,

$$F = \|\mathbf{f}(x_1), \mathbf{f}(x_2), \mathbf{f}(x_3)\| = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

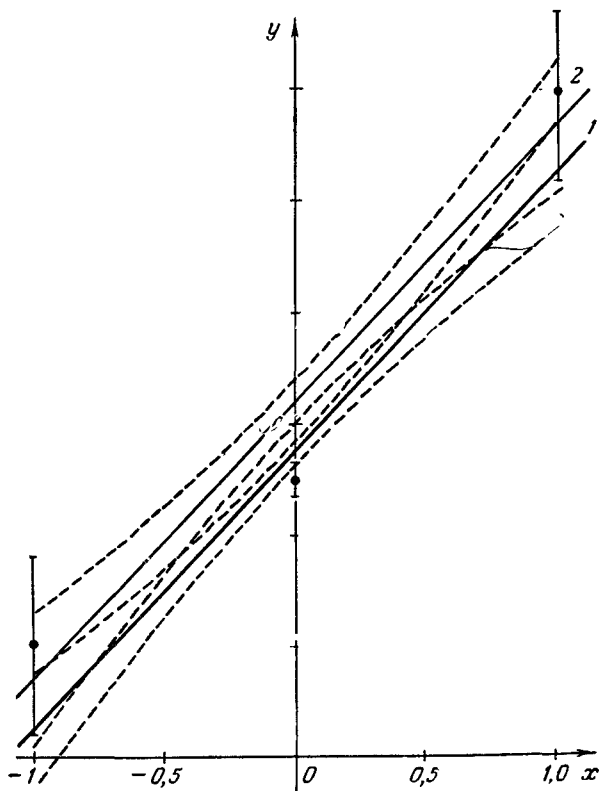


Рис. 1. Результаты обработки экспериментальных данных.

Прямая 1 соответствует наилучшим линейным оценкам, прямая 2 — оценкам, построенным по методу наименьших квадратов без учета весов. Пунктирными линиями нанесены коридоры ошибок.

и, следовательно,  $\mathbf{TF}^T = \mathbf{I}_3$ , что соответствует условию несмещенности (1.3.13).

Из (1.3.14) можно определить дисперсионную матрицу оценок  $\hat{\theta}$ :

$$D(\hat{\theta}) = TD(y)T^T =$$

$$= \begin{vmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{52}{27} & 0 \\ 0 & 4 \end{vmatrix}.$$

Таким образом,  $D(\hat{\theta}) > D(\hat{\theta})$ .

Сравним характеристики оценок  $\hat{\theta}$  и  $\hat{\theta}$  в пространстве измерений. Согласно теореме 1.3.1 для оценки  $\hat{\theta}$  дисперсия оценки прямой  $\theta_1 + \theta_2 x$  в точке  $x$  равна

$$d_1(x) = 1 + 4x^2$$

и для оценки  $\hat{\theta}$

$$d_2(x) = \frac{52}{27} + 4x^2.$$

Т. е. для любого  $x$  (см. рис. 1)

$$d_1(x) < d_2(x).$$

В заключение данного параграфа — несколько слов о состоятельности наилучших линейных оценок. Можно проверить, что эти оценки являются состоятельными, т. е. сходятся по вероятности к истинным значениям  $\theta_{\text{ист}}$ , если

$$\lim_{N \rightarrow \infty} M_N = N \cdot M,$$

где  $N = \sum_{i=1}^n r_i$ , индекс « $N$ » означает, что информационная матрица соответствует  $N$  измерениям,  $M$  — некоторая положительно определенная матрица.

#### § 1.4. Поиск оценок при нелинейной параметризации. Наилучшая квазилинейная оценка

Выше был подробно описан способ нахождения оценок для случая линейной параметризации, когда справедливо условие (1.3.1). Во многих сложных физических, химических или иных экспериментах функция  $\eta(x, \theta)$

является нелинейной по неизвестным параметрам. Проблема поиска оценок в этом случае становится значительно сложнее.

Наиболее распространенным методом поиска оценок при нелинейной параметризации является метод максимума правдоподобия (подробнее его изложение можно найти, например, в [7], [12]—[14]). Этот метод при весьма общих предположениях дает состоятельные, асимптотически нормальные и эффективные оценки. Однако он опирается на знание плотности функции распределения  $p(\mathbf{y}/\mathbf{x})$ . Как уже отмечалось выше (см. § 1.2 и § 1.3), это обстоятельство является сильным ограничением. Поэтому мы по-прежнему обратимся к методам несколько более грубым, чем метод максимума правдоподобия, но которые будут опираться лишь на знание дисперсий  $\sigma_i^2$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ).

Пусть  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  нелинейна по  $\theta$ . Предположим, что имеет место ситуация, изложенная в пояснениях к формуле (1.2.1), и пусть все измерения, принадлежащие  $\mathbf{y}$ , независимы, а измерения, проведенные в одной и той же точке  $x_i$ , имеют одну и ту же дисперсию  $\sigma_i^2$ .

Пусть  $\hat{\theta}$  — решение уравнения

$$\sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \hat{\theta})]^2 = \min_{\theta} \sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta)]^2, \quad (1.4.1)$$

где  $y_i = r_i^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} y_{ir}$  и  $w_i = r_i \sigma_i^{-2}$ .

Если  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  — функция непрерывная по  $\theta$  и функция

$$v^2(\theta, \theta_{\text{ист}}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n w_i [\eta(\mathbf{x}_i, \theta_{\text{ист}}) - \eta(\mathbf{x}_i, \theta)]^2 \quad (1.4.2)$$

существует и имеет единственный минимум при  $\theta = \theta_{\text{ист}}$  ( $\theta_{\text{ист}}$  — истинные значения параметров), то  $\hat{\theta}$  — состоятельные оценки [18]. Пусть функция  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  — гладкая по  $\theta$  в окрестности истинных значений параметров  $\theta_{\text{ист}}$  и пусть уравнение (1.4.1) имеет единственное решение (случай наличия нескольких решений будет рассматриваться в гл. 7), тогда (1.4.1) эквивалентно уравнению

$$\nabla \left\{ \sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta)]^2 \right\} = 0, \quad (1.4.3)$$



где оператор

$$\nabla^T = \left\| \frac{\partial}{\partial \theta_1}, \frac{\partial}{\partial \theta_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial \theta_m} \right\|.$$

Пусть  $\hat{\theta}$  — решение этого уравнения и пусть размер выборки  $\mathbf{y}$  таков, что  $\hat{\theta}$  принадлежит области, где

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{x}, \theta) &\simeq \eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}) + (\theta - \theta_{\text{ист}})^T \mathbf{f}(\mathbf{x}), \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}) = \nabla \eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}). \end{aligned} \quad (1.4.4)$$

Тогда из (1.4.3) следует:

$$\sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta_{\text{ист}})] \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) \quad (1.4.5)$$

или

$$(\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Y}, \quad (1.4.6)$$

где

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i), \quad (1.4.7a)$$

$$\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta_{\text{ист}})] \mathbf{f}(\mathbf{x}_i), \quad (1.4.7b)$$

$$\mathbf{D}(\hat{\theta}) \simeq \mathbf{M}^{-1}. \quad (1.4.7b)$$

Если функция  $\eta(\mathbf{x}; \theta)$  дважды дифференцируема по  $\theta$ , то простейшим критерием возможности замены (1.4.3) на (1.4.6) может служить неравенство

$$m/2 \gg \text{Sp } \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Q}, \quad (1.4.8)$$

где

$$Q_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta_{\text{ист}})] \left. \frac{\partial^2 \eta(\mathbf{x}_i, \theta)}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} \right|_{\theta = \theta_{\text{ист}}}$$

Сравнивая (1.4.6) и (1.4.7) с (1.3.6) и (1.3.9), нетрудно видеть, что и в случае нелинейной параметризации оценки, полученные по методу наименьших квадратов, асимптотически (при достаточно больших размерах выборки  $\mathbf{y}$ ) удовлетворяют тем же критериям оптимальности, что и наилучшие линейные оценки.

Следует отметить одно существенное отличие между случаями линейной и нелинейной параметризации. При линейной параметризации дисперсионная матрица оце-

нок (см. (1.3.9)) не зависит от значения  $\theta_{\text{ист}}$ . При нелинейной параметризации дисперсионная матрица оценок зависит (см. (1.4.7) и пояснения к (1.4.4)) от значения  $\theta_{\text{ист}}$ . По этой причине формула (1.4.7) не может быть непосредственно применена при вычислении дисперсионной матрицы  $D(\hat{\theta}) = M^{-1}$ . Можно, однако, воспользоваться тем, что при достаточно гладкой функции  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \hat{\theta}) \rightarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}) \text{ при } \hat{\theta} \rightarrow \theta_{\text{ист}}.$$

Отсюда следует, что

$$M(\theta_{\text{ист}}) \simeq M(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i, \hat{\theta}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i, \hat{\theta})$$

или

$$D(\hat{\theta}) \simeq M^{-1}(\hat{\theta}).$$

Аналогичная замена  $\theta_{\text{ист}}$  на  $\hat{\theta}$  необходима и при использовании неравенства (1.4.8).

Если функция  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  имеет непрерывные первые и вторые производные по  $\theta$  в замкнутой области  $\Omega$ , содержащей точку  $\theta_{\text{ист}}$ , то, используя любую точку этой области в качестве начального приближения для  $\hat{\theta}$ , можно построить итерационный процесс решения уравнения (1.4.3), в основе которого лежит формула, весьма схожая с (1.4.6):

$$\theta_{s+1} = \theta_s + M^{-1}(\theta_s) \cdot Y(\theta_s).$$

Здесь

$$M(\theta_s) = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i, \theta_s) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i, \theta_s),$$

$$Y(\theta_s) = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i, \theta_s) y_i.$$

Можно показать (см. [19], [20]), что

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \theta_s = \hat{\theta}.$$

## § 1.5. Оценка дисперсии результатов наблюдений. Эффективность эксперимента

Результаты §§ 1.2—1.4 получены в предположении, что дисперсия каждого измерения задана. В данном параграфе мы обобщим эти результаты на случай неизвестных дисперсий.

Пусть, как и прежде,  $y_1, y_2, \dots, y_n$  — результаты измерений в точках  $x_1, x_2, \dots, x_n$ .

Рассмотрим случай равных дисперсий:

$$\sigma_i^2 = \sigma^2 \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

Справедлива следующая теорема.

**Теорема 1.5.1.** Если

$$E(y/\mathbf{x}) = \theta^T \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

и

$$D(y/\mathbf{x}) = \sigma^2,$$

где  $\sigma$  неизвестно, то:

1) наилучшей линейной оценкой для  $\theta$  будет

$$\hat{\theta} = M^{-1} \mathbf{Y}, \quad (1.5.1)$$

где

$$M = \sum_{i=1}^n \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i),$$

$$\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i);$$

2) несмещенной оценкой для дисперсии  $\sigma^2$  будет

$$\sigma^2 = (n - m)^{-1} \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{\theta}^T \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)]^2, \quad (1.5.2)$$

где  $m$  — число неизвестных параметров.

Доказательство. Из теоремы 1.3.2 следует, что наилучшая оценка равна:

$$\begin{aligned} \hat{\theta} &= \left[ \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \right]^{-1} \left[ \sum_{i=1}^n \omega_i y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \right] = \\ &= \omega_i^{-1} \left[ \sum_{i=1}^n \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \right]^{-1} \omega \left[ \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \right] = M^{-1} \mathbf{Y}, \end{aligned}$$

где  $\omega_i = \omega = \sigma^{-2}$ .

Таким образом, в случае равноточных измерений оценка  $\hat{\theta}$  не зависит от абсолютного значения  $\sigma^2$ .

Докажем теперь несмещенность оценки  $\sigma^2$ . Для этого рассмотрим выражение

$$\sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{нст}}]^2,$$

где  $\theta_{\text{ист}}$  — истинные значения искомых параметров. Преобразуем данное выражение:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}}]^2 &= \\ &= \sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta} + \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta} - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}}]^2 = \\ &= \sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta}]^2 + \\ &+ 2 \sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta}] [\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta} - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}}] + \\ &+ \sum_{i=1}^n [\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta} - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}}]^2. \quad (1.5.3) \end{aligned}$$

Второе слагаемое в (1.5.3) в силу (1.5.1) обращается в нуль:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta}] [\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta} - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}}] &= \\ &= \left[ \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) - \hat{\theta}^T \sum_{i=1}^n \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \right] (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) = \\ &= [\mathbf{Y} - \hat{\theta} \mathbf{M}]^T (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) = 0. \end{aligned}$$

Последнее слагаемое в правой части (1.5.3) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n [\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta} - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}}]^2 &= \\ &= (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}})^T \sum_{i=1}^n \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) = \\ &= \text{Sp } \mathbf{M} (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}})^T, \end{aligned}$$

что позволяет переписать (1.5.3) в виде

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta_{\text{ист}}]^2 &= \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta})^2 + \text{Sp } \mathbf{M} (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}})^T = \\ &= (n - m) \hat{\sigma}^2 + \text{Sp } \mathbf{M} (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) (\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}})^T. \quad (1.5.4) \end{aligned}$$

Взяв от обеих частей данного равенства среднее, получим  $n\sigma^2 = (n - m) E(\hat{\sigma}^2) + \sigma^2 \text{Sp} MM^{-1} = (n - m) E(\hat{\sigma}^2) + m\sigma^2$ , или  $E(\hat{\sigma}^2) = \sigma^2$ , т. е. оценка дисперсии (1.5.2) — несмещенная.

Если область действия  $X$ , в которой производятся измерения, сравнительно невелика и экспериментальные условия внутри нее почти постоянны, то предположение о равноточности измерений вполне оправдано.

Экспериментатора при выяснении механизма явления, как правило, интересуют широкие области  $X$ , в которых предположение об однородности экспериментальных условий недопустимо. Однако при этом во многих случаях удается построить функцию эффективности эксперимента  $\lambda(\mathbf{x})$ , которая позволяет сравнивать значение ошибок дисперсий измерений в различных точках:

$$\lambda(\mathbf{x}) = \sigma^{-2} \tilde{\lambda}(\mathbf{x}) = \sigma^{-2}(\mathbf{x}).$$

В тех случаях, когда константа  $\sigma^2$  неизвестна, можно найти ее оценку.

**Теорема 1.5.2.** Если

$$E(y/\mathbf{x}) = \theta^T \mathbf{f}(\mathbf{x}) \text{ и } D(y/\mathbf{x}) = \sigma^2 \tilde{\lambda}^{-1}(\mathbf{x}),$$

то

1) наилучшей линейной оценкой для  $\theta$  будет

$$\hat{\theta} = M^{-1}Y,$$

где

$$M = \sum_{i=1}^n \tilde{\lambda}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i),$$

$$Y = \sum_{i=1}^n \tilde{\lambda}(\mathbf{x}_i) y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i);$$

2) несмещенной оценкой для  $\sigma^2$  будет

$$\hat{\sigma}^2 = (n - m)^{-1} \sum_{i=1}^n \tilde{\lambda}(\mathbf{x}_i) [y_i - \theta^T \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)]^2.$$

Доказательство будет полностью идентично доказательству предыдущей теоремы, если произвести замену:

$$\tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{x}) = \tilde{\lambda}^{1/2}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \tilde{y}_i = \tilde{\lambda}^{1/2}(\mathbf{x}_i) y_i \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

Когда функция  $\tilde{\lambda}(\mathbf{x})$  неизвестна, оценки, аналогичные приведенным в теоремах 1.5.1 и 1.5.2, построить не

удается. В этом случае в каждой точке  $x_i$  рекомендуется проводить по несколько измерений, с тем чтобы имелась возможность вычислить значение оценки дисперсии

$$\hat{\sigma}_i^2 = (r_i - 1)^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} (y_{ir} - y_i)^2.$$

Если в формулах (1.3.7)—(1.3.9) или, что обычно удобнее, в формулах (1.3.24) заменить  $\sigma_i^{-2}$  на  $\hat{\sigma}_i^2$ , то нетрудно показать, что соответствующие оценки будут близки к наилучшим линейным оценкам.

## § 1.6. Регрессионный анализ при наличии ошибок в определении контролируемых переменных

I. Выше математический аппарат регрессионного анализа был развит в предположении, что процесс фиксации контролируемых переменных  $x$  является детерминированным. На практике это требование детерминированности очень часто не выполняется. Если неопределенность при фиксации  $x$  невелика, то использование обычных методов регрессионного анализа не приведет к существенным погрешностям. В противном случае, как будет показано ниже, значения оценок могут заметно отличаться от действительных величин. В частности, оценки параметров, полученные методом наименьших квадратов без учета ошибок в определении  $x$ , могут оказаться либо сильно смещенными, либо просто несостоятельными.

Пусть имеет место экспериментальная ситуация, изложенная в пояснениях к (1.2.1), за исключением того, что контролируемые переменные  $x$  являются не детерминированными, а случайными величинами. Будем предполагать, следуя за [21], что значения координат контролируемых переменных  $x$  строго постоянны в течение данного измерения (например, это может быть положение измерительного прибора в пространстве), но об этих значениях известно лишь, что они являются выборкой из некоторой генеральной совокупности с плотностью функции распределения  $p(x/x_0)$ , несколько первых моментов которой предполагаются известными, а остальные

конечными:

$$\begin{aligned}
 E(x_{\alpha}) &= x_{0\alpha}, \\
 E[(x_{\alpha_1} - x_{0\alpha_1})(x_{\alpha_2} - x_{0\alpha_2})] &= d_{2\alpha_1\alpha_2}; \\
 &\dots\dots\dots \\
 E[(x_{\alpha_1} - x_{0\alpha_1})(x_{\alpha_2} - x_{0\alpha_2}) \dots (x_{\alpha_q} - x_{0\alpha_q})] &= d_{q\alpha_1\alpha_2 \dots \alpha_q}; \\
 d_l &< \infty, \quad l > q, \quad \alpha_j = 1, 2, \dots, k.
 \end{aligned}
 \tag{1.6.1}$$

Для большинства практических задач оказывается вполне достаточно знания лишь первых и вторых моментов.

Так как экспериментатору известны только величины  $y_i$  и  $x_{0i}$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ,  $n$  — число точек, в которых проводились измерения), то для построения схемы регрессионного анализа необходимо знать вид функции плотности распределения  $p(y, \mathbf{x}_0)$ , или, по крайней мере, ее первый и второй моменты для заданного значения  $\mathbf{x}_0$ .

Предположим, что плотность распределения результатов наблюдений  $p(y/\mathbf{x})$  при фиксированном  $\mathbf{x}$  известна. Из формулы полной вероятности (см., например, [16]) нетрудно получить, что

$$p(y, \mathbf{x}_0) = \int_{\Omega} p(y/\mathbf{x}) p(\mathbf{x}/\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}, \tag{1.6.2}$$

где  $\Omega$  — область допустимых (при данном  $\mathbf{x}_0$ ) значений  $\mathbf{x}$  и

$$d\mathbf{x} = dx_1 dx_2 \dots dx_k.$$

Интеграл (1.6.2), зависящий от неизвестных параметров, берется в явном виде лишь для некоторых тривиальных случаев. Поэтому оказывается значительно удобней отыскать несколько первых моментов  $p(y, \mathbf{x}_0)$ . Так как в основу схемы регрессионного анализа будет положен метод наименьших квадратов, то мы ограничимся вычислением лишь первого и второго моментов.

Согласно определению и формуле (1.6.2) первый момент равен

$$E(y, \mathbf{x}_0) = \int_U \int_{\Omega} y p(y/\mathbf{x}) p(\mathbf{x}/\mathbf{x}_0) d\mathbf{x} dy, \tag{1.6.3}$$

где  $U$  — область допустимых значений  $y$ .

Изменив порядок интегрирования и воспользовавшись тем, что

$$\int_{\mathcal{U}} y p(y/\mathbf{x}) dy = E(y/\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \theta),$$

получим

$$E(y, \mathbf{x}_0) = \int_{\mathcal{Q}} \eta(\mathbf{x}, \theta) p(\mathbf{x}/\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}. \quad (1.6.4)$$

Если функция  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  в окрестности  $\mathbf{x}_0$  — гладкая, то можно воспользоваться разложением ее в ряд Тейлора:

$$\eta(\mathbf{x}, \theta) = \eta(\mathbf{x}_0, \theta) + (\nabla_1 \mathbf{X}_1) + \frac{1}{2} (\nabla_2 \mathbf{X}_2) + \dots \quad (1.6.5)$$

где

$$\begin{aligned} (\nabla_j \mathbf{X}_j) &= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_j} \nabla^{j\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_j} X^{j\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_j}, \\ \nabla^{j\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_j} &= \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_2}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_j}} \eta(\mathbf{x}, \theta) \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}, \\ X^{j\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_j} &= (x_{\alpha_1} - x_{0\alpha_1}) (x_{\alpha_2} - x_{0\alpha_2}) \dots (x_{\alpha_j} - x_{0\alpha_j}). \end{aligned}$$

Из (1.6.4), (1.6.5) и (1.6.1) следует

$$E(y, \mathbf{x}_0) = \eta(\mathbf{x}_0, \theta) + \frac{1}{2} (\nabla_2 \mathbf{d}_2) + \left( \text{члены типа } \frac{1}{l} (\nabla_l \mathbf{d}_l) \right). \quad (1.6.6)$$

В дальнейшем будем предполагать, что членами с  $l > 2$  можно пренебречь.

В большинстве практических случаев при не очень больших ошибках контролируемых переменных и достаточно гладких функциях  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  это предположение выполняется. Учет членов высоких порядков (в предположении, что известны соответствующие матрицы  $l$ -х моментов  $\mathbf{x}$ ,  $l > 2$ ) делает дальнейшие вычисления лишь более громоздкими, трудностей принципиального характера при этом не возникает.

Следует отметить, что учет этих членов, как правило, становится необходимым, если  $\mathbf{x}_0$  находится вблизи границы его допустимых значений.

Опираясь на разложение (1.6.5) функции  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$ , нетрудно вычислить второй центральный момент:

$$\begin{aligned} \sigma^2(y, \mathbf{x}_0) &= \int_{\mathcal{U}} \int_{\mathcal{Q}} [y - E(y, \mathbf{x}_0)]^2 p(y, \mathbf{x}_0) dy = \\ &= \int_{\mathcal{Q}} \lambda^{-1}(\mathbf{x}) [\eta(\mathbf{x}, \theta) - E(y, \mathbf{x}_0)]^2 p(\mathbf{x}/\mathbf{x}_0) d\mathbf{x}, \quad (1.6.7) \end{aligned}$$



где  $\lambda^{-1}(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{U}} [y - \eta(\mathbf{x}, \theta)]^2 p(y/\mathbf{x}) dy$  — дисперсия случайной величины  $y$  в точке  $\mathbf{x}$  при отсутствии ошибок контролируемых переменных.

Из (1.6.5), (1.6.6) и (1.6.7) следует, что

$$\sigma^2(y, \mathbf{x}_0) = \sigma^2 + (\nabla_1^2 \mathbf{d}_2), \quad (1.6.8)$$

где

$$\nabla_{1\alpha\beta}^2 = \left( \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \theta)}{\partial x_\alpha} \cdot \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \theta)}{\partial x_\beta} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \lambda^{-1}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}$$

В (1.6.8) так же, как и в (1.6.6), мы пренебрегли членами, зависящими от элементов  $d_l$ ,  $l > 2$ , и производных по  $\mathbf{x}$  от  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$ , имеющих порядок выше второго.

Полученные результаты можно усилить, если сделать дополнительные предположения о виде функций  $p(y/\mathbf{x})$  и  $p(\mathbf{x}/\mathbf{x}_0)$ . Например, при симметричной относительно  $x_0$  функции  $p(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$  можно получить, что

$$E(y, \mathbf{x}_0) = \eta(\mathbf{x}_0, \theta) + \frac{1}{2} (\nabla_2^2 \mathbf{d}_2) + \frac{1}{24} [(\nabla_4^2 \mathbf{d}_4)] + \dots \quad (1.6.9)$$

Аналогичный результат можно получить и для  $\sigma^2(y, \mathbf{x}_0)$ .

Необходимость использования приближений (1.6.8) (но не (1.6.6) или (1.6.9)) отпадает, если в каждой из точек  $\mathbf{x}_{0i}$  число измерений достаточно для нахождения удовлетворительных оценок  $\sigma^2(y, \mathbf{x}_{0i})$ . Удовлетворительными можно считать те оценки  $\hat{\sigma}^2(y, \mathbf{x}_{0i})$ , для дисперсии которых выполняется неравенство

$$d[\hat{\sigma}^2(y, \mathbf{x}_{0i})] \ll (\nabla_{1i}^2 \mathbf{d}_{2i}). \quad (1.6.10)$$

Значения  $\nabla_{1i}^2$  зависят от истинных значений  $\theta_{\text{ист}}$  и априори неизвестны. Поэтому в расчетах эти величины следует заменить в (1.6.10) на грубые оценки  $\hat{\theta}_0$ , которые можно получить, проделав соответствующий регрессионный анализ без учета ошибок контролируемых переменных.

II. Рассмотрим итерационный метод нахождения оценок для параметров  $\theta$ . Одним из преимуществ этого метода является возможность построения программ для ЭВМ, основной частью которых служат программы обычного регрессионного анализа (без учета ошибок контролируемых переменных).

Итерационный процесс строится следующим образом.

1. Составляется сумма

$$M_0 = \sum_{i=1}^n \left[ y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta) - \frac{1}{2} (\nabla_{2i} \mathbf{d}_{2i}) \right]^2 \omega_i^0, \quad (1.6.11)$$

где

$$\omega_i^0 = \sigma_i^{-2} = \sigma^{-2}(\mathbf{x}_{0i}).$$

Отыскиваются значения  $\theta_0$ , при которых достигается минимум  $M_0$  (при постоянных  $\omega_i^0$ ).

2. Подсчитываются величины  $(\nabla_{1i}^2(\theta_0) \mathbf{d}_{2i})$ .

3. Составляется сумма

$$M_1 = \sum_{i=1}^n \left[ y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta) - \frac{1}{2} (\nabla_{2i} \mathbf{d}_{2i}) \right]^2 \omega_i^1, \quad (1.6.12)$$

где  $\omega_i^1 = [\sigma_i^2 + (\nabla_{1i}^2(\theta_0) \mathbf{d}_{2i})]^{-1}$ . Отыскиваются значения  $\theta_1$ , при которых достигается минимум  $M_1$  (при постоянных  $\omega_i^1$ ), операции 2 и 3 повторяются соответственно при  $\theta_1, \theta_2$  и т. д. Вычисления прекращаются, если, например,

$$\max_{\alpha} \left| \frac{\theta_{\alpha s} - \theta_{\alpha(s-1)}}{\theta_{\alpha(s-1)}} \right| \leq \gamma \quad (\alpha = 1, 2, \dots, m), \quad (1.6.13)$$

где  $\gamma$  — наперед заданное малое положительное число. Значение  $\theta_s$ , для которого выполняется (1.6.13), принимается за оценку  $\hat{\theta}$  неизвестных параметров  $\theta$ .

При отыскании минимума квадратичных форм  $M_s$  можно использовать программы обычного метода наименьших квадратов.

Иногда оказывается удобным на каждом  $s+1$ -м этапе считать постоянными не только добавки в  $\omega_i^s$ , но и величины  $\frac{1}{2} (\nabla_{2i} \mathbf{d}_{2i})$ , которые принимаются соответственно равными  $\frac{1}{2} (\nabla_{2i}(\theta_s) \mathbf{d}_{2i})$ . Итерационный процесс при этом сходится несколько медленней и область его сходимости становится уже.

III. Исследуем статистические свойства оценок  $\hat{\theta}$ .

Рассмотрим случай линейной параметризации

$$\eta(\mathbf{x}, \theta) = \theta^T \mathbf{f}(\mathbf{x}).$$

При этом  $(s+1)$ -е приближение можно представить в виде

$$\theta_{s+1} = [\mathbf{F} \boldsymbol{\omega}^s \mathbf{F}^T]^{-1} \mathbf{F} \boldsymbol{\omega}^s \mathbf{y}. \quad (1.6.14)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \|\varphi(\mathbf{x}_1), \varphi(\mathbf{x}_2), \dots, \varphi(\mathbf{x}_n)\|; \\ \varphi_\alpha(\mathbf{x}_i) &= \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} \left[ \eta(\mathbf{x}, \theta) + \frac{1}{2} (\nabla_{2i}^2 \mathbf{d}_{2i}) \right] \quad (\alpha = 1, 2, \dots, m); \\ \omega_{ii}^s &= \omega_i^s = [\sigma_i^2 + (\nabla_{1i}^2(\theta_s) \mathbf{d}_{2i})]^{-1}, \quad \omega_{ij} = 0 \quad (i \neq j); \\ \mathbf{y}^T &= \|y_1, y_2, \dots, y_n\|. \end{aligned}$$

Если итерационный процесс 1—3 сходится, то точкой его сходимости  $\hat{\theta}$  является решение уравнения [22]:

$$\theta = [\mathbf{F} \boldsymbol{\omega}(\theta) \mathbf{F}^T]^{-1} \mathbf{F} \boldsymbol{\omega}(\theta) \mathbf{y}. \quad (1.6.15)$$

Нетрудно проверить, что (1.6.15) эквивалентно уравнению

$$\sum_{i=1}^n [y_i - \theta^T \varphi(\mathbf{x}_i)] \varphi(\mathbf{x}_i) \omega_i(\theta) = 0.$$

Отметим, что оценки  $\hat{\theta}$  не минимизируют квадратичную форму  $S(\theta) = \sum_{i=1}^n \omega_i(\theta) [y_i - \theta^T \varphi(\mathbf{x}_i)]^2$ , т. е. не являются оценками метода наименьших квадратов с учетом поправок (1.6.6) и (1.6.8). Действительно,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} \sum_{i=1}^n \omega_i(\theta) [y_i - \theta^T \varphi(\mathbf{x}_i)]^2 &= -2 \sum_{i=1}^n [y_i - \theta^T \varphi(\mathbf{x}_i)] \varphi_\alpha(\mathbf{x}_i) \omega_i - \\ &- \sum_{i=1}^n [y_i - \theta^T \varphi(\mathbf{x}_i)]^2 \frac{\partial \omega_i}{\partial \theta_\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, m). \end{aligned} \quad (1.6.16)$$

Но (1.6.15) обращает в нуль лишь первые слагаемые в (1.6.16).

Более того, можно проверить, что оценки, соответствующие  $\min S(\theta)$ , оказываются в общем случае несостоятельными.

**Теорема 1.6.1.** Если  $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \mathbf{F} \boldsymbol{\omega}(\theta_{\text{ист}}) \mathbf{F}^T = \mathbf{M}(\theta_{\text{ист}})$  и  $|M(\theta_{\text{ист}})| \neq 0$ , то оценки  $\hat{\theta}$ , являющиеся решением уравнения (1.6.15), — состоятельные (в рамках приближения (1.6.6), (1.6.8)) и

$$\mathbf{D}(\hat{\theta}) \cong [\mathbf{F} \boldsymbol{\omega}(\hat{\theta}) \mathbf{F}^T]^{-1}. \quad (1.6.17)$$

**Доказательство.** 1. С целью уменьшения алгебраических выкладок проведем доказательство теоремы

для  $m=1$ . Обобщение на случай большего числа параметров будет очевидным.

Представим величину  $q_i(\theta) = [\theta\varphi(\mathbf{x}_i) - y_i] \varphi(\mathbf{x}_i) \omega_i(\theta)$  в окрестности истинного значения  $\theta_{\text{ист}}$  в виде:

$$q_i(\theta) = q_i(\theta_{\text{ист}}) + \dot{q}_i(\theta_{\text{ист}})(\theta - \theta_{\text{ист}}) + \frac{1}{2} \ddot{q}_i(\theta_0)(\theta - \theta_{\text{ист}})^2,$$

где  $\theta_0$  находится между  $\theta$  и  $\theta_{\text{ист}}$ ,

$$\dot{q}_i(\theta) = \frac{\partial q_i(\theta)}{\partial \theta} = \varphi^2(\mathbf{x}_i) \omega(\theta) + [\theta\varphi(\mathbf{x}_i) - y_i] \varphi(\mathbf{x}_i) \frac{\partial \omega_i(\theta)}{\partial \theta};$$

$$\ddot{q}_i(\theta) = \frac{\partial^2 q_i(\theta)}{\partial \theta^2} = 2\varphi^2(\mathbf{x}_i) \frac{\partial \omega(\theta)}{\partial \theta} + [\theta\varphi(\mathbf{x}_i) - y_i] \varphi(\mathbf{x}_i) \frac{\partial^2 \omega_i(\theta)}{\partial \theta^2}.$$

Умножая обе части данных выражений на  $n^{-1}$  и суммируя по  $i$ , при  $\theta = \hat{\theta}$  получим

$$\begin{aligned} n^{-1} \sum_{i=1}^n q_i(\hat{\theta}) &= n^{-1} \sum_{i=1}^n q_i(\theta_{\text{ист}}) + n^{-1} \sum_{i=1}^n \dot{q}_i(\theta_{\text{ист}})(\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}) + \\ &+ (2n)^{-1} \sum_{i=1}^n \ddot{q}_i(\theta_{\text{ист}})(\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}})^2 = 0. \end{aligned} \quad (1.6.18)$$

Из усиленного закона больших чисел [13] следует, что найдется такое  $N$ , для которого при  $n \geq N$

$$P_1 \left( \left| n^{-1} \sum_{i=1}^n q_i(\theta_{\text{ист}}) \right| \geq \delta \right) < \frac{1}{3} \gamma;$$

$$P_2 \left( \left| n^{-1} \sum_{i=1}^n \dot{q}_i(\theta_{\text{ист}}) - n^{-1} \sum_{i=1}^n \varphi^2(\mathbf{x}_i, \theta_{\text{ист}}) \omega_i(\theta_{\text{ист}}) \right| \geq \delta \right) < \frac{1}{3} \gamma;$$

$$P_3 \left( \left| n^{-1} \sum_{i=1}^n \ddot{q}_i(\theta_0) \right| \geq K \right) < \frac{1}{3} \gamma, \quad K < \infty.$$

Здесь  $P(|\xi| > \delta)$  означает вероятность того, что абсолютное значение случайной величины  $\xi$  не превышает  $\delta$ . Опираясь на данные неравенства и (1.6.18) и дословно повторяя стандартные рассуждения первой части теоремы 33.3 из [14], легко показать, что неравенство

$$P(|\hat{\theta} - \theta_{\text{ист}}| \geq \delta) < \gamma$$

выполняется для всех  $n \geq N$ . Таким образом, оценка — состоятельная.

2. Так как оценки  $\hat{\theta}$  — состоятельные, то при достаточно больших  $n$  уравнение (1.6.15) можно представить в виде

$$\hat{\theta} \cong [F\boldsymbol{\omega}(\theta_{\text{ист}})F^T]^{-1}F\boldsymbol{\omega}(\theta_{\text{ист}})\mathbf{y}.$$

Подсчитывая вторые центральные моменты от обеих частей данного равенства, получим

$$D(\hat{\theta}) \cong [F\boldsymbol{\omega}(\theta_{\text{ист}})F^T]^{-1}.$$

Опираясь по-прежнему на состоятельность оценок  $\hat{\theta}$ , последнее равенство, не понижая порядка его точности, можно заменить на (1.6.17).

IV. Исследуем вопрос о сходимости итерационного способа решения уравнения (1.6.15).

Для простоты выкладок по-прежнему будем рассматривать случай одного параметра. Если начальное приближение  $\theta_0$  лежит в достаточно малой окрестности  $\hat{\theta}$ , то, как известно [22], для сходимости итерационного метода решения уравнения (1.6.15) достаточно выполнения неравенства

$$\left| \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=\hat{\theta}} < 1, \quad (1.6.19)$$

где

$$L(\theta) = [F\boldsymbol{\omega}(\theta)F^T]^{-1}F\boldsymbol{\omega}(\theta)\mathbf{y}.$$

Непосредственным дифференцированием легко проверить

$$\frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta} = [F\boldsymbol{\omega}(\theta)F^T]^{-1}F \frac{\partial \boldsymbol{\omega}(\theta)}{\partial \theta} [\mathbf{y} - F^T\theta]. \quad (1.6.20)$$

Отсюда видно, что производная  $\frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta}$  зависит от результатов наблюдений  $\mathbf{y}$  и поэтому является случайной величиной.

Так как оценка  $\hat{\theta}$ , являющаяся точным решением уравнения (1.6.15), — состоятельная, то при достаточно больших  $n$  неравенство (1.6.19) можно заменить на неравенство

$$\frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_{\text{ист}}} < 1.$$

Из (1.6.6) и (1.6.20) следует, что

$$E \left[ \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_{\text{ист}}} \right] = 0.$$

Таким образом, в среднем по всем возможным выборкам  $y^T = \|y_1, y_2, \dots, y_n\|$  рассматриваемая производная (1.6.19) близка к нулю.

Существуют, однако, выборки (сильные выбросы), для которых итерационный процесс может не сходиться. Опираясь на неравенство Чебышева (см., например, [13], [14]) и (1.6.20), нетрудно выписать приближенную верхнюю границу для вероятности получения таких выборок:

$$P \left[ \left| \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta = \theta_{\text{ист}}} \geq 1 \right] \leq d(\theta_{\text{ист}}), \quad (1.6.21)$$

где

$$d(\theta) = [F\omega(\theta)F^T]^{-1} F \frac{\partial \omega(\theta)}{\partial \theta} \omega^{-1}(\theta) \frac{\partial \omega(\theta)}{\partial \theta} F^T [F\omega(\theta)F^T]^{-1}.$$

Верхняя граница, задаваемая (1.6.21), очень груба и, зная закон распределения результатов наблюдений, ее можно существенно понизить. Так, например, для нормально распределенных результатов наблюдений эта граница равна

$$P \left[ \left| \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta = \theta_{\text{ист}}} \geq 1 \right] = 1 - 2\Phi [d^{1/2}(\theta_{\text{ист}})],$$

где  $\Phi(z)$  — функция нормального распределения с параметрами  $(0, 1)$ .

Аналогичные результаты легко получить и для случая, когда имеется несколько неизвестных параметров.

V. В пунктах III—IV данного параграфа выкладки проводились при  $\eta(x, \theta) = \theta^T f(x)$ . Все результаты легко обобщить на случай  $\eta(x, \theta)$  произвольного вида. При этом во всех конечных формулах достаточно положить

$$f_a(x) = \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_a} \Big|_{\theta = \hat{\theta}},$$

а при построении итерационного процесса для каждого  $s$ -го шага

$$f_{as}(x) = \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_a} \Big|_{\theta = \theta_s}.$$

Оценим значения ошибок по  $x$ , при которых оказывается возможным применение обычного метода наименьших квадратов (см. §§ 1.2, 1.4).

Из (1.6.14) следует, что  $\theta_0 \simeq \theta_1$  (т. е. применение итерационного метода не нужно), если

$$\max_i \frac{(\nabla_{1i} d_{2i})}{\sigma_i^2} \ll 1 \quad \text{и} \quad \max_i \left| \frac{(\nabla_{2i} d_{2i})}{2\eta(x_i, \theta_0)} \right| \ll 1$$

или, более грубо,

$$\sum_{\alpha=1}^k \left( \frac{\partial \eta(x, \theta_0)}{\partial x_\alpha} \right)^2 \Big|_{x=x_i} \cdot d_{2\alpha\alpha} \sigma_i^{-2} \ll 1 \quad \text{и}$$

$$\sum_{\alpha=1}^k \frac{\partial^2 \eta(x, \theta_0)}{\partial x_\alpha^2} \Big|_{x=x_i} \cdot d_{2\alpha\alpha} \eta^{-1}(x_i, \theta_0) \ll 1$$

для всех точек, где производятся измерения. Иными словами, чем больше первые и вторые производные, тем меньшие ошибки по  $x$  допустимы при анализе экспериментальных данных обычными методами регрессионного анализа.

**Пример.** Рассмотрим моделированный пример. В качестве «истинной» кривой  $\eta(x, \theta)$  была выбрана кривая

$$\eta(x, \theta_{\text{ист}}) = -30x + 10x^3.$$

Измерения моделировались с помощью таблицы случайных чисел в предположении, что ошибки при измерении зависимой переменной  $y$  равны 10% от истинного значения  $\eta(x, \theta_{\text{ист}})$ , а ошибки при фиксации контролируемой переменной постоянны во всей области действия и равны 0,2. Результаты «измерений» представлены на рис. 2. Длины вертикальных и горизонтальных отрезков равны соответственно удвоенным ошибкам по зависимой и контролируемой переменным.

На этом же рисунке представлены результаты обработки экспериментальных данных методом наименьших квадратов без учета ошибок при фиксации контролируемой переменной и методом, изложенным в данном параграфе.

Отчетливо видно, что первая кривая неудовлетворительно описывает реальную зависимость, сглаживая наиболее характерные изгибы кривой. При этом коридор ошибок, рассчитанный по обычному методу наименьших

квадратов, явно заужен. Расчеты и многократное повторение моделированного эксперимента показали, что

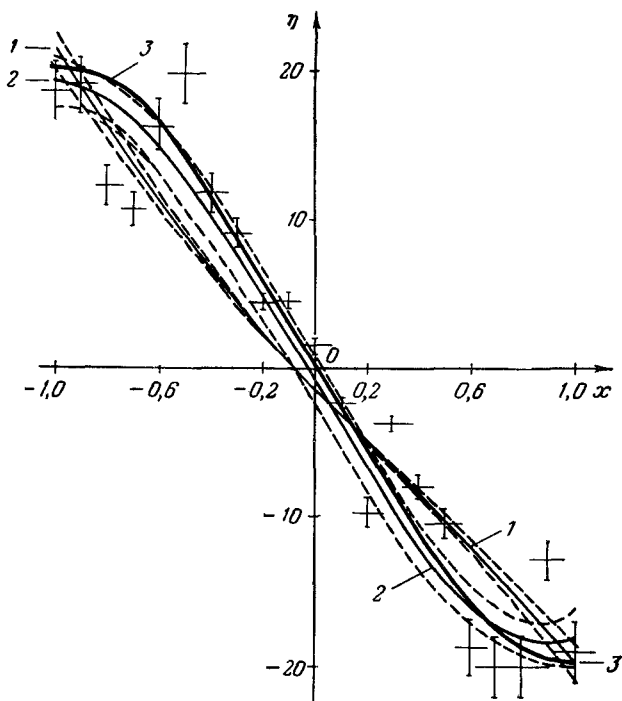


Рис. 2. Регрессионный анализ при наличии ошибок по контролируемым переменным.

Кривая 1 соответствует обработке данных по обычному методу наименьших квадратов; кривая 2 получена по методу, предложенному в § 1.6; кривая 3 — истинная зависимость. Пунктирные линии соответствуют расчетным коридорам ошибок.

реальный коридор ошибок в три-четыре раза превышает указанный расчетный коридор ошибок.

### § 1.7. Анализ экспериментальных данных в случае одновременного измерения нескольких величин

Очень часто при одних и тех же значениях контролируемых переменных  $x$  можно измерять несколько величин  $y_1, y_2, \dots, y_l$ . Простейшим примером могут служить химические эксперименты, в которых образуется



несколько веществ, причем концентрация каждого из них может быть измерена.

Величины  $y_1, y_2, \dots, y_l$  могут быть коррелированы. Будем предполагать их дисперсионную матрицу известной:

$$D(y/x) = \begin{vmatrix} \sigma_{11}^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1l} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22}^2 & \dots & \sigma_{2l} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{l1} & \sigma_{l2} & \dots & \sigma_{ll}^2 \end{vmatrix}.$$

Здесь

$$y^T = \|y_1, y_2, \dots, y_l\|.$$

Пусть также известно, что

$$E(y/x) = \begin{vmatrix} \eta_1(x, \theta) \\ \eta_2(x, \theta) \\ \dots \\ \eta_l(x, \theta) \end{vmatrix}.$$

Рассмотрим случай линейной параметризации, т. е.

$$\eta_k(x, \theta) = \theta^T f_k(x) \quad (k=1, 2, \dots, l).$$

Введем обозначения:

$$\omega_i = D^{-1}(y/x_i); \quad F(x_i) = \|f_1(x_i), f_2(x_i), \dots, f_l(x_i)\|.$$

Справедлива следующая теорема.

**Теорема 1.7.1.** *Наилучшими линейными оценками для  $\theta$  являются*

$$\hat{\theta} = M^{-1}Y,$$

где матрица  $M$  предполагается неособенной и равной

$$M = \sum_{i=1}^n F(x_i) \omega_i F^T(x_i)$$

и

$$Y = \sum_{i=1}^n F(x_i) \omega_i y_i.$$

Дисперсионная матрица оценок  $\hat{\theta}$  равна

$$D(\hat{\theta}) = M^{-1}. \quad (1.7.1)$$

Теорема доказывается аналогично теореме 1.3.2. Заменяя в доказательстве  $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$  на  $F(\mathbf{x}_i)$  и  $\sigma_i^2$  (или  $w_i$ ) на  $D(\mathbf{y}/\mathbf{x}_i)$  (или  $\boldsymbol{\omega}_i$ ) и повторяя его дословно, мы получим результат теоремы 1.7.1.

Нетрудно проверить, что все следствия из теоремы 1.3.2 имеют место и в данном случае. Для нас будут нужны в дальнейшем два следствия, являющиеся очевидным обобщением следствий 4 и 5 теоремы 1.3.2.

*Следствие 1.* Наилучшими линейными оценками функций  $\eta_k(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$  ( $k=1, 2, \dots, l$ ) являются функции

$$\hat{\eta}_k(\mathbf{x}) = \hat{\boldsymbol{\theta}}^T \mathbf{f}_k(\mathbf{x}).$$

Дисперсионная матрица оценок  $\hat{\eta}_k(\mathbf{x})$  равна

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}) = F^T(\mathbf{x}) M^{-1} F(\mathbf{x}). \quad (1.7.2)$$

*Следствие 2.* Если в точках  $\mathbf{x}_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) были получены результаты  $\mathbf{y}_{i1}, \mathbf{y}_{i2}, \dots, \mathbf{y}_{ir}$ , то наилучшими линейными оценками для  $\boldsymbol{\theta}$  будут

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = M^{-1} \mathbf{Y},$$

где

$$M = \sum_{i=1}^n F(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\omega}_i F^T(\mathbf{x}_i),$$

$$\mathbf{Y} = \sum_{i=1}^n F(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\omega}_i \mathbf{y}_i$$

и

$$\boldsymbol{\omega}_i = r_i D^{-1}(\mathbf{y}_{ir}), \quad \mathbf{y}_i = r_i^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_{ir}.$$

Здесь мы предполагали, что матрица  $D(\mathbf{y}_{ir}/\mathbf{x}_i)$  — одна и та же для всех  $r=1, 2, \dots, r_i$ .

Мы не будем выписывать остальные формулы, являющиеся обобщением результатов §§ 1.2—1.5, представив читателю самому проделать несложные выкладки, необходимые для их получения.

## § 1.8. Способы сравнения результатов экспериментов

В данном и следующих параграфах все рассуждения проводятся в предположении, что в заданной точке пространства контролируемых переменных может измеряться

лишь одна величина. Обобщение их на случай, когда возможно одновременное измерение нескольких величин  $y_1, y_2, \dots, y_l$ , очевидно и частично осуществляется в гл. 5.

Прежде всего, уточним понятие эксперимента.

*Определение.* Будем называть совокупность величин

$$\begin{array}{cccc} y_{11}^j, & y_{12}^j, & \dots, & y_{1r_1}^j; & y_{21}^j, & y_{22}^j, & \dots, & y_{2r_2}^j; & \dots; & y_{n1}^j, & y_{n2}^j, & \dots, & y_{nr_n}^j; \\ \omega_1^j; & & & & \omega_2^j; & & & & \dots; & \omega_n^j; & & & \\ x_1^j; & & & & x_2^j; & & & & \dots; & x_n^j; & & & \end{array}$$

экспериментом  $\mathcal{E}_j$ .

Напомним, что  $\omega_i^j = r_i (\sigma_i^j)^{-2}$ .

Будем говорить, что эксперимент  $\mathcal{E}_1$  отличен от эксперимента  $\mathcal{E}_2$  (или кратко:  $\mathcal{E}_1 \neq \mathcal{E}_2$ ), если хотя бы одна из величин при  $j=1$  отлична от соответствующей величины при  $j=2$ . Вообще говоря, для различных экспериментов  $\mathcal{E}_j$  значение оценок  $\hat{\theta}_j$  (или  $\hat{\eta}_j(\mathbf{x})$ ) будет отличаться как по величине, так и по «близости» их к истинным значениям. Прежде чем приступить к планированию, т. е. выбору наилучшего эксперимента, необходимо иметь критерии сравнения экспериментов. Естественно считать эксперимент  $\mathcal{E}_1$  предпочтительнее эксперимента  $\mathcal{E}_2$  ( $\mathcal{E}_1 \succ \mathcal{E}_2$ ), если значения оценок  $\hat{\theta}(\mathcal{E}_1)$  (или  $\hat{\eta}(\mathbf{x}, \mathcal{E}_1)$ ) «ближе» к истинным значениям  $\theta_{\text{ист}}$  (или  $\eta_{\text{ист}}(\mathbf{x})$ ), чем оценки  $\hat{\theta}(\mathcal{E}_2)$  (или  $\hat{\eta}(\mathbf{x}, \mathcal{E}_2)$ ).

Выбор наилучших линейных оценок  $\hat{\theta}$  среди прочих оценок  $\hat{\theta}$  основывался на сравнении дисперсионных матриц  $\mathbf{D}(\hat{\theta})$  и  $\mathbf{D}(\hat{\theta}')$  или некоторых комбинаций из их элементов. Поэтому оценки  $\hat{\theta}(\mathcal{E}_1)$  и  $\hat{\theta}(\mathcal{E}_2)$  удобно сравнивать, опираясь соответственно на дисперсионные матрицы  $\mathbf{D}(\mathcal{E}_1)$  и  $\mathbf{D}(\mathcal{E}_2)$  оценок параметров  $\theta$ .

Перечислим некоторые наиболее часто употребляемые способы сравнения экспериментов.

Эксперимент  $\mathcal{E}_1$  предпочтительнее эксперимента  $\mathcal{E}_2$ , если

- $\mathbf{D}(\mathcal{E}_1) < \mathbf{D}(\mathcal{E}_2)$ , т. е. разность соответствующих дисперсионных матриц есть положительно определенная матрица;
- $|\mathbf{D}(\mathcal{E}_1)| < |\mathbf{D}(\mathcal{E}_2)|$ ;
- $\text{Sp } \mathbf{D}(\mathcal{E}_1) < \text{Sp } \mathbf{D}(\mathcal{E}_2)$ ;
- $\max_{\alpha} D_{\alpha\alpha}(\mathcal{E}_1) < \max_{\alpha} D_{\alpha\alpha}(\mathcal{E}_2)$ ;
- $\mathbf{D}(\hat{\theta}, \mathcal{E}_1) < \mathbf{D}(\hat{\theta}, \mathcal{E}_2)$ , где  $\hat{\theta} = \mathbf{L}\theta$ .

Способ сравнения е) является некоторым обобщением способа а); е) переходит в а) при  $L=I_m$ . Аналогичным образом можно обобщить способы сравнения б) ÷ д).

Например,  $\mathcal{E}_1 \succ \mathcal{E}_2$ , если

$$\text{Sp } \mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{E}_1) < \text{Sp } \mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{E}_2). \quad (1.8.1)$$

Иногда из всей совокупности  $m$  неизвестных параметров для экспериментатора представляет особый интерес лишь часть параметров  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_l$  ( $l < m$ ). В этом случае эксперименты сравниваются теми же способами, что и при  $l=m$ , но вместо полной матрицы  $\mathbf{D}(\mathcal{E})$  необходимо использовать соответствующую подматрицу

$$\mathbf{D}_{ll}(\mathcal{E}) = \begin{vmatrix} D_{11} & D_{12} & \dots & D_{1l} \\ D_{21} & D_{22} & \dots & D_{2l} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ D_{l1} & D_{l2} & \dots & D_{ll} \end{vmatrix}.$$

К тому же случаю можно прийти, если в способе сравнения (е) положить

$$\mathbf{L} = \|\mathbf{I}_l \quad \mathbf{O}\|,$$

где  $\mathbf{O}$  — матрица размером  $l \times (m-l)$ , состоящая из нулей. Критерии предпочтительности, указанные выше, производят сравнение экспериментов в пространстве параметров.

Особенно наглядны перечисленные выше критерии при геометрической интерпретации дисперсионной матрицы оценок искомых параметров. Известно (см., например, [14]), что при нормальном законе распределения результатов наблюдений поверхностями постоянных значений функции плотности распределения  $p(\hat{\theta}/\theta_{\text{ист}})$  являются эллипсоиды, характеристики которых полностью определяются элементами матрицы  $\mathbf{D}(\mathcal{E})$ . На рис. 3

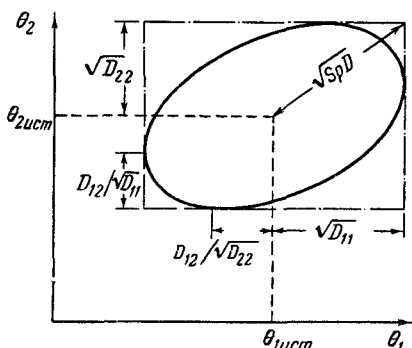


Рис. 3. Геометрическая интерпретация критериев оптимальности.

представлен эллипс для двумерного случая ( $m=2$ ), на котором функция  $p(\hat{\theta}/\theta_{\text{ист}})$  постоянна и в который с вероятностью  $\sim 0,39$  попадает  $\hat{\theta}$ . Из рисунка очевидна геометрическая интерпретация каждого из указанных критериев сравнения экспериментов.

Рассмотрим способы сравнения экспериментов в пространстве, результат измерения — контролируемые переменные.

Эксперимент  $\mathcal{E}_1 \succ \mathcal{E}_2$ , если

$$f) \max d(\mathbf{x}, \mathcal{E}_1) < \max d(\mathbf{x}, \mathcal{E}_2), \quad \mathbf{x} \in Z;$$

$$g) \int_Z d(\mathbf{x}, \mathcal{E}_1) d\mathbf{x} < \int_Z d(\mathbf{x}, \mathcal{E}_2) d\mathbf{x}.$$

Обычно различают следующие случаи:

1) область  $Z$  совпадает с областью действия  $X$ , где возможны измерения;

2) область  $Z$  является частью области действия  $X$ ;

3) область  $Z$  не имеет общих точек с областью действия  $X$  (задача экстраполяции).

Область  $Z$ , в частности, может быть точкой. В этом случае

$$d(\mathbf{x}, \mathcal{E}_1) < d(\mathbf{x}, \mathcal{E}_2),$$

где  $\mathbf{x}$  может принадлежать области действия  $X$  или находиться вне ее.

**Пример.** Покажем, что в общем случае эксперимент  $\mathcal{E}_1$  может быть предпочтительнее эксперимента  $\mathcal{E}_2$  в смысле одного или нескольких критериев сравнения, в то время как для другой группы критериев предпочтительнее эксперимент  $\mathcal{E}_2$ .

Пусть

$$E(y/x) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2$$

и пусть имеется два эксперимента с одинаковым числом измерений ( $n=12$ ):

$$\mathcal{E}_1 = \left\{ \begin{array}{ccc} y_1^1; & y_2^1; & y_3^1 \\ \omega_1^1=4; & \omega_2^1=4; & \omega_3^1=4 \\ x_1^1=-1; & x_2^1=0; & x_3^1=1 \end{array} \right\},$$

$$\mathcal{E}_2 = \left\{ \begin{array}{ccc} y_1^2; & y_2^2; & y_3^2 \\ \omega_1^2=3; & \omega_2^2=6; & \omega_3^2=3 \\ x_1^2=-1; & x_2^2=0; & x_3^2=1 \end{array} \right\}.$$

Здесь  $y_i^j$  — средние значения результатов наблюдений в точке  $x_i$  в опыте  $\mathcal{E}_j$ , наблюдения равноточны и  $\sigma^2 = 1$ .

Используя (1.3.9), нетрудно получить, что для первого эксперимента

$$D(\mathcal{E}_1) = \frac{1}{12} \begin{vmatrix} 3 & 0 & -3 \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 \\ -3 & 0 & \frac{9}{2} \end{vmatrix}$$

и для второго

$$D(\mathcal{E}_2) = \frac{1}{12} \begin{vmatrix} 2 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{vmatrix}.$$

Отсюда после простейших вычислений получим:

$$|D(\mathcal{E}_1)| = 6,75 \cdot 12^{-3}; \quad |D(\mathcal{E}_2)| = 8 \cdot 12^{-3},$$

т. е.  $\mathcal{E}_1 \succ \mathcal{E}_2$  в смысле критерия б).

С другой стороны,  $\text{Sp } D(\mathcal{E}_1) = 3/4$ , а  $\text{Sp } D(\mathcal{E}_2) = 2/3$ , и эксперимент  $\mathcal{E}_2$ , таким образом, предпочтительнее эксперимента  $\mathcal{E}_1$  в смысле критерия с). Можно также проверить, что  $\mathcal{E}_1 \succ \mathcal{E}_2$  в смысле критерия f), но  $\mathcal{E}_2 \succ \mathcal{E}_1$  в смысле критерия g).

Обратим внимание на то, что в рассмотренном примере сравниваемые величины не зависят от результатов измерений.

## § 1.9. Функция потерь для регрессионных экспериментов

Выше (см. предыдущий параграф) эксперименты сравнивались только по конечным результатам. Каким способом, за какое время, при каких денежных или материальных затратах они были получены — это во внимание не принималось. В экспериментальной практике далеко не безразлично, при каких затратах был достигнут тот или иной результат.

Под затратами  $\tau$  здесь и в дальнейшем подразумевается затраченное на эксперимент время, денежные или материальные средства, необходимые для проведения эксперимента, и ряд других факторов, которые могут характеризовать общую стоимость эксперимента, выраженную, например, в денежных единицах.

Иногда эксперимент  $\mathcal{E}(\tau_1)$  с несколько худшими (в смысле какого-либо критерия из указанных выше) показателями, чем эксперимент  $\mathcal{E}(\tau_2)$ , может оказаться экспериментатору значительно более выгодным, если  $\tau_1 \ll \tau_2$  (затраты на первый эксперимент много меньше затрат на второй эксперимент). Поэтому выбор того или иного эксперимента должен основываться на сравнении некоторых величин  $\mathcal{R}(\mathcal{E})$ , которые зависят как от затрат  $\tau$ , так и от значений величин, характеризующих точность эксперимента  $\mathcal{E}$ . В общем случае функцию  $\mathcal{R}(\mathcal{E})$  можно представить в виде

$$\mathcal{R}(\mathcal{E}) = \tau + \Psi[D(\mathcal{E})],$$

где  $\tau$  — затраты на эксперимент  $\mathcal{E}$ ,  $\Psi$  — некоторый функционал, зависящий от дисперсионной матрицы оценок параметров. Функция  $\mathcal{R}(\mathcal{E})$  называется функцией потерь эксперимента  $\mathcal{E}$ . Наилучшим экспериментом будет являться эксперимент  $\mathcal{E}^*$ , минимизирующий функцию потерь. Функционал  $\Psi$  выбран зависящим только от элементов матрицы  $D(\mathcal{E})$  в силу того, что при описании точности результатов эксперимента мы опираемся лишь на матрицу  $D(\mathcal{E})$ . Значение данного функционала характеризует возможные потери, обусловленные недостаточно точным определением оценок искомых параметров или поверхности отклика. Вид функционала  $\Psi$  определяется конечной целью эксперимента. Обычно его считают равным

$$\Psi[D(\mathcal{E})] = k\mathcal{L}[D(\mathcal{E})],$$

где  $k$  — постоянный нормирующий множитель, а функционал  $\mathcal{L}[D(\mathcal{E})]$  определяется тем способом сравнения экспериментов, который подходит к данной экспериментальной ситуации. Если эксперименты сравниваются по одному из способов а) ÷ ф), то функционал  $\mathcal{L}[D(\mathcal{E})]$  может иметь вид:

$$|D(\mathcal{E})|; \quad (1.9.1)$$

$$\text{Sp } D(\mathcal{E}); \quad (1.9.2)$$

$$\max D_{\alpha\alpha}(\mathcal{E}), \quad \alpha = 1, 2, \dots, m; \quad (1.9.3)$$

$$L^T D(\mathcal{E}) L, \quad L^T = \|l_1, l_2, \dots, l_m\|; \quad (1.9.4)$$

$$\max_x d(x, \mathcal{E}), \quad x \in Z; \quad (1.9.5)$$

$$\int_Z d(x, \mathcal{E}) dx. \quad (1.9.6)$$

Область  $Z$  определяется так же, как и в предыдущем параграфе.

Если экспериментатора интересует  $l$  параметров из  $m$ , то в указанных функционалах матрица  $D(\mathcal{E})$  должна быть заменена на соответствующую подматрицу  $D_{ll}(\mathcal{E})$ .

Рассматриваемые функционалы удобны с точки зрения построения дальнейшего математического аппарата и в то же время оказываются подходящими для большинства практических задач. В тексте будут встречаться и некоторые другие функционалы, которые близки по своей природе к приведенным выше.

В дальнейшем затраты  $\tau$  будут предполагаться пропорциональными стоимости каждого отдельного измерения:

$$\tau = \sum_{i=1}^n c_i r_i,$$

где  $c_i$  — стоимость измерения, проведенного в точке  $x_i$ .

Введение дополнительных факторов, от которых может зависеть функция  $\tau$  и существенное усложнение ее вида, делает аппарат планирования экспериментов значительно более громоздким и лишь в крайне редких случаях дает заметно лучшее описание действительности. Типичная зависимость функции потерь  $\mathcal{R}$  от числа измерений представлена на рис. 4.

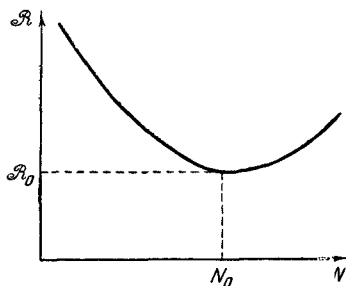


Рис. 4. Зависимость функции потерь от числа наблюдений.

## § 1.10. Понятие плана эксперимента.

### Непрерывные нормированные планы

I. В общем случае (функция  $\eta(x, \theta)$  — произвольная) функция потерь зависит от всех характеристик эксперимента  $\mathcal{E}$ . Однако при линейной параметризации ( $\eta(x, \theta) = \theta^T f(x)$ ) функция потерь зависит только от величин  $r_i, x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) и не зависит ни от результатов измерений  $y$ , ни от истинных значений искомым параметров  $\theta$ .



Действительно, согласно теореме 1.3.2 и ее следствию 6 дисперсионная матрица

$$\mathbf{D}(\mathcal{E}) = \mathbf{M}^{-1},$$

где

$$\mathbf{M} = \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i).$$

Так как функционалы  $\Psi[\mathbf{D}(\mathcal{E})]$  (см. § 1.9) зависят только от элементов матрицы  $\mathbf{D}(\mathcal{E})$  и функций  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ , то функция потерь зависит только от значений  $r_i$ ,  $\mathbf{x}_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ).

*Определение 1.* Совокупность величин

$$\begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1, & \mathbf{x}_2, & \dots, & \mathbf{x}_n; \\ r_1, & r_2, & \dots, & r_n; \end{array}$$

$$\sum_{i=1}^n r_i = N$$

называется планом (эксперимента)  $\mathcal{E}(N)$ . Совокупность точек  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  называется спектром плана  $\mathcal{E}(N)$ . Нам будет полезно понятие нормированного плана.

*Определение 2.* Нормированным планом  $\varepsilon(N)$  называется совокупность величин

$$\begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1, & \mathbf{x}_2, & \dots, & \mathbf{x}_n; \\ p_1, & p_2, & \dots, & p_n, \end{array}$$

где

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad \text{и} \quad p_i = \frac{r_i}{N}.$$

Элементы информационной матрицы  $\mathbf{M}(\mathcal{E}(N))$  можно выразить непосредственно через величины  $p_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) и  $N$ :

$$\mathbf{M}(\mathcal{E}(N)) = N \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)$$

или

$$\mathbf{M}(\mathcal{E}(N)) = N \mathbf{M}(\varepsilon(N)), \quad (1.10.1)$$

где

$$\mathbf{M}(\varepsilon(N)) = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i). \quad (1.10.2)$$

Из (1.10.1) следует, что

$$\mathbf{D}(\mathcal{E}(N)) = N^{-1}\mathbf{D}(\varepsilon(N)), \quad \mathbf{D}(\varepsilon(N)) = \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon(N)).$$

Для заданного нормированного плана  $\varepsilon(N)$  функция потерь имеет вид

$$\mathcal{R}[N, \varepsilon(N)] = N \cdot \sum_{i=1}^n c_i \cdot p_i + kN^{-m} |\mathbf{D}(\varepsilon(N))|$$

для случая (1.9.1), в остальных случаях —

$$\mathcal{R}[N, \varepsilon(N)] = N \cdot \sum_{i=1}^n c_i p_i + kN^{-1} \mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon(N))],$$

где функционал  $\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon(N))]$  определяется одной из формул (1.9.2) ÷ (1.9.6) с соответствующей заменой в них  $\mathbf{D}(\mathcal{E})$  на  $\mathbf{D}(\varepsilon(N))$ .

Обобщение на случай, когда особый интерес представляет лишь часть параметров ( $l < m$ ), очевидно.

Построив функцию потерь, мы свели планирование эксперимента к некоторой экстремальной задаче, а именно к поиску минимума функции потерь по  $N$  и  $\varepsilon(N)$ :

$$\min_{N, \varepsilon(N)} \mathcal{R}[N, \varepsilon(N)]. \quad (1.10.3)$$

Решение данной задачи принципиально возможно, но объем вычислений чрезвычайно быстро растет с увеличением числа неизвестных параметров и размерности пространства контролируемых переменных.

При некоторых дополнительных предположениях решение задачи (1.10.3) существенно упрощается и очень часто, как мы увидим ниже, сводится к использованию соответствующих таблиц.

II. Пусть  $N$  задано, т. е. экспериментатор не извлекает выгоды от уменьшения числа измерений и в то же время не может превысить указанный уровень затрат.

Рассмотрим случай, когда стоимость измерений не зависит от  $x_i$  ( $c_i = \text{const}$ ). Функция потерь при этом имеет вид

$$\mathcal{R}[N, \varepsilon(N)] = Nc + kN^{-1} \mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon(N))],$$

и планирование эксперимента эквивалентно поиску

$$\min_{\varepsilon(N)} \mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon(N))]. \quad (1.10.4)$$

**Пример.** Рассмотрим линейную регрессию на отрезке

$$E(y/x) = \theta_1 + \theta_2 x,$$

причем измерения возможны при  $-1 \leq x \leq 1$  и дисперсия результатов наблюдений постоянна в области действия и равна единице.

Пусть число измерений задано и равно  $N=3$ . Очевидно, что измерения могут быть распределены не более чем в трех точках ( $p_i = 1/3$ ;  $i = 1, 2, 3$ ).

Согласно (1.3.7)

$$\mathbf{M}(\varepsilon(3)) = \frac{1}{3} \begin{vmatrix} 3 & x_1 + x_2 + x_3 \\ x_1 + x_2 + x_3 & x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \end{vmatrix}$$

и, следовательно,

$$|\mathbf{M}(\varepsilon(3))| = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) - \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)^2.$$

Нетрудно проверить, что максимум  $|\mathbf{M}(\varepsilon(3))|$  (минимум  $\mathbf{D}(\varepsilon(3))$ ) достигается при  $x_1 = x_2 = -1$  и  $x_3 = 1$  или  $x_1 = x_2 = 1$  и  $x_3 = -1$ . При этом

$$|\mathbf{M}(\varepsilon(3))| = 8.$$

Легко убедиться, что при указанном спектре плана  $\varepsilon(3)$  минимизируется также и  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon(3))$ .

Рассмотренный пример является одним из простейших (два параметра и один фактор). В более сложных случаях прямой поиск минимума функционала  $\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon(3))]$  оказывается чрезвычайно трудоемким, так как размерность пространства, в котором необходимо производить этот поиск, растет очень быстро с ростом количества неизвестных параметров (см. гл. 2).

**III.** Во многих экспериментальных исследованиях заранее задается «точность» определения оценок искомых параметров. С подобной ситуацией приходится сталкиваться, например, при определении фундаментальных констант в физике и химии, при составлении различных технических таблиц и т. д.

Задание «точности» с математической точки зрения соответствует заданию величины  $\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon(N))] = \mathcal{L}_0$ . Планирование эксперимента в этом случае заключается в поиске минимума функции потерь по плану  $\varepsilon(N)$  и числу измерений  $N$  при заданном  $\mathcal{L}_0$ .

Если стоимость измерений одна и та же для всех точек  $x_i$ , то данная задача сводится к последователь-

ному поиску минимумов (1.10.4), который продолжается до тех пор, пока не будет найден план  $\mathcal{E}(N+1)$ , для которого

$$\min_{\mathcal{E}(N)} \mathcal{L}(\mathbf{D}(\mathcal{E}(N))) > \mathcal{L}_0 \geq \min_{\mathcal{E}(N+1)} \mathcal{L}[\mathbf{D}(\mathcal{E}(N+1))].$$

Эксперимент проводится по плану  $\mathcal{E}(N+1)$ .

IV. Наиболее сильные результаты удается получить, когда  $N$  настолько велико, что функцию потерь можно рассматривать как непрерывную по  $N$ .

Введем понятие непрерывного нормированного плана.

*Определение 3.* Непрерывным нормированным планом  $\varepsilon$  называется совокупность величин

$$\begin{aligned} & \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; \\ & p_1, p_2, \dots, p_n; \\ & \sum_{i=1}^n p_i = 1, \end{aligned}$$

где величины  $p_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) могут принимать любое значение, заключенное между 0 и 1.

В наиболее общем случае множество точек  $\mathbf{x}$  может совпадать с множеством всех точек, принадлежащих некоторой замкнутой области  $X$ . При этом непрерывный нормированный план будет характеризоваться некоторой мерой  $\xi(\mathbf{x})$ , заданной в области действия  $X$  и удовлетворяющей условиям

$$\int_X d\xi(\mathbf{x}) = 1, \quad \xi(\mathbf{x}) \geq 0, \quad \mathbf{x} \in X.$$

Обобщая (1.10.2) на данный случай, можно записать, что

$$\mathbf{M}(\varepsilon) = \int_X \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}). \quad (1.10.5)$$

В случае непрерывной меры (1.10.5) принимает вид

$$\mathbf{M}(\varepsilon) = \int_X \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \int_X p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1.$$

Для чисто дискретного случая (мера сосредоточена в конечном числе точек) функцию  $p(\mathbf{x})$  иногда удобно считать равной

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n p_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i),$$

где  $\delta(x - x_i)$  — функция Дирака. Определение  $\delta$ -функции Дирака можно найти, например, в [7]. Функцию  $p(x)$  будем называть функцией распределения затрат.

Задание меры  $\xi(x)$  или функции  $p(x)$  полностью описывает план  $\varepsilon$ . Очевидно, что при  $N \gg n$

$$\min_{N, \varepsilon(N)} \mathcal{R}(N, \varepsilon(N)) \simeq \min_{N, \varepsilon} \mathcal{R}(N, \varepsilon). \quad (1.10.6)$$

Вопрос о точности приближенного равенства будет обсуждаться в гл. 3.

Если стоимость всех измерений одна и та же, то нетрудно найти минимум правой части (1.10.6).

Действительно, при заданном плане  $\varepsilon$  и  $\mathcal{L}(\varepsilon) = |\mathbf{D}(\varepsilon)|$

$$\frac{\partial \mathcal{R}(N, \varepsilon)}{\partial N} = c - mkN^{-(m+1)} |\mathbf{D}(\varepsilon)| = 0.$$

Оптимальное число измерений  $N$  будет соответствовать корню (точнее, одному из ближайших к нему целых чисел) этого уравнения:

$$N = \left[ \frac{mk |\mathbf{D}(\varepsilon)|}{c} \right]^{\frac{1}{m+1}}. \quad (1.10.7)$$

При  $\mathcal{L}(\varepsilon)$ , равной одной из величин (1.9.2)  $\div$  (1.9.6):

$$N = \left[ \frac{k\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon)]}{c} \right]^{1/2}. \quad (1.10.8)$$

Формулы (1.10.7) и (1.10.8) справедливы, когда соответственно

$$mk |\mathbf{D}(\varepsilon)| \gg c, \quad k\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon)] \gg c,$$

т. е. стоимость каждого измерения должна быть мала.

Функция потерь при любом  $N$  является строго возрастающей функцией от  $|\mathbf{D}(\varepsilon)|$  или  $\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon)]$ . Следовательно, ее минимальное значение будет достигаться при таком непрерывном нормированном плане, который минимизирует  $|\mathbf{D}(\varepsilon)|$  или, соответственно,  $\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon)]$ . Значение  $\min_{\varepsilon} |\mathbf{D}(\varepsilon)|$  или  $\min_{\varepsilon} \mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon)]$  не зависит от  $N$ . Этот простой, но весьма важный в дальнейшем факт следует непосредственно из определения непрерывного нормированного плана.

Таким образом, планирование эксперимента в рассматриваемом случае сводится к отысканию плана  $\varepsilon^*$ ,

минимизирующего  $|\mathbf{D}(\varepsilon)|$  или одну из величин  $\mathcal{L}[\mathbf{D}(\varepsilon)]$ , и последующему вычислению оптимального числа измерений  $N^*$ .

За большинством планов, минимизирующих ту или иную нормированную величину (1.9.1) — (1.9.6), в математической литературе укрепились собственные названия.

Например, планы, минимизирующие величину определителя  $|\mathbf{D}(\varepsilon)|$ , называются  $D$ -оптимальными; планы, минимизирующие  $\max_x d(\mathbf{x}, \varepsilon) = \max_x \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ , — минимаксными; минимизирующие среднюю нормированную дисперсию  $m^{-1} \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)$  —  $A$ -оптимальными; минимизирующие  $\max_a D_{aa}(\varepsilon)$  — минимаксными в пространстве параметров.

## ГЛАВА 2

### НЕПРЕРЫВНЫЕ ОПТИМАЛЬНЫЕ ПЛАНЫ (СТАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ)

#### § 2.1. Основные свойства информационной матрицы

I. В данной и двух последующих главах планирование экспериментов будет рассматриваться в предположении, что

$$E(y/\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \theta), \quad (2.1.1)$$

где функция  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  задана.

В главах 2 и 3 будет предполагаться, что функция эффективности эксперимента известна с точностью до постоянного множителя  $\sigma^{-2}$  (см. § 1.5). Как будет очевидно из дальнейшего, все результаты, полученные в этих главах, не зависят от величины этого множителя. Поэтому, не ограничивая общности, можно положить

$$\sigma^{-2} = 1 \text{ и } \omega_i = \lambda(\mathbf{x}_i)r_i,$$

где  $\lambda(\mathbf{x})$  — известная функция.

Обобщение результатов глав 2, 3, а также методов последовательного планирования (гл. 4) на случай, когда в каждой точке факторного пространства возможно одновременное измерение нескольких величин  $\mathbf{y} = \|y_1, y_2, \dots, y_l\|$ , будет проведено в гл. 5.

II. Исследуем основные свойства информационной матрицы. В данной главе, если это не оговорено специально, мы будем рассматривать только непрерывные нормированные планы и предполагать, что  $\eta(\mathbf{x}, \theta) = \theta^T \mathbf{f}(\mathbf{x})$ . Обобщение результатов на случай нелинейной параметризации будет рассмотрено в § 2.8 и последующих главах.

Прежде всего приведем некоторые определения [23], [24], которые нам будут необходимы при формулировке и доказательстве теоремы 2.1.2 об основных свойствах информационной матрицы.

Будем обозначать через  $S_n$  евклидово  $n$ -мерное пространство векторов  $\mathbf{s}^T = \|s_1, s_2, \dots, s_n\|$ , где каждое  $s_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) представляет собой вещественное число.

*Определение 1.* Множество всех  $\mathbf{s}$ , для которых  $(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)^T (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) < \delta^2$ ,  $\delta > 0$ , называется сферой с центром в точке  $\mathbf{s}_0$  радиусом  $\delta$ .

*Определение 2.* Точка  $\mathbf{s} \in S$  называется внутренней точкой множества  $S$ , если существует сфера с центром в точке  $\mathbf{s}$ , являющаяся подмножеством множества  $S$ .

*Определение 3.* Точка  $\mathbf{s}$  называется граничной точкой множества  $S$ , если любая сфера с центром в точке  $\mathbf{s}$  содержит точки, принадлежащие и не принадлежащие множеству  $S$ .

*Определение 4.* Множество  $S$ , все точки которого — внутренние, называется открытым. Множество  $S$  называется замкнутым, если дополнительное к нему множество  $\bar{S}$  всех точек  $\mathbf{s}$ , не принадлежащих  $S$ , является открытым.

Очевидно, что множество, содержащее все свои граничные точки, замкнуто.

*Определение 5.* Множество  $S$  называется выпуклым, если любая точка

$$\mathbf{s} = (1 - \alpha) \mathbf{s}_1 + \alpha \mathbf{s}_2,$$

где

$$\mathbf{s}_1 \in S, \mathbf{s}_2 \in S \text{ и } 0 \leq \alpha \leq 1,$$

принадлежит этому множеству.

Выпуклыми множествами, например, являются точки, прямые, отрезки, сферы, гиперплоскости и т. д.

Множество  $S^*$  точек

$$\mathbf{s}^* = \sum_{i=1}^k \alpha_i \mathbf{s}_i,$$

где

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i = 1, \alpha_i \geq 0, \mathbf{s}_i \in S \quad (i=1, 2, \dots, k; k=1, 2, \dots),$$

является, как нетрудно проверить, выпуклым множеством.



**Определение 6.** Множество  $S^*$  называется выпуклой оболочкой множества  $S$ .

В дальнейшем мы будем существенно опираться на следующее утверждение.

**Теорема 2.1.1** (теорема Каратеодори). *Всякую точку  $s^*$  в выпуклой оболочке  $S^*$  любого подмножества  $S$   $n$ -мерного пространства можно представить в виде*

$$s^* = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i s_i,$$

где

$$\alpha_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i = 1, \quad s_i \in S.$$

Если  $s^*$  — граничная точка множества  $S^*$ , то  $\alpha_{n+1}$  можно положить равным нулю.

Докажем теперь теорему о свойствах информационной матрицы.

**Теорема 2.1.2.** 1. Для любого плана  $\epsilon$  информационная матрица  $M(\epsilon)$  — положительно полуопределенная.

2. Матрица  $M(\epsilon)$  — особенная ( $|M(\epsilon)| = 0$ ), если спектр плана  $\epsilon$  содержит меньше чем  $t$  точек ( $t$  — число неизвестных параметров).

3. Множество матриц  $M(\epsilon)$ , соответствующее всем возможным нормированным планам, является выпуклым. Если функции  $f(x)$  и функция эффективности  $\lambda(x)$  непрерывны и область  $X$ , где возможны измерения, замкнута, то множество информационных матриц замкнуто.

4. Для любого плана  $\epsilon$  всегда найдется план  $\tilde{\epsilon}$ , спектр которого содержит не более чем  $\frac{m(m+1)}{2} + 1$  точек и информационная матрица которого  $M(\tilde{\epsilon})$  совпадает с информационной матрицей  $M(\epsilon)$  плана  $\epsilon$ .

**Доказательство.** 1. Согласно определению 12 из § 1.1 достаточно показать, что матрица  $M$  симметрична и что для любого вектора  $z$  с действительными компонентами квадратичная форма

$$z^T M(\epsilon) z \geq 0.$$

Симметричность информационной матрицы следует из ее определения, а неотрицательность соответствующей

квадратичной формы легко проверяется:

$$\mathbf{z}^T \mathbf{M}(\varepsilon) \mathbf{z} = \int_X \mathbf{z}^T \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{z} d\xi(\mathbf{x}) = \int_X [\mathbf{z}^T \mathbf{f}(\mathbf{x})]^2 d\xi(\mathbf{x}) \geq 0.$$

Таким образом, информационная матрица положительно полуопределена.

2. Если число точек плана конечно, то согласно определению

$$\mathbf{M}(\varepsilon) = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i).$$

Ранг матрицы данного типа не превышает числа слагаемых (см. теорему 1.1.17), следовательно,  $|\mathbf{M}(\varepsilon)| = 0$ , если  $n < m$  (размер информационной матрицы  $m \times m$ ) и матрица  $\mathbf{M}(\varepsilon)$  является особенной.

3. Пусть  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  — два произвольных нормированных плана, заданных на замкнутом множестве  $X$ . Пусть каждый из этих планов характеризуется соответственно мерой  $\xi_1(\mathbf{x})$  и мерой  $\xi_2(\mathbf{x})$ . Тогда под линейной комбинацией этих планов

$$\varepsilon = (1 - \alpha) \varepsilon_1 + \alpha \varepsilon_2$$

подразумевается нормированный план с мерой

$$\xi(\mathbf{x}) = (1 - \alpha) \xi_1(\mathbf{x}) + \alpha \xi_2(\mathbf{x}).$$

Легко проверить, опираясь непосредственно на определение информационной матрицы (см., например, (1.10.5)), что матрица

$$\mathbf{M} = (1 - \alpha) \mathbf{M}(\varepsilon_1) + \alpha \mathbf{M}(\varepsilon_2)$$

является информационной матрицей нормированного плана  $\varepsilon = (1 - \alpha) \varepsilon_1 + \alpha \varepsilon_2$ , заданного на  $X$ , т. е. принадлежит рассматриваемому множеству. Отсюда и из определения выпуклого множества (см. определение 5) следует, что множество информационных матриц, соответствующих непрерывным нормированным планам, заданным на  $X$ , выпукло.

Замкнутость множества информационных матриц следует из замкнутости  $X$  и непрерывности  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  и  $\lambda(\mathbf{x})$ .

4. Так как любая информационная матрица симметрична ( $\mathbf{M}_{\alpha\beta} = \mathbf{M}_{\beta\alpha}$ ;  $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, m$ ), то она полностью описывается  $\frac{m(m+1)}{2}$  элементами. Иными словами, каждой

информационной матрице можно сопоставить вектор размерности  $\frac{m(m+1)}{2}$ . Непосредственно из определения информационной матрицы следует, что множество векторов, определяющих информационные матрицы  $M(\varepsilon)$ , где  $\varepsilon$  — произвольные нормированные планы, является выпуклой оболочкой множества, состоящего из векторов, соответствующих информационным матрицам  $M(\varepsilon(\mathbf{x}))$ , где спектр плана  $\varepsilon(\mathbf{x})$  состоит из единственной точки  $\mathbf{x}$ . Отсюда и из теоремы Каратеодори вытекает утверждение 4.

Свойство 4 особенно важно с практической точки зрения. Оно говорит о том, что для любого плана эксперимента  $\varepsilon$  с числом точек, превышающим  $N = \frac{(m+1)m}{2} + 1$ , и информационной матрицей  $M(\varepsilon)$  всегда можно найти план  $\tilde{\varepsilon}$  с числом точек меньшим или равным  $N$ , который при тех же затратах (общем числе отдельных измерений) будет иметь информационную матрицу  $M(\tilde{\varepsilon}) = M(\varepsilon)$ . Иными словами, для плана  $\varepsilon$  всегда найдется план с меньшим числом точек, но эквивалентный ему в смысле (1.9.1) — (1.9.6). Таким образом, распределение измерений больше чем в  $N = \frac{(m+1)m}{2} + 1$  точках никакой выгоды с математико-статистической точки зрения принести не может.

## § 2.2. Эквивалентность $D$ -оптимальных и минимаксных планов. Основные свойства этих планов

1. Очевидно, что за исключением, быть может, случаев тривиальных регрессионных задач не существует универсальных оптимальных планов, которые одновременно удовлетворяли бы всем критериям оптимальности, перечисленным в § 1.9 (см. также пример из указанного параграфа).

Однако некоторые из критериев оптимальности оказываются тесно связанными между собой и для них удается построить единые оптимальные планы.

В данном параграфе будет обсуждаться связь между  $D$ -оптимальными и минимаксными планами.

$D$ -критерий и минимаксный критерий сравнивают результаты эксперимента в разных пространствах. Поэтому существование планов, одновременно оптимальных по каждому из этих критериев, было бы весьма удобным для экспериментатора. При

$$p_i = r_i N^{-1},$$

где  $r_i$  и  $N$  — целые числа, не удастся получить каких-либо общих заключений по этому вопросу.

При переходе к непрерывным планам, которые являются хорошим приближением действительности при больших  $N$ , между  $D$ -оптимальными и минимаксными планами удастся обнаружить тесную связь, а именно, непрерывные  $D$ -оптимальные и минимаксные планы эквивалентны для случая равноточных измерений, т. е. при  $\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1$ . Иными словами,  $D$ -оптимальный план является одновременно и минимаксным и, наоборот, минимаксный план является  $D$ -оптимальным (Кифер, Вольфовитц (1960), [25]).

Для доказательства этого фундаментального утверждения нам будут необходимы следующие вспомогательные утверждения.

**Лемма 2.2.1.** Пусть информационная матрица произвольного плана  $\varepsilon$  неособенная, тогда:

1. Взвешенная сумма дисперсий оценки поверхности отклика  $d(\mathbf{x}, \varepsilon)$ , взятая по всем точкам плана  $\varepsilon$ , равна числу неизвестных параметров  $m$ :

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, \varepsilon) = m;$$

в более общем случае:

$$\int_X \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) d\xi(\mathbf{x}) = m.$$

2. Минимальное значение  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon)$  не может быть меньше  $m$ :

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) \geq m.$$

Доказательство. 1. Воспользуемся явным видом выражения для дисперсии оценки поверхности отклика:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{X}} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) d\xi(\mathbf{x}) &= \int_{\mathcal{X}} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}) = \\ &= \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon) \int_{\mathcal{X}} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}) = \\ &= \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon) \mathbf{M}(\varepsilon) = \text{Sp } \mathbf{I}_m = m. \end{aligned}$$

Здесь мы использовали, что  $\text{Sp } \mathbf{AB} = \text{Sp } \mathbf{BA}$ , и явное выражение для информационной матрицы.

2. Нетрудно видеть, что

$$\int_{\mathcal{X}} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) d\xi(\mathbf{x}) = d^* \int_{\mathcal{X}} d\xi(\mathbf{x}) = d^* = m,$$

где

$$\min_x \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) \leq d^* \leq \max_x \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon).$$

Поэтому

$$\max_x \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) \geq m.$$

Ниже нам будет необходимо понятие выпуклой вогнутой функции.

*Определение.* Если  $S$  — выпуклое множество, то числовая функция, определенная на  $S$ , называется выпуклой,

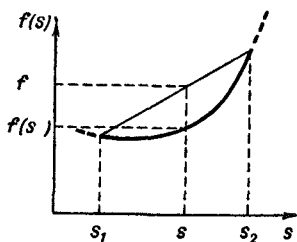


Рис. 5а. Выпуклая функция,  
 $s^* = (1 - \alpha) s_1 + \alpha s_2$ ,  
 $f^* = (1 - \alpha) f(s_1) + \alpha f(s_2)$ .

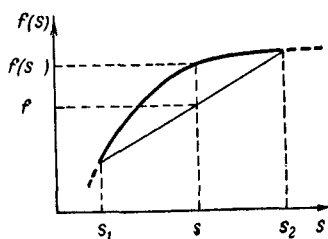


Рис. 5б. Вогнутая функция,  
 обозначения те же, что и на  
 рис. 5а.

если для всех  $s_1, s_2 \in S$  и всех  $\alpha$ , удовлетворяющих условию  $0 < \alpha < 1$ ,

$$f[(1 - \alpha) s_1 + \alpha s_2] \leq (1 - \alpha) f(s_1) + \alpha f(s_2),$$

и называется вогнутой, если

$$f[(1-\alpha)s_1 + \alpha s_2] \geq (1-\alpha)f(s_1) + \alpha f(s_2).$$

Если эти неравенства являются строгими при  $s_1 \neq s_2$ ,  $0 < \alpha < 1$ , то функция  $f$  называется соответственно строго выпуклой или строго вогнутой.

На рис. 5а приведен пример выпуклой функции и на рис. 5б — вогнутой функции.

**Лемма 2.2.2.** *Функция  $\ln |M(\varepsilon)|$ , где  $M(\varepsilon)$  — информационная матрица плана  $\varepsilon$ , является строго вогнутой функцией.*

**Доказательство.** В теореме 2.1.2 показано, что множество матриц  $M(\varepsilon)$  — выпуклое множество. Поэтому для доказательства леммы достаточно показать, что

$$\ln |M| > (1-\alpha) \ln |M_1| + \alpha \ln |M_2|,$$

где

$$M_1 \neq M_2 \text{ и } M = (1-\alpha)M_1 + \alpha M_2, \quad 0 < \alpha < 1.$$

Последнее неравенство немедленно следует из неравенства (см. теорему 1.1.14):

$$|M| > |M_1|^{1-\alpha} |M_2|^\alpha.$$

**Лемма 2.2.3.** *Пусть имеется два плана  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  с информационными матрицами  $M(\varepsilon_1)$  и  $M(\varepsilon_2)$ . Тогда*

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\varepsilon)| = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon) [M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)],$$

где  $M(\varepsilon)$  — информационная матрица плана

$$\varepsilon = (1-\alpha)\varepsilon_1 + \alpha\varepsilon_2, \quad 0 \leq \alpha \leq 1.$$

**Доказательство.** Согласно теореме 2.1.2

$$M(\varepsilon) = (1-\alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2).$$

Продифференцируем  $\ln |(1-\alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2)|$  по  $\alpha$ :

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\varepsilon)| = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon) \frac{\partial M(\varepsilon)}{\partial \alpha} = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon) [M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)].$$

В доказательстве мы использовали результаты раздела VI § 1.1.

**Теорема 2.2.1** (теорема эквивалентности [25]). *Следующие утверждения:*

1. план  $\varepsilon^*$  максимизирует  $|M(\varepsilon)|$  (минимизирует  $|D(\varepsilon)|$ );
2. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \varepsilon)$ ;

3.  $\max_{x \in X} d(x, \epsilon^*) = m$  — эквивалентны между собой.

Информационные матрицы всех планов, удовлетворяющих 1 — 3, совпадают между собой. Любая линейная комбинация планов, удовлетворяющих 1 — 3, также удовлетворяет 1 — 3.

Доказательство. 1. Покажем, что из 1 следует 2. Пусть план  $\epsilon^*$  максимизирует  $|\mathbf{M}(\epsilon)|$ .

Рассмотрим план, соответствующий линейной комбинации плана  $\epsilon^*$  и некоторого произвольного плана  $\epsilon$ :

$$\tilde{\epsilon} = (1 - \alpha) \epsilon^* + \alpha \epsilon.$$

Согласно лемме 2.2.3

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\tilde{\epsilon})| \Big|_{\alpha=0} &= \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\tilde{\epsilon}) [\mathbf{M}(\epsilon) - \mathbf{M}(\epsilon^*)] \Big|_{\alpha=0} = \\ &= \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\epsilon^*) \mathbf{M}(\epsilon) - m. \end{aligned}$$

В силу определения плана  $\epsilon^*$  вычисленная производная должна быть меньше или равна нулю.

Предполагая, что спектр плана  $\epsilon$  состоит из одной точки  $x$ , принадлежащей  $X$ , получим

$$\begin{aligned} \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\epsilon^*) \mathbf{M}(\epsilon(x)) - m &= \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\epsilon) \lambda(x) f(x) f^T(x) - m = \\ &= \lambda(x) d(x, \epsilon) - m \leq 0. \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

С другой стороны, из леммы 2.2.1 для любого плана, в том числе и  $\epsilon^*$ ,

$$\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \epsilon^*) \geq m. \quad (2.2.2)$$

Сравнение (2.2.1) и (2.2.2) показывает, что  $D$ -оптимальный план минимизирует  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \epsilon^*)$ .

2. Пусть план  $\epsilon^*$ , минимизирующий  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \epsilon^*)$ , не  $D$ -оптимален, тогда в силу строгой вогнутости  $\ln |\mathbf{M}(\epsilon)|$  найдется такой план  $\epsilon$ , что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |(1 - \alpha) \mathbf{M}(\epsilon^*) + \alpha \mathbf{M}(\epsilon)| \Big|_{\alpha=0} &= \\ &= \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\epsilon^*) \mathbf{M}(\epsilon) - m > 0. \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

Согласно теореме 2.1.2 любой план  $\epsilon$  можно представить в виде суперпозиции  $\frac{m(m+1)}{2} + 1$  планов  $\mathbf{M}(\epsilon(x_i))$

$(i=1, 2, \dots, \frac{(m+1)m}{2} + 1)$ . Поэтому, не ограничивая общности, можно считать, что план  $\varepsilon$  состоит из конечного числа точек. Тогда

$$\text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*) \mathbf{M}(\varepsilon) - m = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, \varepsilon^*) - m.$$

Но план  $\varepsilon^*$  — минимаксный, т. е.  $\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon^*) \leq m$  (см. предыдущий пункт), следовательно,

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, \varepsilon^*) - m \leq m \sum_{i=1}^n p_i - m = 0. \quad (2.2.4)$$

Неравенства (2.2.3) и (2.2.4) совместны только, если план, минимизирующий  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon)$ ,  $D$ -оптимален.

3. Эквивалентность утверждений 1 и 3, 2 и 3 непосредственно следует из эквивалентности утверждений 1 и 2 и леммы 2.2.1.

4. Пусть планы  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  с информационными матрицами  $\mathbf{M}(\varepsilon_1)$  и  $\mathbf{M}(\varepsilon_2)$  являются  $D$ -оптимальными и  $\mathbf{M}(\varepsilon_1) \neq \mathbf{M}(\varepsilon_2)$ .

Рассмотрим информационную матрицу, соответствующую композиции планов  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ :

$$\mathbf{M}(\varepsilon) = (1 - \alpha) \mathbf{M}(\varepsilon_1) + \alpha \mathbf{M}(\varepsilon_2).$$

Согласно лемме 2.2.2

$$\ln |\mathbf{M}(\varepsilon)| > (1 - \alpha) \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_1)| + \alpha \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_2)|. \quad (2.2.5)$$

Но по определению  $D$ -оптимального плана

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_1)| = |\mathbf{M}(\varepsilon_2)| \geq |\mathbf{M}(\varepsilon)|. \quad (2.2.6)$$

Нетрудно видеть, что (2.2.5) и (2.2.6) не противоречат друг другу, если

$$\mathbf{M}(\varepsilon_1) = \mathbf{M}(\varepsilon_2) = \mathbf{M}(\varepsilon). \quad (2.2.7)$$

Учитывая результаты пунктов 1–3 и (2.2.7), нетрудно убедиться в справедливости заключительной части теоремы.

Теорема 2.2.1 играет важную роль в построении математического аппарата планирования. Из нее, в частности, следует, что при  $\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1$  минимаксные (в смысле (1.9.5)) непрерывные планы эквивалентны непрерывным  $D$ -оптимальным планам. Поэтому, доказав какое-либо



свойство для  $D$ -оптимального плана, мы можем быть уверены в справедливости этого свойства для минимаксного плана. С другой стороны, при построении оптимальных планов можно поочередно пользоваться свойствами  $D$ -оптимальных и минимаксных планов. Как мы увидим ниже, это позволяет в некоторых случаях находить оптимальные планы простыми и элегантными способами.

Теорема 2.2.1 дает также очень простой способ проверки  $D$ -оптимальности плана. Для этого достаточно проверить, что функция  $\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon)$  не превышает  $m$ . При этом весьма полезным оказывается следующее следствие теоремы 2.2.1.

*Следствие.* В точках оптимального плана  $\varepsilon^*$  функция  $\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon^*)$  достигает своего максимального значения  $m$ .

Предположим противное:

$$\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon^*) < m,$$

где  $\mathbf{x}$  — одна из точек плана  $\varepsilon^*$ . Тогда в силу пункта 3 доказанной теоремы

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, \varepsilon^*) < \sum_{i=1}^n p_i m = m,$$

но по лемме 2.2.1

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, \varepsilon^*) = m.$$

Полученное противоречие доказывает наше утверждение.

Следствие особенно удобно тем, что позволяет вместо проверки выполнения неравенства

$$\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon) \leq m$$

по всей области  $X$  ограничиться проверкой выполнения равенства

$$\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon) = m \tag{2.2.8}$$

только для точек плана  $\mathbf{x}_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ).

Отметим, что выполнение равенства (2.2.8) в точках  $D$ -оптимального плана является условием необходимым, но не достаточным.

Сформулируем еще одно простое, но очень полезное при построении  $D$ -оптимальных планов утверждение.

**Теорема 2.2.2.** Если  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  — два плана с различными информационными матрицами  $M(\epsilon_1)$  и  $M(\epsilon_2)$ , причем  $|M(\epsilon_1)| = |M(\epsilon_2)|$ , то план

$$\epsilon = (1 - \alpha) \epsilon_1 + \alpha \epsilon_2, \quad 0 < \alpha < 1,$$

имеет определитель

$$|M(\epsilon)| > |M(\epsilon_1)|.$$

Доказательство данной теоремы немедленно следует из строгой вогнутости функций  $\ln |M(\epsilon)|$ .

Теорема эквивалентности 2.2.1 и теорема 2.2.2 во многих не слишком сложных регрессионных задачах позволяют построить  $D$ -оптимальные планы, минуя сложные вычисления и опираясь в основном на полуинтуитивные соображения.

Обычно при этом процедура поиска оптимальных планов заключается в следующем.

Из соображений симметрии или, исходя из вида поверхности отклика, из области действия  $X$  выделяют множество точек, в которых, по-видимому, разумно разместить измерения. Внутри этого семейства производят минимизацию определителя  $|D(\epsilon)|$  или  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \epsilon)$  по  $\epsilon$  и затем проверяют, удовлетворяет ли план условиям теоремы 2. 2. 1 (или ее следствия).

**Пример 1.** Пусть

$$E(y/x) = \theta_1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \dots + \theta_m x_{m-1}.$$

Областью действия  $X$  является гиперсфера с центром в начале координат и с радиусом, равным единице:

$$x^T x = 1.$$

Так как дисперсионная матрица  $D(\epsilon)$  оценок параметров  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$  для любого невырожденного плана — положительно определенная, то квадратичная форма

$$d(x, \epsilon) = f^T(x) D(\epsilon) f(x),$$

где  $f^T(x) = \|1, x_1, x_2, \dots, x_{m-1}\|$ , достигает своего максимального значения на границе области  $X$  (в данном случае на гиперсфере с радиусом, равным единице). Следовательно, точки  $D$ -оптимального плана должны лежать на указанной поверхности.

Известно, что уровни постоянных значений положительно определенной квадратичной формы есть эллипсоиды. Но, как легко видеть, любой эллипсоид, описанный вокруг гиперсферы и касающийся ее в точках, не лежащих на одной гиперплоскости, совпадает с этой гиперсферой, т. е. для  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon^*$  квадратичная форма  $d(\mathbf{x}, \varepsilon^*)$  должна в качестве поверхностей постоянных значений иметь гиперсферы. Это эквивалентно тому, что матрица  $\mathbf{D}(\varepsilon^*)$  должна совпадать с диагональной матрицей, элементы которой  $D_{\alpha\alpha}(\varepsilon^*)$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ) совпадают друг с другом.

Если учесть, что  $D_{11}(\varepsilon^*) = 1$  (так как  $M_{11} = \sum_{i=1}^n p_i = 1$ ), то единственной такой матрицей, удовлетворяющей дополнительному условию (см. следствие теоремы 2.2.1)

$$d(\mathbf{x}, \varepsilon^*)|_{x^T \mathbf{x} = 1} = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x})|_{x^T \mathbf{x} = 1} = \sum_{\alpha=1}^m D_{\alpha\alpha}(\varepsilon^*) = m,$$

является единичная матрица  $\mathbf{I}_m$ . Поэтому должны выполняться уравнения

$$M_{(k-1)(k-1)}(\varepsilon^*) = \sum_{i=1}^n p_i x_{ki} x_{ki} = 1;$$

$$M_{(k-1)(j-1)}(\varepsilon^*) = \sum_{i=1}^n p_i x_{ki} x_{ji} = 0;$$

$$M_{(k-1)1}(\varepsilon^*) = \sum_{i=1}^n p_i x_{ki} = 0.$$

Из геометрических соображений нетрудно видеть, что данным условиям удовлетворяют планы, спектры которых совпадают с вершинами любого правильного многогранника, вписанного в гиперсферу.

**Пример 2 [11].** Пусть поверхность отклика является поверхностью второго порядка, а область действия  $X$  совпадает с гиперкубом:

$$E(y/\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^m \theta_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}),$$

$$\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1, \quad -1 \leq x_q \leq 1, \quad q = 1, 2, \dots, k.$$

Набор функций  $f_\alpha(\mathbf{x})$  можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{x}) &= 1; & f_{1+j}(\mathbf{x}) &= x_j^2, & 1 \leq j \leq k; \\ f_{1+k+j}(\mathbf{x}) &= x_j, & 1 \leq j \leq k; \\ f_{1+2k+j}(\mathbf{x}) &= x_p x_r, & p < r, \\ r &= 1, 2, \dots, k, & p &= 1, 2, \dots, r-1. \end{aligned}$$

Легко проверить, что размерность вектора  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  равна

$$m = \frac{(k+1)(k+2)}{2}.$$

Из соображений симметрии естественно предположить, что один из  $D$ -оптимальных планов принадлежит множеству планов, имеющих вид: измерения с весами  $\alpha$  проводятся в каждой из  $2^k$  вершин  $k$ -мерного куба, с весами  $\beta$  в каждой из  $k2^{k-1}$  точек, которые являются серединами ребер, и с весами  $\gamma$  в каждой из  $k(k-1)2^{k-3}$  центров двумерных граней. Спектр указанных планов состоит из  $n = 2^{k-3} [8 + 4k + k(k-1)]$  точек.

После того как будет найден минимум определителя  $|\mathbf{D}|$  по  $\alpha, \beta, \gamma$  ( $\sum \alpha + \sum \beta + \sum \gamma = 1$ ), мы проверим выполнение неравенства

$$\max_{\mathbf{x} \in X} d(\mathbf{x}) \leq m.$$

Если это неравенство выполняется, то найденный нами план согласно теореме 2.2.1 будет  $D$ -оптимальным.

Нетрудно проверить, что информационная матрица, построенная согласно предложенному плану, имеет вид

$$\mathbf{M}(\varepsilon^*) = \begin{vmatrix} 1 & \mathbf{F} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{F}^\tau & \mathbf{G} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & u\mathbf{I}_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & v\mathbf{I}_{\frac{k(k-2)}{2}} \end{vmatrix}.$$

Здесь

$$u = \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 p_i = 2^{k-3} [8\alpha + 4(k-1)\beta + (k-1)(k-2)\gamma],$$

$$v = \sum_{i=1}^n x_{1i}^2 x_{2i}^2 p_i = 2^{k-3} [8\alpha + 4(k-2)\beta + (k-2)(k-3)\gamma],$$

(2.2.9)

где  $p_i$  в зависимости от значения  $i$  равны одному из трех значений  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ .

Все элементы вектора столбца  $F$  равны  $F_j = u$  ( $j=1, 2, \dots, k$ ). Матрица  $G$  имеет размеры  $k \times k$ , ее диагональные элементы равны  $u$ , недиагональные  $v$ . Определитель матрицы  $M(\varepsilon)$  равен

$$|M(\varepsilon)| = u^q v^{q(q-1)/2} (u-v)^{q-1} [u + (q-1)v - qu^2].$$

Решая систему уравнений

$$\frac{\partial |M|}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial |M|}{\partial v} = 0$$

при условии

$$\alpha > 0, \quad \beta > 0, \quad \gamma > 0,$$

получим

$$u = \frac{k+3}{4(k+1)(k+2)^2} [2k^2 + 3k + 7 + (k-1)(4k^2 + 12k + 17)^{1/2}],$$

$$v = \frac{k+3}{8(k+1)(k+2)^3} [4k^3 + 8k^2 + 11k - 5 + (2k^2 + k + 3)(4k^2 + 12k + 17)^{1/2}].$$

Для данных  $u$  и  $v$  после несложных, но громоздких вычислений получим

$$d(x, \varepsilon) = \frac{(k+1)(k+2)}{2} - c \sum_{i=1}^m (x_i^2 - x_i^1),$$

где  $c$  — положительная константа. Нетрудно видеть, что в области  $-1 \leq x_q \leq 1$ ,  $q=1, 2, \dots, k$ ,

$$\max_x d(x, \varepsilon) = \frac{(k+1)(k+2)}{2}.$$

Из системы (2.2.9) и условия нормировки весов

$$\sum \alpha + \sum \beta + \sum \gamma = 2^{k-3} [8\alpha + 4k\beta + k(k-1)\gamma] = 1$$

можно найти оптимальные  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ :

$$\begin{aligned} \alpha &= 2^{-k-1} [(k-1)(k-2) - 2k(k-2)u + k(k-1)v], \\ \beta &= 2^{-k+1} [(2k-3)u - (k-1)v - (k-2)], \\ \gamma &= 2^{-k+2} [1 + v - 2u]. \end{aligned}$$

Значения  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  для  $q \leq 5$  приведены в табл. 1. Для  $q \geq 6$  изложенный метод построения  $D$ -оптимальных планов не пригоден, так как  $\beta(q \geq 6) < 0$ , что невозможно.

Таблица 1

$q$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
1	0,333	0,333	0,000
2	0,1458	0,08015	0,0962
3	0,071975	0,01895	0,03280
4	0,03705	0,0038375	0,01185
5	0,01928	0,0003125	0,004475

II. При рассмотрении оптимальных непрерывных планов в силу теоремы 2.2.1 при равноточных измерениях нет необходимости разделять  $D$ -оптимальные и минимаксные планы. Поэтому в дальнейшем мы будем говорить только о  $D$ -оптимальных непрерывных планах, подразумевая, что все полученные результаты будут в равной мере относиться и к минимаксным непрерывным планам.

Покажем, что для  $D$ -оптимальных планов верхняя граница минимального количества точек плана оказывается на единицу меньше, чем для произвольного плана.

**Теорема 2.2.3.** Если множество  $X$  замкнуто и функции  $\lambda(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  непрерывны, то для любого  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon^*$  с информационной матрицей  $\mathbf{M}(\varepsilon^*)$  и числом точек  $n > \frac{m(m+1)}{2}$  всегда найдется план  $\tilde{\varepsilon}^*$  с числом точек

$N \leq \frac{m(m+1)}{2}$  и определителем информационной матрицы

$$|\mathbf{M}(\varepsilon^*)| = |\mathbf{M}(\tilde{\varepsilon}^*)|.$$

Доказательство. Так как множество информационных матриц является выпуклой оболочкой информационных матриц  $\mathbf{M}(\varepsilon(\mathbf{x}))$ , соответствующих точечным планам  $\varepsilon(\mathbf{x})$ , то из теоремы Каратеодори следует, что любая граничная точка этого множества может быть выражена в виде линейной комбинации

$$\mathbf{M}(\varepsilon) = \sum_{i=1}^q p_i \mathbf{M}(\varepsilon(\mathbf{x}_i)),$$

$$q = \frac{m(m+1)}{2},$$

где  $p_i \geq 0$ ,  $\sum_{i=1}^q p_i = 1$  и  $\mathbf{M}(\varepsilon(\mathbf{x}_i))$  — информационные матрицы планов, сосредоточенных в точках  $\mathbf{x}_i$ .

Поэтому для доказательства теоремы достаточно показать, что информационные матрицы, соответствующие  $D$ -оптимальным планам, являются граничными точками множества всех информационных матриц.

Предположим, что  $\mathbf{M}(\varepsilon^*)$  — внутренняя точка указанного множества. Тогда существует такое положительное число  $\alpha$ , что матрица

$$\mathbf{M}(\varepsilon) = (1 + \alpha) \mathbf{M}(\varepsilon^*),$$

где  $\mathbf{M}(\varepsilon)$  — информационная матрица некоторого плана  $\varepsilon$ , также принадлежит рассматриваемому множеству информационных матриц. Но

$$|(1 + \alpha) \mathbf{M}(\varepsilon^*)| = (1 + \alpha)^m |\mathbf{M}(\varepsilon^*)| > |\mathbf{M}(\varepsilon^*)|,$$

что противоречит определению оптимального плана. Отсюда матрица  $\mathbf{M}(\varepsilon^*)$  является граничной точкой.

Теорема 2.2.3 особенно полезна при численных методах построения  $D$ -оптимальных планов, так как позволяет сократить размерность экстремальной задачи.

**III.** Обычно желательно, чтобы оптимальные планы обладали возможно большим спектром свойств инвариантности. Например, для экспериментатора очень удобно, когда оптимальный план инвариантен относительно перехода от одного критерия оптимальности к другому. Примером инвариантности подобного рода может служить эквивалентность непрерывных  $D$ -оптимальных и минимаксных планов ( $\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1$ ). Чрезвычайно заманчива перспектива построения планов, которые были бы оптимальны не только для заданного набора функций  $\mathbf{f}^r(\mathbf{x}) = \|f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})\|$ , но и для возможно более широкого семейства наборов функций  $\tilde{\mathbf{f}}^r(\mathbf{x}) = \|\tilde{f}_1(\mathbf{x}), \tilde{f}_2(\mathbf{x}), \dots, \tilde{f}_m(\mathbf{x})\|$ . Исследуем, в какой степени  $D$ -оптимальные планы удовлетворяют указанному свойству инвариантности.

**Теорема 2.2.4.** Пусть  $\mathbf{L}$  — некоторое невырожденное ( $|\mathbf{L}| \neq 0$ ) линейное преобразование

$$\varphi(\mathbf{x}) = \mathbf{L}\mathbf{f}(\mathbf{x}); \quad (2.2.10)$$

тогда план  $\varepsilon^*$ ,  $D$ -оптимальный относительно набора  $f(x)$ , является  $D$ -оптимальным относительно набора  $\varphi(x)$ .

**Доказательство.** Пусть для некоторого плана  $\varepsilon$  дисперсионная матрица  $D(\varepsilon)$  при  $\eta(x, \theta) = \theta^T f(x)$ .

Регрессионную функцию  $\eta(x, \theta)$  можно записать также в виде

$$\eta(x, \theta) = \theta^T \varphi(x) = \theta^T L^{-1} f(x).$$

Так как данное равенство имеет место при любом  $x$ , то

$$\theta = L^T \theta.$$

Согласно следствию 4 теоремы 1.3.2

$$D(\hat{\theta}, \varepsilon) = L^T D(\hat{\theta}, \varepsilon) L$$

или

$$|D(\hat{\theta}, \varepsilon)| = |L|^2 |D(\hat{\theta}, \varepsilon)|. \quad (2.2.11)$$

Минимизируя обе части (2.2.11) по  $\varepsilon$ , получим

$$\min_{\varepsilon} |D(\hat{\theta}, \varepsilon)| = |L|^2 \min_{\varepsilon} |D(\hat{\theta}, \varepsilon)| = |L|^2 |D(\hat{\theta}, \varepsilon^*)|,$$

т. е.

$$\min_{\varepsilon} |D(\hat{\theta}, \varepsilon)| = |D(\hat{\theta}, \varepsilon^*)|,$$

что и требовалось доказать.

Иногда теорему 2.2.4 удобнее использовать в несколько иной форме.

**Теорема 2.2.4а.**  $D$ -оптимальные планы инвариантны относительно любого невырожденного линейного преобразования оцениваемых параметров:

$$\theta = C\theta, \quad |C| \neq 0. \quad (2.2.12)$$

Чтобы перейти от (2.2.12) к (2.2.10), достаточно положить  $C = L^T$ .

В теореме 2.2.4 показано, что  $D$ -оптимальные планы инвариантны относительно преобразований (2.2.10). Существуют преобразования, относительно которых  $D$ -оптимальные планы, не являясь инвариантными, преобразуются по простым правилам.

**Теорема 2.2.5.** Пусть контролируемые переменные  $x$  преобразуются по закону

$$z = Z(x), \quad (2.2.13)$$

где  $Z$  — невырожденное в области  $X$  взаимно однозначное



преобразование:

$$\left| \frac{D(z)}{D(x)} \right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial z_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial z_1(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial z_1(x)}{\partial x_k} \\ \frac{\partial z_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial z_2(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial z_2(x)}{\partial x_k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial z_k(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial z_k(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial z_k(x)}{\partial x_k} \end{vmatrix} \neq 0,$$

и пусть  $\varepsilon_x^*$  —  $D$ -оптимальный план для регрессионной функции  $\eta(x, \theta) = \theta^T f(x)$  с функцией распределения затрат  $p(x)$ , определенной на  $X$ .

Тогда функция распределения затрат  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon_z^*$  регрессионной функции  $\eta(z, \theta) = \theta^T \Phi(z)$  равна

$$p(z) = \left| \frac{D(x)}{D(z)} \right| p(x). \quad (2.2.14)$$

При дискретном спектре план  $\varepsilon_z^*$  связан с планом  $\varepsilon_x^*$  следующим образом:

$$\varepsilon_z^* = \left\{ \begin{array}{l} z_1 = Z(x_1); z_2 = Z(x_2); \dots; z_n = Z(x_n) \\ p_{z_1} = p_{x_1}; p_{z_2} = p_{x_2}; \dots; p_{z_n} = p_{x_n} \end{array} \right\}. \quad (2.2.15)$$

Доказательство. Для доказательства теоремы достаточно проверить, что  $\lambda(z) d(z, \varepsilon_z^*) \leq m$  при  $z \in \{Z(x), x \in X\}$ . Действительно, для плана  $\varepsilon_z^*$ , определяемого (2.2.14), имеем:

$$\begin{aligned} \lambda(z) d(z, \varepsilon_z^*) &= \lambda(z) \Phi^T(z) \left[ \int_Z \lambda(z) p(z) \Phi(z) \Phi^T(z) dz \right]^{-1} \Phi(z) = \\ &= \lambda[Z(x)] \Phi^T[Z(x)] \left[ \int_X \lambda[Z(x)] p(x) \left| \frac{D(x)}{D(z)} \right| \Phi[Z(x)] \times \right. \\ &\quad \left. \times \Phi^T[Z(x)] \left| \frac{D(z)}{D(x)} \right| dx \right]^{-1} \Phi[Z(x)] = \\ &= \lambda(x) f^T(x) \times \left[ \int_X \lambda(x) p(x) f(x) f^T(x) dx \right]^{-1} f(x) = \\ &= \lambda(x) d(x, \varepsilon_x^*), \end{aligned}$$

так как  $\lambda[Z(x)] = \lambda(x)$  и  $\Phi[Z(x)] = f(x)$ . Поэтому

$$\max_{z \in Z} \lambda(z) d(z, \varepsilon_z^*) = \max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \varepsilon_x^*) \leq m. \quad (2.2.16)$$

Из (2.2.16) и теоремы эквивалентности 2.2.1 следует, что распределение затрат  $p(z)$ , определяемое (2.2.14), соответствует  $D$ -оптимальному плану в пространстве  $Z$ .

Дискретный случай рассматривается аналогично (интегрирование при этом заменяется суммированием).

Изложенная теорема позволяет во многих случаях преобразованием контролируемых переменных привести функции  $\eta(x, \theta)$  и  $\lambda(x)$  к функциям, для которых  $D$ -оптимальный план известен или может быть сравнительно просто построен.

**Пример 3.** Пусть  $\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 e^{-\lambda_1 x}$ ,  $\lambda(x) = e^{-\lambda_1 x}$ ,  $0 \leq x \leq \infty$ . Требуется найти  $D$ -оптимальный план  $\varepsilon_x^*$ . Произведем замену переменных  $z = e^{-\lambda_1 x}$ . Тогда регрессионная функция примет вид

$$\eta(z, \theta) = \theta_1 + \theta_2 z$$

и функция эффективности будет равна

$$\lambda(z) = z, \quad 0 \leq z \leq 1.$$

Для данной регрессионной задачи легко найти  $D$ -оптимальный план.

Рассмотрим планы типа

$$\varepsilon_z = \left\{ \begin{array}{cc} 1; & z \\ 1-p; & p \end{array} \right\}, \quad 0 \leq z \leq 1, \quad 0 < p < 1.$$

Для подобных планов информационная матрица равна

$$M(\varepsilon_z) = \left\| \begin{array}{cc} (1-p) + zp & (1-p) + z^2 p \\ (1-p) + z^2 p & (1-p) + z^3 p \end{array} \right\|$$

и ее определитель

$$|M(\varepsilon_z)| = (1-p)p(z - 2z^2 + z^3).$$

Максимум определителя, как легко проверить, имеет место при  $p = 1/2$  и  $z = 1/3$ . По теореме 2.2.1 нетрудно проверить, что при подобном выборе  $p$  и  $z$  план  $D$ -оптimalен.

Переходя к старой переменной  $x$  и опираясь на теорему 2.2.5, получим

$$\varepsilon_x^* = \left\{ \begin{array}{cc} x_1 = 0, & x_2 = \lambda_1^{-1} \ln 3 \\ 1/2 & , & 1/2 \end{array} \right\}.$$

## § 2.3. Полиномиальная одномерная регрессия

1. Перейдем к непосредственному построению  $D$ -оптимальных планов для конкретных функций  $f_\alpha(x)$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ). В большинстве реальных задач особенно удобными являются планы с минимальным числом точек,

в которых необходимо производить измерения. Поэтому при построении оптимальных планов естественно стремиться к построению непрерывных нормированных планов, имеющих спектры, состоящие из небольшого числа точек.

С вычислительной точки зрения поиск  $D$ -оптимального плана заключается в минимизации по  $p_i$  и  $x_i$  ( $i=1, 2, \dots, n; \sum_{i=1}^n p_i = 1$ ) определителя

$$|D(\varepsilon)| = |M^{-1}(\varepsilon)| = \left| \left[ \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i) \right]^{-1} \right|.$$

Во многих случаях экстремальная задача в пространстве  $n(k+1)$  переменных, где  $k$  — размерность факторного пространства, сводится к нескольким экстремальным задачам, каждая в пространстве меньшего числа переменных. Это резко уменьшает объем вычислений, а иногда позволяет получить явное решение. Подобные упрощения оказываются возможными благодаря тому, что определитель  $|M(\varepsilon)|$  можно представить в специальном виде.

### Теорема 2.3.1.

$$|M(\varepsilon)| = \sum p_{j_1} p_{j_2} \dots p_{j_m} \lambda(x_{j_1}) \lambda(x_{j_2}) \dots \dots \lambda(x_{j_m}) F^2 \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & m \\ j_1 & j_2 & \dots & j_m \end{pmatrix}, \quad (2.3.1)$$

где сумма распространяется на все возможные миноры матрицы

$$F = \| f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n) \|^2.$$

**Доказательство.** Результат (2.3.1) следует непосредственно из теоремы 1.1.2, если положить  $B_{ii} = p_i \lambda(x_i)$  и  $A = F$ .

**Пример 1.** Пусть

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2, \quad \lambda(x) = 1,$$

и область действия определяется неравенствами

$$-1 \leq x_1 \leq 1, \quad -1 \leq x_2 \leq 1.$$

Рассмотрим план, сосредоточенный в трех вершинах квадрата с равными весами  $p_i = 1/3$  ( $i=1, 2, 3$ ). Из сооб-

ражений симметрии очевидно, что можно построить четыре таких плана с одинаковыми определителями информационных матриц, равными

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_3)| = \frac{1}{27} |\mathbf{F}_3|^2,$$

где индекс 3 означает, что спектр плана состоит из трех точек, и

$$\mathbf{F}_3 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \end{vmatrix}.$$

Используя теорему 2.3.1, легко показать, что эти планы не являются оптимальными. Действительно, рассмотрим план, сосредоточенный во всех вершинах куба с равными весами  $p_i = 1/4$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ).

Согласно (2.3.1) определитель информационной матрицы равен

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_4)| = \sum p_{j_1} p_{j_2} p_{j_3} F^2 \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{16} |\mathbf{F}_3|^2.$$

Таким образом,

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_4)| = \frac{1}{16} |\mathbf{F}_3|^2 > \frac{1}{27} |\mathbf{F}_3|^2 = |\mathbf{M}(\varepsilon_3)|.$$

*Следствие.* Особенно простой вид принимает формула (2.3.1) при  $n = m$ :

$$|\mathbf{M}(\varepsilon)| = \prod_{i=1}^m p_i \prod_{i=1}^m \lambda(x_i) |\mathbf{F}|^2.$$

Если из каких-либо соображений удастся показать, что  $D$ -оптимальный план состоит из  $m$  точек, то нетрудно видеть, что все затраты необходимо разместить равномерно:

$$p_1 = p_2 = \dots = p_m = m^{-1}.$$

При этом поиск оптимального плана будет заключаться в минимизации по  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m$  функционала

$$\prod_{i=1}^m \lambda(\mathbf{x}_i) |\mathbf{F}|^2.$$

II. Остановимся подробнее на важном частном случае полиномиальной регрессии.

Функции  $f_\alpha(x) = x^{\alpha-1}$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ) являются достаточно гибкой системой функций и позволяют достаточно хорошо описать на заданном отрезке любую гладкую функцию (подробнее см., например, [22]).

При изучении  $D$ -оптимальных планов в случае одномерной полиномиальной регрессии мы будем использовать некоторые результаты, хорошо известные из теории аппроксимации функций.

*Определение 1.* Система непрерывных функций  $f_\alpha(x)$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ), определенная на отрезке  $[a, b]$ , называется чебышевской системой на  $[a, b]$ , если любая линейная комбинация этих функций  $\sum_{\alpha=1}^m a_\alpha f_\alpha(x)$  ( $a_\alpha$  — действительные и  $\sum_{\alpha=1}^m a_\alpha > 0$ ) имеет не более чем  $m-1$  корней на указанном отрезке.

Данное условие эквивалентно тому, что определитель

$$\begin{vmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \dots & f_m(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \dots & f_m(x_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_m) & f_2(x_m) & \dots & f_m(x_m) \end{vmatrix} \quad (2.3.2)$$

имеет один и тот же знак для любых

$$a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_m \leq b.$$

Для определенности мы будем предполагать указанный определитель положительным.

Классическим примером чебышевской системы является система степенных функций

$$f_\alpha(x) = x^{\alpha-1} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, m).$$

Исследуем вопрос о числе точек плана при полиномиальной регрессии.

**Теорема 2.3.2** ([26], [27]). Пусть  $\eta(x, \theta) = \sum_{\alpha=1}^m \theta_\alpha x^{\alpha-1}$ .

Тогда  $D$ -оптимальный план сосредоточен в  $m$  точках, если выполняется одно из следующих условий:

1. Система функций  $1, \lambda(x), \lambda(x)x, \dots, \lambda(x)x^{2(m-1)}$  — чебышевская система функций на отрезке  $[a, b]$ ;

2.  $\lambda(x) = P^{-1}(x)$ , где  $P(x)$  — полином, положительный на  $[a, b]$ , и его  $(2m-1)$ -производная  $P^{(2m-1)}(x)$  не обращается в нуль на открытом интервале  $(a, b)$ ;

3.  $\lambda(x) = P^{-1}(x)$ , где  $P(x)$  — полином степени не выше  $2(m-1)$ , положительный на  $[a, b]$ .

Доказательство. По теореме 2.2.1 и ее следствию в точках  $D$ -оптимального плана

$$m - \lambda(x) d(x, \varepsilon^*) = 0, \quad (2.3.3)$$

а в остальных точках

$$m - \lambda(x) d(x, \varepsilon^*) \leq 0. \quad (2.3.4)$$

Дисперсионная матрица  $D(\varepsilon^*)$  — положительно определенная и, следовательно,

$$d(x, \varepsilon^*) = f^T(x) D(\varepsilon^*) f(x) = \sum_{\alpha=0}^{2(m-1)} a_{\alpha} x^{\alpha} > 0,$$

где

$$a_{\alpha} = \sum_{\beta+\gamma-2=\alpha} D_{\beta\gamma}(\varepsilon^*).$$

Очевидно, что число точек плана должно быть больше или равно  $m$ , иначе информационная матрица  $M(\varepsilon^*)$  будет особенной.

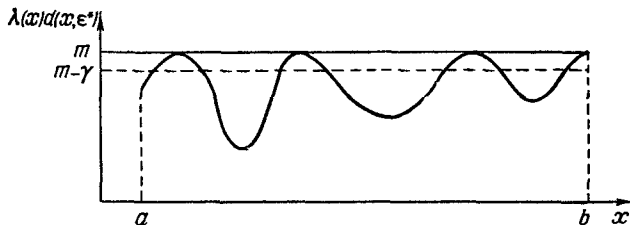


Рис. 6. Зависимость функции  $\lambda(x)d(x, \varepsilon^*)$  от  $x$  для  $D$ -оптимального плана.

Предположим, что  $D$ -оптимальный план состоит по крайней мере из  $(m+1)$ -й точки. Рассмотрим функцию

$$\Psi(x) = m - \gamma - \lambda(x) \sum_{\alpha=0}^{2(m-1)} a_{\alpha} x^{\alpha},$$

где  $\gamma$  — малое положительное число.

Если все точки плана находятся внутри  $[a, b]$ , то согласно (2.3.3) и (2.3.4) число различных корней функции  $\Psi(x)$  больше или равно  $2(m+1)$  (рис. 6). Если одна или две точки плана — крайние, то число различных корней будет соответственно не меньше  $2m+1$  или  $2m$ . Таким образом, число различных корней функции  $\Psi(x)$

$$n \geq 2m. \quad (2.3.5)$$

С другой стороны, справедливы следующие утверждения:

1. Если система функций  $\{1, \lambda(x), \lambda(x)x, \dots, \lambda(x)x^{2(m-1)}\} = \{\varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_{2m}(x)\}$  — чебышевская на  $[a, b]$ , то согласно определению 1 любой многочлен  $\sum_{i=1}^{2m} c_i \varphi_i(x)$  имеет на  $[a, b]$  не более  $2m-1$  различных корней.

2. Полином

$$(m-\gamma)P(x) - \sum_{\alpha=0}^{2(m-1)} a_{\alpha} x^{\alpha},$$

$$P(x) > 0,$$

согласно теореме Ролля [28] и условию 2 доказываемой теоремы имеет не более  $2m-1$  корней.

3. В данном случае функция

$$(m-\gamma)P(x) - \sum_{\alpha=0}^{2(m-1)} a_{\alpha} x^{\alpha},$$

$$P(x) > 0,$$

— полином порядка  $2(m-1)$  и, следовательно, имеет не более  $2(m-1)$  корней.

Каждое из доказанных утверждений противоречит (2.3.5). Отсюда следует, что число точек плана во всех трех случаях, указанных в условии теоремы, равно  $m$ .

Предельным переходом нетрудно показать, что при тех  $\lambda(x)$ , которые могут быть равномерно аппроксимированы функциями типа 2,  $D$ -оптимальные планы также состоят из  $m$  точек.

Существуют, однако, функции эффективности, при которых  $D$ -оптимальные планы для полиномиальной регрессии имеют число точек, большее  $m$ .

**Пример 2.** Рассмотрим линейную одномерную регрессию  $\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x$  на отрезке  $[-1, 1]$ . Функция эффективности изображена на рис. 7а.

Прежде всего отметим, что  $D$ -оптимальные планы  $\varepsilon^*$  должны иметь диагональную информационную матрицу. В противном случае, рассмотрев план

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \varepsilon^* + \frac{1}{2} \tilde{\varepsilon},$$

где  $\tilde{\varepsilon}$  является зеркальным отображением заданного плана  $\varepsilon^*$  относительно нуля и имеет, как нетрудно проверить, точно такой же определитель информационной

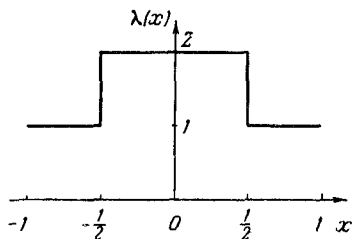


Рис. 7а. Функция эффективности.

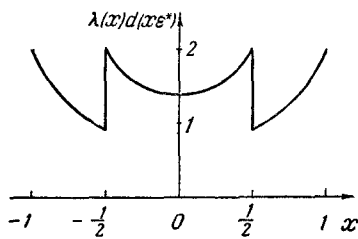


Рис. 7б. Зависимость  $\lambda(x)d(x, \varepsilon^*)$  от  $x$ .

В точках плана  $\lambda(x_i)d(x_i, \varepsilon^*) = 2$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ .

матрицы, мы согласно теореме 2.2.2 получим план лучший, чем исходный план, что противоречит предположению об оптимальности плана  $\varepsilon^*$ .

При диагональной матрице дисперсия оценки  $\hat{\eta}(x)$  имеет вид

$$d(x, \varepsilon) = M_{11}^{-1} + M_{22}^{-1}x^2.$$

Легко убедиться, что при заданной функции эффективности оптимальным является план

$$\varepsilon^* = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1; \quad x_2 = -\frac{1}{2}; \quad x_3 = \frac{1}{2}, \quad x_4 = 1 \\ p_1 = \frac{1}{4}; \quad p_2 = \frac{1}{4}; \quad p_3 = \frac{1}{4}; \quad p_4 = \frac{1}{4} \end{array} \right\}.$$

Кривая  $\lambda(x)d(x, \varepsilon^*)$  представлена на рис. 7б.

Теоремы 2.3.1 и 2.3.2 позволяют для многих практически важных случаев найти явное решение задачи



о  $D$ -оптимальных планах одномерной полиномиальной регрессии [26], [27].

Будем предполагать, что  $x$  может принадлежать одной из трех областей  $[-1; 1]$ ,  $[0, \infty]$  и  $[-\infty, \infty]$ . Все остальные случаи замкнутых областей могут быть сведены к одному из трех указанных случаев путем соответствующего сдвига начала координат и изменения масштаба.

**Теорема 2.3.3.** Пусть  $f_\alpha(x) = x^{\alpha-1}$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ) и пусть  $\lambda(x)$  будет одна из следующих функций эффективности:

- 1)  $\lambda(x) \equiv 1, \quad -1 \leq x \leq 1;$
- 2)  $\lambda(x) = (1-x)^{\alpha+1} (1+x)^{\beta+1}, \quad -1 \leq x \leq 1, \alpha > -1,$   
 $\beta > -1;$
- 3)  $\lambda(x) = e^{-x}, \quad 0 \leq x \leq \infty;$
- 4)  $\lambda(x) = x^{\alpha+1} e^{-x}, \quad 0 \leq x \leq \infty, \alpha > -1;$
- 5)  $\lambda(x) = e^{-x^2}, \quad -\infty \leq x \leq \infty.$

Тогда для каждого случая 1)–5)  $D$ -оптимальный план единствен и сосредоточен с равными весами  $p_i = m^{-1}$  в  $m$  точках, являющихся корнями полиномов:

- 1)  $(1-x^2) \dot{P}_{m-1}(x)$ , где  $\dot{P}_m(x)$  — первая производная  $m$ -го полинома Лежандра;
- 2)  $P_m^{(\alpha, \beta)}(x)$ , где  $P_m^{(\alpha, \beta)}(x)$  —  $m$ -й полином Якоби с параметрами  $\alpha, \beta$ ;
- 3)  $xL_{m-1}^{(1)}(x)$ ;
- 4)  $L_m^{(\alpha)}(x)$ , где  $L_m^{(\alpha)}(x)$  —  $m$ -й полином Лагерра с параметром  $\alpha$ ;
- 5)  $H_m(x)$ , где  $H_m(x)$  — полином Эрмита.

**Доказательство.** Все пять случаев доказываются совершенно аналогично. Рассмотрим случай 2). При этом мы будем следовать, в основном, [26] и [29], стр. 148.

Нетрудно видеть, что все точки  $D$ -оптимального плана будут внутренними относительно отрезка  $[-1, 1]$ . Действительно, величина

$$\lambda(x) d(x, \varepsilon) = (1-x)^{\alpha+1} (1+x)^{\beta+1} d(x, \varepsilon)$$

равна нулю при  $|x|=1$  ( $d(x, \varepsilon) < \infty$  при конечных  $x$ ), в то время как в точках  $D$ -оптимального плана  $\lambda(x) \times d(x, \varepsilon^*) = m$ . Следовательно, можно считать, что точки

искомого плана принадлежат отрезку  $[a, b]$ , причем

$$a = -1 + \gamma, \quad b = 1 - \gamma, \quad (2.3.6)$$

где  $\gamma$  — некоторое положительное число. Но на любом отрезке типа (2.3.6) система из  $2m$  функций

$$1, (1-x)^{\alpha+1}(1+x)^{\beta+1}, (1-x)^{\alpha+1}(1+x)^{\beta+1}x, \dots \\ \dots, (1-x)^{\alpha+1}(1+x)^{\beta+1}x^{2m-2}$$

является чебышевской и, следовательно, согласно теореме 2.3.2 любой  $D$ -оптимальный план для отрезка (2.3.6) (который, очевидно, совпадает с  $D$ -оптимальным планом для отрезка  $[-1, 1]$ ) состоит ровно из  $m$  точек. В этом случае (см. следствие теоремы 2.3.1) определитель информационной матрицы равен

$$|M(\varepsilon)| = \prod_{i=1}^m (1-x_i)^{\alpha+1}(1+x_i)^{\beta+1} \prod_{k,l=1,2,\dots,m} (x_k-x_l)^2,$$

а оптимальные затраты равны  $p_i = m^{-1}$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ ).

Для того чтобы имел место максимум величины

$$T = \prod_{i=1}^m (1-x_i)^{\alpha+1}(1+x_i)^{\beta+1} \prod_{k,l=1,2,\dots,m} (x_k-x_l)^2, \quad (2.3.7)$$

должны выполняться условия  $\frac{\partial \ln T}{\partial x_k} = 0$  или

$$2 \left\{ \frac{1}{x_k - x_e} + \dots + \frac{1}{x_k - x_{k-1}} + \frac{1}{x_k - x_{k+1}} + \dots + \frac{1}{x_k - x_m} \right\} + \\ + \frac{\alpha+1}{x_k-1} + \frac{\beta+1}{x_k+1} = 0. \quad (2.3.8)$$

Положим  $f(x) = (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_m)$ , тогда (2.3.8) примет вид

$$\frac{\ddot{f}(x_k)}{\dot{f}(x_k)} + \frac{\alpha+1}{x_k-1} + \frac{\beta+1}{x_k+1} = 0$$

или

$$(1-x_k^2) \ddot{f}(x_k) + [\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x_k] \dot{f}(x_k) = 0.$$

Последнее равенство говорит о том, что многочлен

$$(1-x^2) \ddot{f}(x) + [\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x] \dot{f}(x)$$

обращается в нуль в нулях многочлена  $f(x)$  и имеет

ту же степень, следовательно,

$$(1-x^2) \dot{f}(x) + [\beta - \alpha - (\alpha + \beta + 2)x] \dot{f}(x) = \text{const} \cdot f(x).$$

Сравнивая коэффициенты при  $x^m$ , мы найдем, что постоянный множитель равен  $-m(m + \alpha + \beta + 1)$ , и функция  $f(x)$  удовлетворяет дифференциальному уравнению:

$$(1-x^2) \ddot{f}(x) + [\beta - \alpha - (\beta + \alpha + 2)x] \dot{f}(x) + m(m + \alpha + \beta + 1)f(x) = 0. \quad (2.3.9)$$

Данное уравнение имеет решением полином Якоби  $P_m^{(\alpha, \beta)}(x)$ . Известно также [29], что уравнение (2.3.9) не имеет никакого другого линейно независимого от  $P_m^{(\alpha, \beta)}(x)$

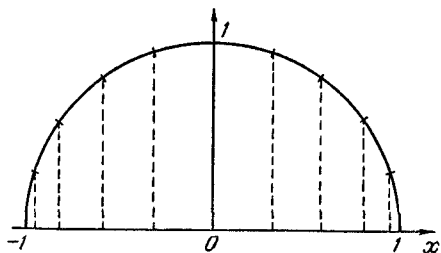


Рис. 8. Определение положения корней ортогональных многочленов при больших  $m$ .

решения, представимого в виде степенного многочлена. Таким образом, функция, удовлетворяющая (2.3.9) с точностью до постоянного множителя, единственна. Следовательно единствен и  $D$ -оптимальный план, расположенный в ее корнях.

Интересно отметить, что проблема максимизации функционала (2.3.7) была сравнительно давно решена в математической физике при исследовании некоторых плоских электростатических систем и тесно связана с теорией ортогональных многочленов.

При больших  $m$  можно говорить о плотности корней полиномов. Для многочленов  $(1-x^2) \dot{P}_{m-1}(x)$  и  $P_m^{(\alpha, \beta)}(x)$  справедливо следующее утверждение [29].

Пусть  $[a, b]$  есть часть отрезка  $[-1, +1]$  и пусть  $a = \cos \gamma$ ,  $b = \cos \delta$ ,  $\pi \leq \gamma \leq \delta \leq 0$ . Если  $N = N(m; a, b)$  означает число нулей многочлена  $(1-x^2) \dot{P}_{m-1}(x)$  или

$P_m^{(\alpha, \beta)}(x)$ , лежащих на отрезке  $[a, b]$ , то

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{N(m; a, b)}{m} = |\gamma - \delta|, \quad (2.3.10)$$

или, иными словами, плотность корней пропорциональна

$$\left| \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} \right|.$$

Результат (2.3.10) особенно нагляден в его графическом представлении (рис. 8). Таким образом, при высоких степенях полиномиальной регрессии «плотность» точек  $D$ -оптимальных планов для отрезка  $[-1, +1]$  подчиняется закону, отличному от равномерного.

Более подробную информацию о корнях рассматриваемых полиномов читатель может получить в [29]—[31].

**Пример 3.** Сравним характеристики  $D$ -оптимальных планов  $\varepsilon^*$  и планов  $\varepsilon$  с равномерными спектрами для полиномов второй и третьей степени при  $\lambda(x) \equiv 1$ . Несложные расчеты показывают, что отношение определителей информационных матриц  $|M(\varepsilon^*)|$  и  $|M(\varepsilon)|$  равно  $\sim 3$  для полинома второй степени и  $\sim 2,8$  для полинома третьей степени. В равномерном плане (одном и том же в обоих случаях) число точек выбрано равным 11. Кривые  $d(x, \varepsilon^*)$  и  $d(x, \varepsilon)$  представлены на рис. 9.

**Пример 4.** В тех случаях, когда регрессионная кривая

$\eta(x, \theta)$  является полиномом высокой степени, для приближенного определения спектра оптимального плана можно воспользоваться формулой (2.3.10).

Точки спектра при этом можно отыскать, опираясь на (2.3.10) (см. рис. 8).

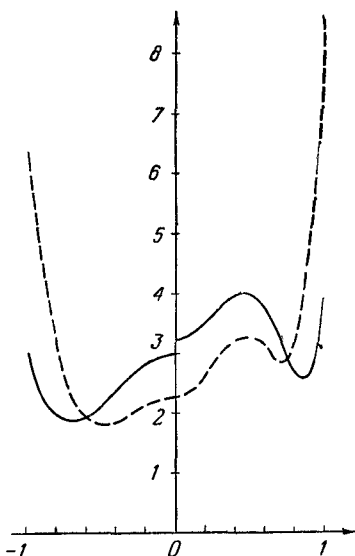


Рис. 9. Левая часть рисунка соответствует квадратичной регрессии, правая — кубической. Сплошная линия соответствует дисперсии оценки кривой при  $D$ -оптимальном плане, пунктирная — при плане с равномерным спектром.

На рис. 10 представлены зависимости дисперсии  $d(x, \varepsilon)$  кривой  $\hat{\eta}(x)$ , где  $\eta(x, \theta)$  — полином десятой степени ( $m=11$ ), для равномерного плана, состоящего из 11 точек, и приближенного  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon_n^*$ .

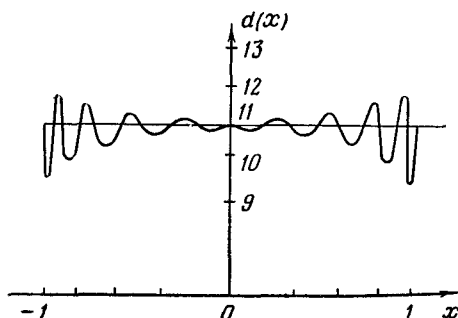


Рис. 10а. Дисперсия кривой  $\hat{\eta}(x)$  для приближенного  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon_n^*$ .

$\eta(x)$  — полином десятой степени. Вертикал: ными черточками обозначены точки спектра плана  $\varepsilon_n^*$ .

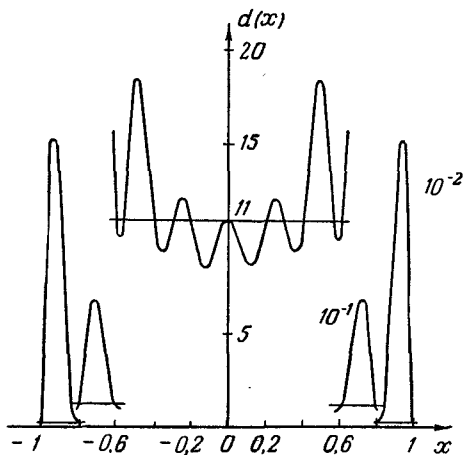


Рис. 10б. То же, что и на рис. 10а, для равномерного плана.

Заметим, что  $\max_x d(x, \varepsilon_n^*)$  лишь незначительно превышает  $\max_x d(x, \varepsilon^*) = 11$ .

## § 2.4. Тригонометрическая регрессия на отрезке

I. Рассмотрим регрессионную функцию, являющуюся тригонометрической суммой порядка  $k$ :

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \sum_{\alpha=1}^k [\theta_\alpha \cos \alpha x + \omega_\alpha \sin \alpha x]. \quad (2.4.1)$$

Область изменения  $x$  выберем равной  $[0, 2\pi]$ , функцию эффективности  $\lambda(x)$  будем предполагать постоянной в этой области. Выше было доказано, что все  $D$ -оптимальные планы имеют одну и ту же информационную матрицу  $M^*$ . Если будет найден некоторый (возможно, с очень большим числом точек)  $D$ -оптимальный план, то все остальные оптимальные планы (если таковые существуют) можно найти, решая систему уравнений

$$\sum_{i=1}^n p_i f_\alpha(x_i) f_\beta(x_i) = M_{\alpha\beta}^* \quad (1 \leq \alpha \leq \beta \leq k); \quad (2.4.2)$$

$$\lambda(x_i) f^T(x_i) M^{*-1} f(x_i) = m = 2k + 1 \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

Нетрудно проверить, что система (2.4.2) достаточна для определения спектра плана и весов  $p_i$  при  $n \leq \frac{m(m+1)}{2}$ .

Подобный путь, несмотря на свой полуинтуитивный характер, иногда удобен для построения  $D$ -оптимальных планов. Именно этот путь будет использован в настоящем параграфе.

II. Так как система функций

$$f^T(x) = \|1, \sin x, \cos x, \dots, \sin kx, \cos kx\|$$

ортогональна на отрезке  $[0, 2\pi]$ , то план  $e_c$  с плотностью распределения затрат  $p(x) = (2\pi)^{-1}$  будет иметь диагональную информационную матрицу

$$M_{11} = 1;$$

$$M_{\alpha\alpha} = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} f_\alpha(x) f_\alpha(x) dx = \frac{1}{2}, \quad \alpha > 1;$$

$$M_{\alpha\beta} = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} f_\alpha(x) f_\beta(x) dx = 0, \quad \alpha \neq \beta.$$

Напомним, что

$$\int_0^{2\pi} \sin kx \cdot \cos mx \cdot dx = 0, \quad k \neq m;$$

$$\int_0^{2\pi} \sin^2 kx \, dx = \pi;$$

$$\int_0^{2\pi} \cos^2 kx \, dx = \pi.$$

Вычислим дисперсию  $d(x, \varepsilon_c)$ :

$$D_{11} = M_{11}^{-1} = 1; \quad D_{\alpha\alpha} = M_{\alpha\alpha}^{-1} = 2; \quad \alpha > 1;$$

$$d(x, \varepsilon_c) = 1 + 2 \sum_{\alpha=1}^m f_{\alpha}^2(x) = 1 + 2 \sin^2 x + 2 \cos^2 x + \dots +$$

$$+ 2 \sin^2 kx + 2 \cos^2 kx \equiv 2k + 1 \equiv m.$$

Отсюда и из теоремы эквивалентности следует, что план с равномерной плотностью распределения затрат является  $D$ -оптимальным в случае тригонометрической регрессии с  $\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1$ . Замечателен тот факт, что дисперсия регрессионной кривой одна и та же для любой точки, принадлежащей отрезку  $[0, 2\pi]$ .

Поставим перед собой задачу найти план или планы с небольшим числом точек, в которых необходимо производить измерения. Согласно (2.4.2) координаты точек плана  $x_i$  и веса  $p_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) должны быть таковы, чтобы имели место уравнения:

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1;$$

$$\sum_{i=1}^n p_i f_{\alpha}^2(x_i) = \frac{1}{2}, \quad \alpha > 1; \quad (2.4.3)$$

$$\sum_{i=1}^n p_i f_{\alpha}(x_i) f_{\beta}(x_i) = 0, \quad \alpha \neq \beta.$$

Здесь не выписаны последние  $n$  уравнений системы (2.4.2). В данном случае из этих уравнений извлечь какую-либо информацию о  $D$ -оптимальном плане не удастся, так как они выполняются тождественно для любого  $x$ .

Нетрудно проверить, что при равных весах  $p_i = n^{-1}$  и

$$x_i = 2\pi \frac{i-1}{n}, \quad i=1, 2, \dots, n; \quad n \geq 2k+1$$

уравнения (2.4.3) выполняются и, следовательно, соответствующий план является  $D$ -оптимальным.

Предложенное расположение точек плана является далеко не единственным оптимальным расположением точек. Так, например, при равных весах и

$$x_i = 2\pi \frac{i-1}{n} + \varphi, \quad i=1, 2, \dots, n; \quad n \geq 2k+1,$$

планы являются также  $D$ -оптимальными.

Таким образом, в случае тригонометрической регрессии любой план с равномерным спектром, содержащим не менее  $2k+1$  точек, и равномерным распределением затрат является  $D$ -оптимальным. Случай  $n=2k+2$  был впервые рассмотрен в [32].

III. Рассмотрим регрессионную функцию

$$\eta(x, \theta) = \theta_0 + \sum_{\alpha=1}^{k-1} [\theta_\alpha \cos \alpha x + \omega_\alpha \sin \alpha x]. \quad (2.4.4)$$

Пусть план

$$\varepsilon_k^* = \{x_i, p_i \quad (i=1, 2, \dots, n)\}$$

$D$ -оптимален для тригонометрической регрессии (2.4.1) порядка  $k$ . Тогда из (2.4.3) следует:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n p_i &= 1; \\ \sum_{i=1}^n p_i f_\alpha(x_i) &= \frac{1}{2}, \quad \alpha > 1; \\ \sum_{i=1}^n p_i f_\alpha(x_i) f_\beta(x_i) &= 0, \quad \alpha \neq \beta; \\ \alpha, \beta &\leq m-2 = 2k-1. \end{aligned}$$

Отсюда и из определения информационной матрицы для тригонометрической регрессии (2.4.4) порядка  $k-1$  имеем

$$D_{11} = M_{11}^{-1} = 1; \quad D_{\alpha\alpha} = M_{\alpha\alpha}^{-1} = 2; \quad 1 < \alpha \leq 2k-1.$$



Таким образом, при  $\epsilon_{k-1}^* = \epsilon_k^*$

$$d(x, \epsilon_{k-1}^*) = 1 + 2 \cos^2 x + 2 \sin^2 x + \dots + \\ + 2 \cos^2 (k-1)x + 2 \sin^2 (k-1)x = 2k - 1.$$

Из последнего равенства вытекает, что план,  $D$ -оптимальный для тригонометрической регрессии  $k$ -порядка, является  $D$ -оптимальным и для тригонометрической регрессии порядка  $k-1$ , и следовательно, для любой тригонометрической регрессии порядка не более  $k$ .

## § 2.5. Численные методы построения $D$ -оптимальных планов

1. Явное решение задач на построение  $D$ -оптимальных планов оказывается возможным лишь в простейших случаях (см. §§ 2.2—2.4) и требует в каждом отдельном случае специального подхода. В литературе по планированию  $D$ -оптимальных экспериментов предложено довольно много оптимальных планов для конкретных функций. Подробное описание этих планов с соответствующими литературными ссылками можно найти в [4]. Практически все изложенные в [4] оптимальные планы строятся на основании полуинтуитивных соображений (например, из соображений симметрии расположения точек плана, ортогональности функций  $f_\alpha(x)$  на точках плана и т. д.; см. также предыдущие параграфы). Полученные таким образом планы проверяются затем по теореме эквивалентности на  $D$ -оптимальность. Подобные методы оказываются плодотворными, когда области  $X$  возможных значений контролируемых переменных  $x$  представляют собой простые геометрические фигуры, например, шар или куб, в пространстве контролируемых переменных, а функция эффективности  $\lambda(x)$  постоянна на  $X$ . Естественно, что в более сложных ситуациях эти методы вряд ли окажутся полезными. Так же как и во многих других математических проблемах, усложнение вида изучаемых функционалов (здесь это  $\eta(x, \theta)$ ,  $\lambda(x)$ ,  $|M(\epsilon)|$ ,  $d(x, \epsilon)$ ) заставляет обратиться к численным методам поиска решений. Одним из простейших с идейной точки зрения явился бы прямой поиск максимума определителя  $|M(\epsilon)|$ . Математический

аппарат численного поиска условного экстремума некоторой функции

$$\mathcal{L}(x_1, x_2, \dots, x_n; p_1, p_2, \dots, p_n) = |\mathbf{M}(\varepsilon)|, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad (2.5.1)$$

в настоящее время достаточно хорошо развит и широко применяется при решении многих задач (см., например, [22], [24], [33]—[35]), имеется много программ для электронно-вычислительных машин, реализующих различные методы (например, метод случайного поиска, всевозможные модификации градиентного метода, метод оврагов и т. д.). Однако эти методы при решении экстремальной задачи (2.5.1) сравнительно быстро себя исчерпывают, так как количество переменных, по которым необходимо вести поиск экстремума, очень быстро растет с ростом числа оцениваемых параметров  $m$ . Легко подсчитать (см. теорему 2.2.3), что размерность пространства варьируемых переменных для экстремальной задачи по поиску  $D$ -оптимального плана может быть заключена в пределах:

$$(k+1)m \leq N \leq (k+1) \frac{(m+1)m}{2},$$

где  $k$  — размерность пространства контролируемых переменных  $x$ . Практика показывает, что для средних электронно-вычислительных машин (например, типа М-20) верхняя граница  $N$  — где-то в пределах  $10 \div 30$  (в значительной степени эта граница зависит от вида функционала, экстремум которого ищется).

Подобная ограниченность существующих методов заставляет обратиться к построению специального численного метода построения  $D$ -оптимальных планов. Очевидно, что построить метод, значительно превышающий по своим показателям обычные, можно лишь опираясь на конкретные свойства исследуемых функционалов [36].

II. Основная идея, используемая при построении такого метода, заключается в следующем.

Как было показано в § 2.2,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_1)| &= \\ &= \text{Sp} [(1-\alpha)\mathbf{M}(\varepsilon_0) + \alpha\mathbf{M}(\varepsilon(x))]^{-1} \cdot [\mathbf{M}(\varepsilon(x)) - \mathbf{M}(\varepsilon)], \quad (2.5.2) \end{aligned}$$

где  $\varepsilon_1 = (1 - \alpha)\varepsilon_0 + \alpha\varepsilon(x)$ ,  $\mathbf{M}(\varepsilon_0)$  — информационная матрица некоторого невырожденного плана  $\varepsilon_0$ ,  $\mathbf{M}(\varepsilon(x))$  — информационная матрица плана  $\varepsilon(x)$ , состоящего из одной точки  $x$ . При  $\alpha = 0$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_1)| \Big|_{\alpha=0} = \lambda(x) d(x, \varepsilon_0) - m$$

или, при достаточно малых  $\alpha$ ,

$$\ln |\mathbf{M}(\varepsilon_1)| \cong \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_0)| + \alpha [\lambda(x) d(x, \varepsilon_0) - m]. \quad (2.5.3)$$

В силу теоремы 2.2.1

$$\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \varepsilon_0) - m = \delta \geq 0, \quad (2.5.4)$$

причем равенство имеет место, если только план  $\varepsilon_0$   $D$ -оптимален.

Пусть план  $\varepsilon_0$  не является  $D$ -оптимальным. Помещая часть затрат в точку  $x_0$ , соответствующую  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \varepsilon_0)$ ,

получим при малом  $\alpha_0$

$$\ln |\mathbf{M}(\varepsilon_1)| \cong \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_0)| + \alpha_0 \delta > \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_0)|. \quad (2.5.5)$$

Неравенство (2.5.5) говорит о том, что план  $\varepsilon_1 = (1 - \alpha_0) \times \varepsilon_0 + \alpha_0 \varepsilon(x)$  с информационной матрицей  $\mathbf{M}(\varepsilon_1)$  лучше, чем план  $\varepsilon_0$ , т. е. определитель  $|\mathbf{M}(\varepsilon_1)| > |\mathbf{M}(\varepsilon_0)|$ .

Построив план  $\varepsilon_1$ , найдем точку  $x_1$ , соответствующую  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \varepsilon_1)$ . Помещая малую часть затрат  $\alpha_1$  в эту точку, мы построим план лучший, чем план  $\varepsilon_1$ . Продолжая эту процедуру, мы получим последовательность матриц  $\mathbf{M}(\varepsilon_0), \mathbf{M}(\varepsilon_1), \dots, \mathbf{M}(\varepsilon_s)$  таких, что

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_0)| < |\mathbf{M}(\varepsilon_1)| \leq \dots \leq |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|. \quad (2.5.6)$$

Последовательность (2.5.6) ограничена сверху:

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_s)| \leq |\mathbf{M}(\varepsilon^*)|,$$

где  $\varepsilon^*$  —  $D$ -оптимальный план. Поэтому при подходящем выборе  $\alpha_s$  она сойдется к  $|\mathbf{M}(\varepsilon^*)|$  ( $\alpha_s$  должно при  $s \rightarrow \infty$  стремиться к нулю, но не слишком быстро, иначе последовательность  $\{|\mathbf{M}(\varepsilon_s)|\}$  может сойтись, не достигнув своей верхней границы).

III. Доведем грубый набросок численного метода построения  $D$ -оптимальных планов, изложенный в преды-

дущем пункте, до конкретной итерационной процедуры и докажем ее сходимость.

Прежде всего обобщим формулу (2.5.3) на случай произвольного  $\alpha$ , заключенного в интервале  $(0, 1)$ .

**Лемма 2.5.1.** Пусть  $M$  — невырожденная матрица  $m \times m$ , а  $F$  — матрица  $m \times k$ , тогда

$$|M + FF^T| = |M| \cdot |I_k + F^T M^{-1} F|. \quad (2.5.7)$$

**Доказательство.** Известно (см. теорему 1.1.3), что

$$\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = |A| \cdot |D - CA^{-1}B| = |A - BD^{-1}C| \cdot |D|.$$

Полагая  $A = M$ ,  $B = F$ ,  $C = -F^T$ ,  $D = I_k$ , получим необходимый результат:

$$|M + FF^T| = |M| \cdot |I_k + F^T M^{-1} F|.$$

**Теорема 2.5.1.** Пусть  $M(\varepsilon_s)$  — информационная матрица невырожденного плана  $\varepsilon_s$  и  $M(\varepsilon(\mathbf{x}))$  — информационная матрица плана, сосредоточенного в единственной точке  $\mathbf{x}$ . Тогда определитель информационной матрицы линейной комбинации этих планов  $\varepsilon_{s+1} = (1 - \alpha)\varepsilon_s + \alpha\varepsilon(\mathbf{x})$  равен

$$|M(\varepsilon_{s+1})| = (1 - \alpha)^m \left[ 1 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) \right] \cdot |M(\varepsilon_s)|. \quad (2.5.8)$$

**Доказательство.** Согласно определению

$$\begin{aligned} M(\varepsilon_{s+1}) &= (1 - \alpha) M(\varepsilon_s) + \alpha \lambda(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) f^T(\mathbf{x}) = \\ &= (1 - \alpha) \left[ M(\varepsilon_s) + \frac{\alpha}{1 - \alpha} \lambda(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) f^T(\mathbf{x}) \right]. \end{aligned}$$

Положив в (2.5.7)  $F = \left[ \frac{\alpha \lambda(\mathbf{x})}{1 - \alpha} \right]^{1/2} \cdot f(\mathbf{x})$ , получим

$$|M(\varepsilon_{s+1})| = (1 - \alpha)^m \left[ 1 + \frac{\alpha \lambda(\mathbf{x})}{1 - \alpha} f^T(\mathbf{x}) M^{-1}(\varepsilon_s) f(\mathbf{x}) \right] \cdot |M(\varepsilon_s)|.$$

Последнее равенство совпадает с (2.5.8), если учесть, что

$$f^T(\mathbf{x}) M^{-1}(\varepsilon_s) f(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x}, \varepsilon_s).$$

Из (2.5.8) нетрудно видеть, что величина определителя информационной матрицы построенного плана  $\varepsilon_{s+1}$  зависит как от величины  $\alpha$ , так и от координаты точки, в которой сосредоточен план  $\varepsilon(\mathbf{x})$ . Покажем, что

всегда найдется такая точка  $\mathbf{x}$  и такое  $\alpha$ , для которых  $|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| > |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|$ , если план  $\varepsilon_s$  не  $D$ -оптимален.

**Теорема 2.5.2.** *Наибольшее возможное значение определителя  $|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})|$  при заданном  $\varepsilon_s$  равно*

$$\max_{\mathbf{x}, \alpha} |\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| = \left[ \frac{\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s)}{m} \right]^m \times \left[ \frac{m-1}{\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - 1} \right]^{m-1} |\mathbf{M}(\varepsilon_s)| > |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|, \quad (2.5.9)$$

где  $\mathbf{x}_s$  есть решение уравнения

$$\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) = \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s).$$

**Доказательство.** Из (2.5.8) легко видеть, что при любом  $\alpha$  определитель  $|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})|$  является возрастающей функцией  $\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$ . Отсюда с очевидностью следует, что план  $\varepsilon(\mathbf{x})$  должен быть сосредоточен в точке  $\mathbf{x}$ , соответствующей  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$ . Поэтому

$\max_{\mathbf{x}, \alpha} |\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})|$  будет иметь место при  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_s$  и  $\alpha$ , удовлетворяющих уравнению:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| = \frac{\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - 1}{1 - \alpha + \alpha \lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s)} - \frac{m-1}{1-\alpha} = 0. \quad (2.5.10)$$

Решением (2.5.10) является

$$\alpha_s = \frac{\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m}{[\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - 1] m}. \quad (2.5.11)$$

Так как план  $\varepsilon_s$  по предположению не  $D$ -оптимален, то по теореме 2.2.1

$$\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m = \max_{\mathbf{x} \in X} [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - m] > 0,$$

и следовательно,  $\alpha_s > 0$ .

С другой стороны, непосредственным дифференцированием легко проверить, что

$$\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| \Big|_{\substack{\alpha = \alpha_s \\ \mathbf{x} = \mathbf{x}_s}} < 0$$

и  $\alpha_s$ , таким образом, соответствует максимуму  $\ln |\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})|$ , причем

$$\max_{\mathbf{x}, \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| > \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|. \quad (2.5.12)$$

Подставив в (2.5.8)  $\alpha_s$ , определяемое формулой (2.5.11), после несложных преобразований получим

$$|M(\varepsilon_{s+1})| \Big|_{\substack{\alpha=\alpha_s \\ x=x_s}} = \\ = \left[ \frac{\lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s)}{m} \right]^m \left[ \frac{m-1}{\lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s) - 1} \right]^{m-1} |M(\varepsilon_s)|. \quad (2.5.13)$$

Объединяя (2.5.12) и (2.5.13), мы убеждаемся в справедливости доказываемой теоремы.

Рассмотрим следующую итерационную процедуру.

Задается некоторый невырожденный план  $\varepsilon_0$  (начальное приближение)

$$\varepsilon_0 = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1, & x_2, & \dots, & x_n \\ p_1, & p_2, & \dots, & p_n \end{array} \right\}, \quad n \geq m.$$

1. Подсчитывается его информационная матрица

$$M(\varepsilon_0) = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i)$$

и обратная ей дисперсионная матрица  $D(\varepsilon_0)$ .

2. Находится точка  $x_0$ , в которой имеет место

$$\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \varepsilon_0)$$

и соответствующее значение  $\lambda(x_0) d(x_0, \varepsilon_0)$ .

3. Составляется план

$$\varepsilon_1 = (1 - \alpha_0) \varepsilon_0 + \alpha_0 \varepsilon(x_0),$$

или, более подробно:

$$\varepsilon_1 = \left\{ \begin{array}{cccccc} x_1, & x_2, & \dots, & x_n, & x_0 \\ (1 - \alpha_0) p_1, & (1 - \alpha_0) p_2, & \dots, & (1 - \alpha_0) p_n, & \alpha_0 \end{array} \right\}.$$

«Шаг»  $\alpha_0$  выбирается таким образом, чтобы увеличение определителя информационной матрицы было максимальным, т. е. (см. теорему 2.5.2):

$$\alpha_0 = \frac{\delta_0}{[\delta_0 + m - 1] m},$$

где

$$\delta_0 = \lambda(x_0) d(x_0, \varepsilon_0) - m.$$

4. Подсчитывается информационная матрица  $\mathbf{M}(\varepsilon_1)$  плана  $\varepsilon_1$  и обратная ей матрица  $\mathbf{D}(\varepsilon_1)$ .

После того как найдена матрица  $\mathbf{D}(\varepsilon_1)$ , операции 2÷4 повторяются с заменой  $\varepsilon_0$  на  $\varepsilon_1$ , затем эти же операции повторяются с  $\varepsilon_2, \varepsilon_3$  и т. д.

Покажем, что предложенная итерационная процедура сходится и что предельный план  $\tilde{\varepsilon}$  совпадает с одним из  $D$ -оптимальных планов.

**Теорема 2.5.3.** Пусть выполняются условия теоремы эквивалентности, тогда итерационный процесс 1÷4 сходится, причем

$$\lim_{s \rightarrow \infty} |\mathbf{M}(\varepsilon_s)| = |\mathbf{M}(\varepsilon^*)|,$$

где  $\mathbf{M}(\varepsilon^*)$  — информационная матрица, соответствующая  $D$ -оптимальному плану.

**Доказательство.** Пусть план  $\varepsilon_0$  не  $D$ -оптимален. Тогда в силу теоремы 2.5.2 и определения  $D$ -оптимального плана

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_0)| < |\mathbf{M}(\varepsilon_1)| \leq \dots \leq |\mathbf{M}(\varepsilon_s)| \leq |\mathbf{M}(\varepsilon^*)| < \infty.$$

Но, как известно, любая ограниченная монотонно неубывающая последовательность сходится. Следовательно, последовательность  $|\mathbf{M}(\varepsilon_0)|, |\mathbf{M}(\varepsilon_1)|, \dots, |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|$  сходится к некоторому пределу  $|\mathbf{M}(\tilde{\varepsilon})|$ . Поэтому для доказательства теоремы достаточно доказать, что

$$|\mathbf{M}(\tilde{\varepsilon})| = |\mathbf{M}(\varepsilon^*)|.$$

Предположим противное:

$$|\mathbf{M}(\tilde{\varepsilon})| < |\mathbf{M}(\varepsilon^*)|. \quad (2.5.14)$$

В силу сходимости последовательности  $|\mathbf{M}(\varepsilon_0)|, |\mathbf{M}(\varepsilon_1)|, \dots, |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|$  для любого малого положительного числа  $\gamma$  найдется такое  $\bar{s}$ , что для любого  $s \geq \bar{s}$  справедливо неравенство

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| - |\mathbf{M}(\varepsilon_s)| \leq \gamma$$

или согласно теореме 2.5.2

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_s)| \cdot \left[ \left( \frac{\delta_s + m}{m} \right)^m \left( \frac{m-1}{\delta_s + m - 1} \right)^{m-1} - 1 \right] \leq \gamma. \quad (2.5.15)$$

Последнее неравенство можно переписать в виде

$$\Psi(\delta_s) = \left(\frac{\delta_s + m}{m}\right)^m \left(\frac{m-1}{\delta_s + m-1}\right)^{m-1} < 1 + \gamma_1,$$

где

$$\gamma_1 = |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|^{-1} \cdot \gamma.$$

Функция  $\Psi(\delta_s)$  является при  $\delta_s > 0$  возрастающей, следовательно, для любого  $\Delta > 0$  найдется такое  $\gamma$ , что

$$\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m = \delta_s \leq \Delta.$$

Таким образом, мы всегда сможем указать такое  $\bar{s}(\Delta)$ , что  $\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m$  будет меньше любого наперед заданного положительного числа  $\Delta$ . Но согласно предположению (2.5.14) и теореме эквивалентности 2.2.2 для любого  $s$

$$\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m \geq \xi > 0.$$

Выбрав  $\Delta < \xi$ , мы приходим к противоречию, доказывающему нашу теорему.

**IV.** Рассматриваемый итерационный процесс можно оканчивать, если выполняется одно из требований:

$$\begin{aligned} \alpha_s &< \gamma_1; \\ \frac{|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| - |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|}{|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})|} &< \gamma_2; \\ m^{-1} \left[ \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m \right] &< \gamma_3. \end{aligned} \quad (2.5.16)$$

Так как информационная матрица одна и та же для всех  $D$ -оптимальных планов данной регрессионной задачи, то все левые части выписанных выше неравенств однозначно связаны друг с другом. Поэтому все три правила окончания счета практически эквивалентны и выбор какого-либо из них обусловлен конкретными особенностями программы, по которой ведется счет.

**Пример.** На рис. 11а нанесены значения  $|\mathbf{D}(\varepsilon_s)|$ , соответствующие нескольким первым итерациям при построении оптимального плана для регрессионной задачи

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{x}, \theta) &= \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2; \\ \lambda(x) &= (1-x)^2, \quad -1 \leq x \leq 1. \end{aligned}$$



На рис. 116 нанесены графики функций  $\lambda(x) d(x, \varepsilon_s)$  для некоторой выборки из тех же итераций.

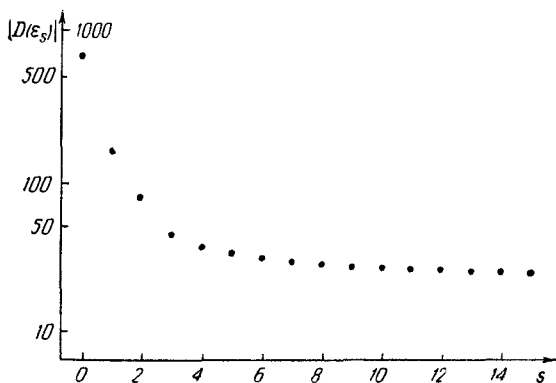


Рис. 11а. Значение определителя  $|D(\varepsilon_s)|$ .

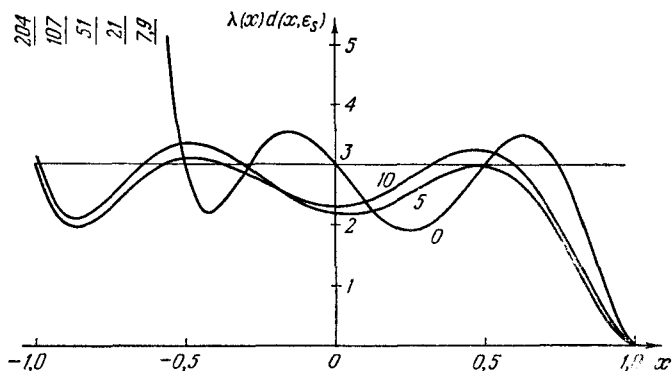


Рис. 11б. Изменение вида функции  $\lambda(x) d(x, \varepsilon_s)$  с увеличением  $s$ . Цифры около каждой кривой означают номер итерации.

В качестве начального плана был взят план

$$\varepsilon_0 = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -\frac{1}{2}, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = \frac{1}{2} \\ p_1 = \frac{1}{3}, \quad p_2 = \frac{1}{3}, \quad p_3 = \frac{1}{3} \end{array} \right\}.$$

Максимальные значения функции  $\lambda(x) d(x, \varepsilon_s)$  отыскивались методом сетки с шагом  $\Delta x = 0,02$ .

## § 2.6. Некоторые особенности итерационной процедуры построения $D$ -оптимальных планов

1. Наиболее трудоемкими операциями в предложенной итерационной процедуре являются обращения информационной матрицы (ее размеры  $m \times m$ , где  $m$  — число неизвестных параметров) и поиск максимального значения произведения  $\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$  в  $k$ -мерной замкнутой области  $X$ .

Оказывается, что операцию обращения матрицы можно заменить значительно более простыми операциями.

**Лемма 2.6.1.**

$$(\mathbf{I}_p + \mathbf{A}\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{I}_p - \mathbf{A}(\mathbf{I}_q + \mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{B}, \quad (2.6.1)$$

где  $\mathbf{I}_p$  и  $\mathbf{I}_q$  — единичные матрицы размера  $p \times p$  и  $q \times q$ ,  $\mathbf{A}$  — матрица  $p \times q$ ,  $\mathbf{B}$  — матрица  $q \times p$ .

*Доказательство.* Умножив обе части (2.6.1) справа на матрицу  $\mathbf{I}_p + \mathbf{A}\mathbf{B}$ , получим

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_p &= \mathbf{I}_p(\mathbf{I}_p + \mathbf{A}\mathbf{B}) - \mathbf{A}(\mathbf{I}_q + \mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{I}_p + \mathbf{A}\mathbf{B}) = \\ &= \mathbf{I}_p + \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{A}(\mathbf{I}_q + \mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}(\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}) = \\ &= \mathbf{I}_p + \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{A}(\mathbf{I}_q + \mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}(\mathbf{I}_q + \mathbf{B}\mathbf{A})\mathbf{B} = \\ &= \mathbf{I}_p + \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{I}_p. \end{aligned}$$

**Теорема 2.6.1.** Пусть  $\varepsilon_{s+1}$  является линейной комбинацией невырожденного плана  $\varepsilon_s$  и плана  $\varepsilon(x)$ , сосредоточенного в одной точке  $x$ :  $\varepsilon_{s+1} = (1 - \alpha)\varepsilon_s + \alpha\varepsilon(x)$ . Тогда:

1. Дисперсионная матрица  $\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})$  плана  $\varepsilon_{s+1}$  связана с дисперсионной матрицей  $\mathbf{D}(\varepsilon_s)$  плана  $\varepsilon_s$  соотношением

$$\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1}) = (1 - \alpha)^{-1} \left[ \mathbf{I}_m - \frac{\alpha\lambda(x)\mathbf{D}(\varepsilon_s)\mathbf{f}(x)\mathbf{f}^T(x)}{1 - \alpha + \alpha\lambda(x)d(x, \varepsilon_s)} \right] \mathbf{D}(\varepsilon_s). \quad (2.6.2)$$

2. Дисперсия оценки поверхности отклика в точке  $\tilde{x}$  для плана  $\varepsilon_{s+1}$  выражается через дисперсию оценки поверхности отклика в той же точке для плана  $\varepsilon_s$  следующим образом:

$$d(\tilde{x}, \varepsilon_{s+1}) = (1 - \alpha)^{-1} \left[ d(\tilde{x}, \varepsilon_s) - \frac{\alpha\lambda(x)d^2(x, \tilde{x}, \varepsilon_s)}{1 - \alpha + \alpha\lambda(x)d(x, \varepsilon_s)} \right]. \quad (2.6.3)$$

*Доказательство.* 1. Согласно определению

$$\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1}) = (1 - \alpha)\mathbf{M}(\varepsilon_s) + \alpha\mathbf{M}(\varepsilon(x))$$

или

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon_{s+1}) &= [(1-\alpha)\mathbf{M}(\varepsilon_s) + \alpha\mathbf{M}(\varepsilon(\mathbf{x}))]^{-1} = \\ &= (1-\alpha)^{-1} \left[ \mathbf{I}_m + \frac{\alpha}{1-\alpha} \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon_s) \mathbf{M}(\varepsilon(\mathbf{x})) \right]^{-1} \cdot \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon_s). \end{aligned}$$

Учитывая, что  $\mathbf{D}(\varepsilon_s) = \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon_s)$  и  $\mathbf{M}(\varepsilon(\mathbf{x})) = \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})$ , перепишем данное выражение в виде

$$\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1}) = (1-\alpha)^{-1} \left[ \mathbf{I}_m + \frac{\alpha\lambda(\mathbf{x}_s)}{1-\alpha} \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \right]^{-1} \mathbf{D}(\varepsilon_s). \quad (2.6.4)$$

Положим

$$\frac{\alpha\lambda(\mathbf{x}_s)}{1-\alpha} \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \text{ и } \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) = \mathbf{B}$$

и воспользуемся леммой 2.6.1:

$$\begin{aligned} &\left[ \mathbf{I}_m + \frac{\alpha\lambda(\mathbf{x}_s)}{1-\alpha} \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \right]^{-1} = \\ &= \mathbf{I}_m - \frac{\alpha\lambda(\mathbf{x}_s)}{1-\alpha} \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \left[ 1 + \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \frac{\alpha\lambda(\mathbf{x}_s)}{1-\alpha} \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \right]^{-1} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.6.5)$$

Так как  $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$ , и следовательно, выражение в скобках правой части (2.6.5) есть скалярная величина, то

$$\left[ \mathbf{I}_m + \frac{\alpha\lambda(\mathbf{x})}{1-\alpha} \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \right]^{-1} = \mathbf{I}_m - \frac{\alpha\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})}{1-\alpha + \alpha\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)}.$$

Отсюда и из (2.6.4) следует справедливость равенства (2.6.2).

2. Умножим (2.6.2) слева и справа соответственно на  $\mathbf{f}^T(\tilde{\mathbf{x}})$  и  $\mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}})$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^T(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{D}(\varepsilon_{s+1}) \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}}) &= (1-\alpha)^{-1} \left[ \mathbf{f}^T(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}}) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\alpha\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}})}{1-\alpha + \alpha\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)} \right]. \end{aligned} \quad (2.6.6)$$

Воспользовавшись тем, что  $d(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}, \varepsilon_s) = \mathbf{f}^T(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}})$  (заметим, что величина  $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}, \varepsilon_s)$  есть ковариация оценок поверхности отклика в точках  $\mathbf{x}$  и  $\tilde{\mathbf{x}}$  соответственно), нетрудно представить (2.6.6) в виде (2.6.3).

Формулы (2.6.2) и (2.6.3) позволяют избежать обращения информационных матриц  $M(\varepsilon_s)$ , за исключением нулевой итерации. При большом числе неизвестных параметров это существенно сокращает объем вычислений. В то же время точность определения элементов дисперсионной матрицы и дисперсия повышается. Повышение точности объясняется тем, что операции умножения, необходимые при обращении матрицы, заменяются операциями сложения. Таким образом, первый и второй этапы каждой итерации рекомендуется проводить с использованием соответственно формул (2.6.2) и (2.6.3).

Из теоремы 2.6.1 вытекает следующий интересный результат. Если  $\alpha_s$  выбирается согласно (2.5.11), функция  $\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon_{s+1})$  в точке  $\mathbf{x}_s$  для плана  $\varepsilon_{s+1} = (1 - \alpha_s)\varepsilon_s + \alpha_s\varepsilon(\mathbf{x}_s)$  становится равной (см. также рис. 11б) числу неизвестных параметров:

$$\lambda(\mathbf{x}_s)d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_{s+1}) = \frac{\lambda(\mathbf{x}_s)d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s)}{1 - \alpha_s + \alpha_s\lambda(\mathbf{x}_s)d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s)} = m.$$

Этот факт говорит о том, что дальнейшее перенесение затрат в точку  $\mathbf{x}_s$  становится неразумным, так как заведомо найдется такая точка  $\mathbf{x}_{s+1}$ , в которой  $\lambda(\mathbf{x}_{s+1}) \times d(\mathbf{x}_{s+1}, \varepsilon_{s+1}) > m$ , и следовательно, выгоднее перенести часть затрат именно в эту точку.

II. На втором этапе каждой итерации необходимо найти положение максимума функции  $\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$ . Из (2.5.9) нетрудно видеть, что  $(s+1)$ -я итерация будет наиболее эффективна, если удастся найти положение абсолютного максимума функции  $\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$ . Данная функция, как правило, имеет (см. рис. 11б) не менее  $m$  локальных максимумов. К сожалению, большинство стандартных программ построены таким образом, что они отыскивают лишь локальные максимумы исследуемой функции.

Задача поиска абсолютного максимума особенно при больших размерностях пространства контролируемых переменных требует усложнения существующих программ и ведет к значительному увеличению времени счета. Поэтому в большинстве случаев итерационная процедура требует в сумме меньше времени (несмотря на сравнительно малую эффективность каждой итерации), если на каждой итерации ограничиваться первым попавшимся

локальным максимумом, для которого

$$\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) > m.$$

III. Для полного описания  $D$ -оптимального плана нужна его дисперсионная матрица (или информационная матрица) и непосредственно сам план:

$$\varepsilon^* = \begin{Bmatrix} \mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*, \dots, \mathbf{x}_n^* \\ \rho_1^*, \rho_2^*, \dots, \rho_n^* \end{Bmatrix}.$$

При численном построении  $\varepsilon^*$  мы получим, вообще говоря, план  $\varepsilon_s$ , который может быть сколь угодно близок к  $\varepsilon^*$ , но все же отличаться от него (мы можем сделать большое, но конечное число итераций). Это отличие будет заключаться в том, что

1.  $(\mathbf{x}_i^* - \mathbf{x}_{si})^T (\mathbf{x}_i^* - \mathbf{x}_{si}) = \xi_i$ , где  $\xi$  — некоторые малые положительные числа,

2.  $|\rho_i^* - \rho_{si}| = \pi_i$ , где  $\pi_i$  — малые положительные числа.

3. План  $\varepsilon_s$  по сравнению с планом  $\varepsilon^*$  имеет «посторонние» точки

$$\mathbf{x}_{s(n+1)}, \mathbf{x}_{s(n+2)}, \dots, \mathbf{x}_{s(n+j)}$$

с малыми весами

$$\gamma \geq \rho_{s(n+1)} \geq \rho_{s(n+2)} \geq \dots \geq \rho_{s(n+j)}.$$

4. Вместо одной точки  $\mathbf{x}_{si}$ , близкой к  $\mathbf{x}_i^*$ , план  $\varepsilon_s$  имеет набор точек  $\mathbf{x}_{si_1}, \mathbf{x}_{si_2}, \dots, \mathbf{x}_{si_l}$ , каждая из которых близка к  $\mathbf{x}_i^*$ :

$$(\mathbf{x}_i^* - \mathbf{x}_{si_k})^T (\mathbf{x}_i^* - \mathbf{x}_{si_k}) \leq \xi_i \quad (k=1, 2, \dots, l), \quad (2.6.7)$$

и их суммарный вес близок к  $\rho_i^*$ :

$$\left| \sum_{k=1}^l \rho_{si_k} - \rho_i^* \right| = \pi_i.$$

Перечисленные выше особенности приближенного  $D$ -оптимального плана можно наблюдать на рис. 11в, где представлена пятнадцатая итерация для регрессионной функции и функции эффективности, рассмотренных в примере предыдущего параграфа.

Так как планы с большим числом точек нежелательны, то вместо плана  $\varepsilon_s$  обычно удобнее рассматривать некоторое его приближение, а именно:

1) точки с малыми весами, не тяготеющие ни к одной из групп (2.6.7), выбрасываются;

2) точки, тяготеющие к одной из групп (2.6.7), объединяются по правилу:

$$x_{si} = p_{si}^{-1} \sum_{k=1}^l x_{si_k} p_{si_k}; \quad p_{si} = \sum_{k=1}^l p_{si_k}. \quad (2.6.8)$$

Составленный план проверяется на «близость» к  $D$ -оптимальному плану. Если план «близок» к оптимальному: например, выполняется (2.5.16), то вычисления прекращаются. Если нет, то итерационный процесс продолжается. Пример подобного округленного плана представлен на рис. 11г. На рис. 11д представлены функции  $\lambda(x) d(x, \varepsilon)$  для плана  $\varepsilon_{15}$  и его округленного плана. Округленный план  $\tilde{\varepsilon}_{15}$  оказывается ближе к  $D$ -оптимальному, чем план  $\varepsilon_{15}$ . Вообще говоря, это явление не случайно. Дело в том, что точки с малыми весами, а также некоторый разброс точек вблизи точек  $D$ -оптимального плана — наследие от неоптимального плана  $\varepsilon_0$ , которое, как правило, ликвидируется округлением плана  $\varepsilon_s$ .

Объединение группированных точек можно проводить и другими способами. Одним из наиболее удобных способов является следующий.

На последней итерации отыскиваются все локальные максимумы  $\tilde{x}_i$  функции  $\lambda(x) d(x, \varepsilon_s)$ , расположенные в пределах областей, определяемых неравенствами (2.6.7). Из них отбираются те, для которых

$$\left| \frac{\lambda(\tilde{x}_i) d(\tilde{x}_i, \varepsilon_s) - m}{m} \right| \leq \gamma, \quad (2.6.9)$$

где  $\gamma$  — некоторая наперед заданная константа. За спектр округленного плана выбираются все точки  $\tilde{x}_i$ , удовлетворяющие выписанному неравенству. Веса подсчитываются так же, как и в (2.6.8).

Целесообразность подобного сужения спектра опирается на тот факт, что в точках спектра  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon^*$  имеет место равенство (см. следствие теоремы 2.2.1):

$$\lambda(x_i) d(x_i, \varepsilon^*) = m.$$

Последний способ обычно дает повышение точности определения спектра оптимального плана (меньше

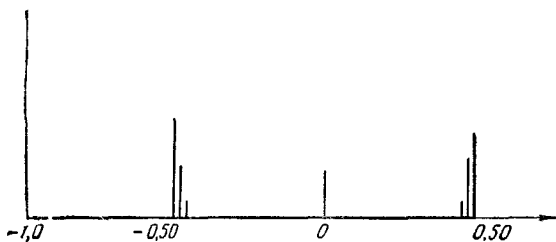


Рис. 11в. План  $\epsilon_{15}$ .

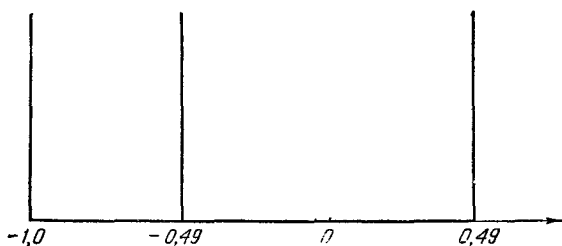


Рис. 11г. Округленный план  $\epsilon'_{15}$ .

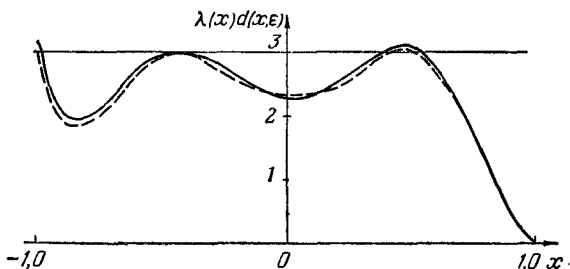


Рис. 11д. Зависимость  $\lambda(x)d(x,\epsilon)$  от  $x$ .

Сплошная линия соответствует плану  $\epsilon_{15}$ , пунктирная — плану  $\tilde{\epsilon}_{15}$ .

влияние начального приближения) по сравнению со способом (2.6.8), однако он требует большего объема вычислений.

**IV.** При больших размерностях пространства контролируемых переменных эффективность итерационного метода построения  $D$ -оптимальных планов можно значительно повысить, если из каких-либо общих соображений удастся сузить по сравнению с областью  $X$ , где измерения вообще возможны, множество точек, которые исследуются при поиске максимальных значений функций  $\lambda(x) d(x, \varepsilon_s)$ . В некоторых случаях сужение исследуемой области возможно еще до начала счета, в других случаях подобное сужение оказывается возможным в процессе счета.

**Пример.** Рассмотрим линейную двумерную регрессию

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2, \\ \lambda(x) \equiv 1, x \in X.$$

Область действия представлена на рис. 12. Так

как дисперсией оценки поверхности отклика является положительно определенная квадратичная форма в пространстве  $\|x_1, x_2\|$  (ср. с примером 1 § 2.2), то очевидно, что максимальные значения функции  $d(x, \varepsilon)$  должны достигаться на границе области.

В связи с этим функция  $d(x, \varepsilon_s)$  исследовалась только на кривой, ограничивающей область  $X$ . Точки спектра округленного плана  $\tilde{\varepsilon}_3$  нанесены на рисунке кружками. Затраты равны  $p_1 = p_2 = p_3 = \frac{1}{3}$ . Максимальное значение дисперсии поверхности отклика для этого плана равно 3,01. Напомним, что

$$\max_{x \in X} d(x, \varepsilon^*) = 3.$$

**V.** В пункте III настоящего параграфа отмечалось, что план  $\varepsilon_s$  обычно содержит значительно больше точек,

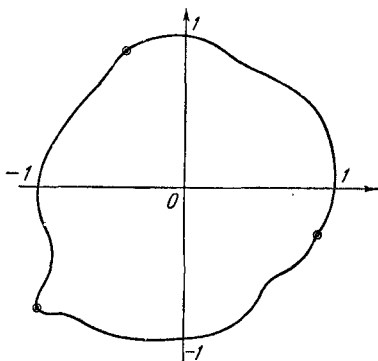


Рис. 12. Произвольная область  $X$ . Кружками помечены точки, соответствующие спектру плана  $\varepsilon^*$  для линейной регрессии.



чем искомый план  $\epsilon^*$ . Там же была предложена процедура, позволяющая сократить число точек плана  $\epsilon_s$  путем замены его округленным планом. Так как спектры  $D$ -оптимальных планов обычно содержат порядка  $N = \frac{m(m+1)}{2}$  точек, то хранение планов  $\epsilon_s$  требует при расчетах на электронно-вычислительных машинах большого объема памяти.

В простейшем случае, когда в ячейку записывается по одному числу, количество необходимых ячеек  $S$  должно быть

$$S = kN + N,$$

где  $k$  — размерность пространства контролируемых переменных. Напомним, что необходимо хранить координаты точек  $x_{sj}$  ( $j=1, 2, \dots, k$ ) и веса  $p_{sj}$ .

При больших размерностях пространства контролируемых переменных и большом числе неизвестных параметров неудобство такого способа определения характеристик  $D$ -оптимального плана очевидно.

В этом случае намного эффективней оказывается следующая модификация рассмотренного выше итерационного метода.

После каждой  $s$ -й итерации сохраняется лишь дисперсионная матрица  $\mathbf{D}(\epsilon_s)$ . Вычисления 3-го этапа каждой итерации (§ 2.5) опускаются, так как для определения элементов  $\mathbf{D}(\epsilon_s)$  в них нет необходимости. Соответственно отпадает необходимость в хранении числовых характеристик плана  $\epsilon_s$ . Итерационная процедура, как и ранее, продолжается до тех пор, пока не выполнится заданное условие окончания счета. Для дальнейших расчетов необходимы лишь элементы матрицы  $\mathbf{D}(\epsilon_s)$ .

После того как итерационная процедура будет закончена (например, будет иметь место одно из условий (2.5.16)), отыскиваются все максимумы  $x_i$  функции  $\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \epsilon_s)$ , для которых выполняются неравенства, аналогичные (2.6.9). Таких точек будет не менее  $m$ . Согласно определению

$$\sum_{i=1}^n p_{si} f_{\alpha}(x_{si}) f_{\beta}(x_{si}) = M_{\alpha\beta}(\epsilon_s) = M_{\beta\alpha}(\epsilon_s);$$

$$\mathbf{D}(\epsilon_s) = \mathbf{M}^{-1}(\epsilon_s).$$

Введем следующие матрицы:

$$\mathbf{p}^T = \| p_1, p_2, \dots, p_n \|, \quad n = \frac{m(m+1)}{2};$$

$$\mathbf{M}^T(\varepsilon) = \| M_{11}(\varepsilon), M_{12}(\varepsilon), \dots, M_{\alpha\beta}(\varepsilon), \dots, M_{mm}(\varepsilon) \|,$$

$$m \geq \beta \geq \alpha \geq 1;$$

$$\Phi = \| M(\varepsilon(\mathbf{x}_1)), M(\varepsilon(\mathbf{x}_2)), \dots, M(\varepsilon(\mathbf{x}_n)) \|,$$

где  $\varepsilon(\mathbf{x}_i)$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) — планы, спектры которых содержат по одной точке.

Если  $n < \frac{m(m+1)}{2}$ , то из матрицы  $\Phi$  выделяется одна из невырожденных матриц  $\Phi_n$  размером  $n \times n$ . Необходимые веса можно определить, решая систему

$$\Phi_n \mathbf{p} = M_n(\varepsilon_s), \quad (2.6.10)$$

где  $M_n(\varepsilon_s)$  — часть компонент вектора  $M(\varepsilon_s)$ , соответствующих матрице  $\Phi_n$ . Как показано в теореме 2.5.3,

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \mathbf{D}(\varepsilon_s) = \mathbf{D}(\varepsilon^*),$$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) = \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon^*). \quad (2.6.11)$$

Из (2.6.10) и (2.6.11) следует очевидная цепочка равенств:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \mathbf{x}_{si} = \mathbf{x}_i^*,$$

где  $\mathbf{x}_{si}$  соответствует  $i$ -му максимуму функции  $\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$ ;

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \Phi(\mathbf{x}_{s1}, \mathbf{x}_{s2}, \dots, \mathbf{x}_{sn}) = \Phi(\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*, \dots, \mathbf{x}_n^*),$$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \mathbf{p}_s = \mathbf{p}^*.$$

Здесь  $\mathbf{x}_i^*$  — координаты точек, принадлежащих спектру  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon^*$ , и  $\mathbf{p}^*$  — соответствующий вектор затрат.

Иногда, если какое-либо  $p_i^*$  мало или имеет нулевое значение,  $p_{si}$  может принимать малое по модулю отрицательное значение. Пусть для определенности  $n = \frac{m(m+1)}{2}$ . Появление при этом отрицательных весов объясняется тем, что информационная матрица плана  $\varepsilon_s$

в отличие от информационной матрицы плана  $\varepsilon^*$  является внутренней точкой множества всех возможных информационных матриц для данной замкнутой области  $X$ , поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  и функции эффективности  $\lambda(\mathbf{x})$ . Следовательно, по теореме 2.1.2 план  $\varepsilon_s$  (он не является точно  $D$ -оптимальным) может быть представлен в виде линейной комбинации с положительными коэффициентами не более чем из  $\frac{m(m+1)}{2} + 1$  точечных планов  $\varepsilon(\mathbf{x}_i)$  (напомним, что для  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon^*$  эта граница равна  $m(m+1)/2$ ). Но система (2.6.10) имеет не более  $m(m+1)/2$  уравнений, что на единицу меньше, чем требуется в качестве достаточного условия в теореме 2.1.2. Поэтому в некоторых случаях какое-либо из  $\rho_{sl}$  может оказаться меньше нуля.

**VI.** Сходимость итерационного процесса, рассмотренного в § 2.5, к  $D$ -оптимальному плану была доказана для случая, когда  $\alpha_s$  выбирается согласно (2.5.11). По аналогии с теоремой 2.5.3 можно доказать, что предложенный итерационный процесс сойдется к  $D$ -оптимальному плану для любой последовательности  $\alpha_s$ , удовлетворяющей условиям

$$\sum_{s=1}^{\infty} \alpha_s = \infty, \quad \lim_{s \rightarrow \infty} \alpha_s = 0.$$

Одной из таких последовательностей является последовательность  $\alpha_s \sim s^{-1}$ . Отыскать оптимальную последовательность  $\{\alpha_s^*\}$  (т. е. такую, при которой заданная точность достигается за наименьшее число итераций) не удастся. По-видимому, для каждого класса функций  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  и  $\lambda(\mathbf{x})$  существует своя оптимальная последовательность.

Практика численного построения  $D$ -оптимальных планов показала, что наиболее удачными являются последовательность  $\{\alpha_s\}$ , определяемых по формуле (2.5.11), и последовательность  $\{\alpha_s\}$ , строящаяся следующим образом:

1) выбирается некоторое  $\alpha_0$ , при котором ожидается уменьшение определителя  $|D(\varepsilon_0)|$ , итерации с указанным  $\alpha_0$  продолжают до тех пор, пока наблюдается уменьшение  $|D(\varepsilon_s)|$ ;

2) как только окажется, что

$$|D(\varepsilon_{s+1})| \geq |D(\varepsilon_s)|, \quad (2.6.12)$$

производится дробление  $\alpha_0$ , например, его можно уменьшить вдвое;

3) затем итерации повторяются с  $\alpha_0/2$  до тех пор, пока не будет иметь место (2.6.12), после этого производится повторное дробление  $\alpha_0/4$  и т. д.

**VII.** В тех случаях, когда на каждом  $s$ -м этапе итерационной процедуры отыскивается абсолютный максимум функции  $\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$ , можно определить, насколько близок план  $\varepsilon_s$  к  $D$ -оптимальному плану.

Из (2.5.9) с очевидностью следует, что

$$|M(\varepsilon_s)| \leq \left[ \frac{m}{\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s)} \right]^m \left[ \frac{\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - 1}{m-1} \right]^{m-1} \cdot |M(\varepsilon^*)|,$$

где  $\mathbf{x}_s$  определяется так же, как и в (2.5.9).

С другой стороны,

$$|M(\varepsilon_s)| \geq |M(\varepsilon^*)| \cdot e^{[m - \lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s)]}. \quad (2.6.13)$$

Чтобы убедиться в справедливости (2.6.13), рассмотрим план

$$\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha) \varepsilon_s + \alpha \varepsilon^*.$$

Согласно леммам 2.2.2 и 2.2.3

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=0} &= \text{Sp } M^{-1}(\tilde{\varepsilon}) [M(\varepsilon^*) - M(\varepsilon_s)] \Big|_{\alpha=0} = \\ &= \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon_s) M(\varepsilon^*) - m \leq \lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m; \\ \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \ln |M(\tilde{\varepsilon})| &\leq 0. \end{aligned}$$

Из данных неравенств следует, что

$$\begin{aligned} \ln |M(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=1} - \ln |M(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=0} &= \\ &= \ln |M(\varepsilon^*)| - \ln |M(\varepsilon_s)| \leq \lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - m. \end{aligned}$$

Отсюда, очевидно, следует (2.6.13). Неравенство (2.6.13) было впервые получено Кифером [37] при изучении связи характеристик произвольного плана с характеристиками  $D$ -оптимального плана. Таким образом, имеет место

**Теорема 2.6.2.** Если  $\lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s)$  — абсолютный максимум функции  $\lambda(x) d(x, \varepsilon_s)$ , то

$$e^{[m - \lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s)]} \leq \frac{|M(\varepsilon_s)|}{|M(\varepsilon^*)|} \leq \left[ \frac{m}{\lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s)} \right]^m \left[ \frac{\lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s) - 1}{m - 1} \right]^{m-1}.$$

## § 2.7. Усеченные $D$ -оптимальные планы

I. Во многих экспериментальных исследованиях складывается следующая ситуация. Измеряемая величина зависит от неизвестных параметров, например, по закону

$$E(y/x) = \eta(x, \theta) = \theta^T f(x).$$

Среди параметров  $\theta_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ) имеется несколько «мешающих» параметров  $\theta_\alpha$  ( $\alpha = l+1, l+2, \dots, m$ ), которые хотя и оказывают влияние на исследуемую величину  $y$ , но для экспериментатора особого интереса не представляют. В этом случае  $D$ -оптимальные планы, рассмотренные выше, заведомо не отражают нужд экспериментатора и, следовательно, непригодны. Эксперименты должны удовлетворять уже иным критериям оптимальности, непосредственно связанным с точностью определения оценок только тех параметров, которые интересуют исследователя («нужных параметров»). Подобные критерии мы будем называть «усеченными».

II. План  $\varepsilon^*$  называется усеченным  $D$ -оптимальным планом, если он минимизирует значение определителя подматрицы  $D_{ll}(\varepsilon)$  дисперсионной матрицы  $D(\varepsilon)$  оценок неизвестных параметров  $\theta$ :

$$|D_{ll}(\varepsilon^*)| = \min_{\varepsilon} |D_{ll}(\varepsilon)|.$$

Свойства усеченных  $D$ -оптимальных планов во многом напоминают свойства  $D$ -оптимальных планов.

В частности, имеет место теорема, аналогичная теореме 2.2.1 и впервые доказанная Кифером [11].

**Теорема 2.7.1.** Следующие утверждения:

1. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $|D_{ll}(\varepsilon)|$ ;
2. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, l, \varepsilon)$ , где

$$d(x, l, \varepsilon) = f^T(x) \begin{vmatrix} D_{ll} & D_{lk} \\ D_{kl} & D_{kk} - M_{kk}^{-1} \end{vmatrix} f(x),$$

$l+k=t$  и  $M_{kk}$  — подматрица информационной матрицы  $M(\varepsilon)$ ;

3.  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, l, \varepsilon) = l$  — эквивалентны между собой.

Любая линейная комбинация планов, удовлетворяющих условиям 1—3, также удовлетворяет этим условиям.

Доказательство. 1. Покажем, что из 1 следует 2. Рассмотрим план  $\tilde{\varepsilon} = (1-\alpha)\varepsilon^* + \alpha\varepsilon$ . В силу определения плана  $\varepsilon^*$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |D_{ll}(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=0} \geq 0. \quad (2.7.1)$$

Вычислим производную, стоящую в левой части данного неравенства. Согласно (1.1.3)

$$|D_{ll}(\tilde{\varepsilon})| = \frac{|M_{kk}(\tilde{\varepsilon})|}{|M(\tilde{\varepsilon})|},$$

где  $M(\tilde{\varepsilon}) = (1-\alpha)M(\varepsilon^*) + \alpha M(\varepsilon)$ . Используя формулы, приведенные в разделе VI § 1.1, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \frac{|M_{kk}(\tilde{\varepsilon})|}{|M(\tilde{\varepsilon})|} &= \frac{|M(\tilde{\varepsilon})| \frac{\partial}{\partial \alpha} |M_{kk}(\tilde{\varepsilon})| - |M_{kk}(\tilde{\varepsilon})| \frac{\partial}{\partial \alpha} |M(\tilde{\varepsilon})|}{|M_{kk}(\tilde{\varepsilon})| \cdot |M(\tilde{\varepsilon})|} = \\ &= \text{Sp } M_{kk}^{-1}(\tilde{\varepsilon}) \frac{\partial}{\partial \alpha} M_{kk}(\tilde{\varepsilon}) - \text{Sp } M^{-1}(\tilde{\varepsilon}) \frac{\partial}{\partial \alpha} M(\tilde{\varepsilon}), \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |D_{ll}(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=0} &= \text{Sp } M_{kk}^{-1}(\varepsilon^*) M_{kk}(\varepsilon) - \\ &- \text{Sp } M_{kk}^{-1}(\varepsilon^*) M_{kk}(\varepsilon^*) - \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*) M(\varepsilon) + \\ &+ \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*) M(\varepsilon^*) = l - \text{Sp } \Delta(\varepsilon^*) M(\varepsilon), \end{aligned} \quad (2.7.2)$$

где

$$\Delta = \begin{vmatrix} D_{ll} & D_{lk} \\ D_{kl} & D_{kk} - M_{kk}^{-1} \end{vmatrix}.$$

Выберем в качестве  $\varepsilon$  план, сосредоточенный в единственной точке  $x$ . Тогда из (2.7.1) и (2.7.2) получим

$$\text{Sp } \Delta(\varepsilon^*) \lambda(x) f(x) f^T(x) = \lambda(x) d(x, l, \varepsilon^*) \leq l. \quad (2.7.3)$$

С другой стороны, для любого плана  $\varepsilon$  (как и в случае  $D$ -оптимальных планов, в силу теоремы 2.1.2 здесь

можно ограничиться планами с дискретными конечными спектрами):

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \rho_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, l, \varepsilon) &= \sum_{i=1}^n \rho_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \Delta(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) = \\ &= \text{Sp } \mathbf{M}(\varepsilon) \Delta(\varepsilon) = \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon) \mathbf{M}(\varepsilon) = \\ &= \text{Sp } \mathbf{M}(\varepsilon) \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_{kk}^{-1}(\varepsilon) \end{vmatrix} = \text{Sp } \mathbf{I}_m - \text{Sp } \mathbf{I}_k = l, \end{aligned}$$

или, так как  $\sum_{i=1}^n \rho_i = 1$ ,

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, l, \varepsilon) \geq \max_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, l, \varepsilon) \geq l. \quad (2.7.4)$$

Из (2.7.3) и (2.7.4) следует, что усеченный  $D$ -оптимальный план минимизирует  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, l, \varepsilon)$ .

2. Покажем, что из 2 следует 1. Предположим, что план  $\varepsilon^*$  не удовлетворяет 1. Построим план  $\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha) \varepsilon^* + \alpha \varepsilon^0$ , где  $\varepsilon^0$  — один из планов, минимизирующих  $|\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon)|$ .

Матрицу  $\mathbf{D}_{ll}^{-1}(\tilde{\varepsilon})$  можно представить в виде (см. теорему 1.1.4)

$$\mathbf{M}_{ll}(\tilde{\varepsilon}) = \mathbf{D}_{ll}^{-1}(\tilde{\varepsilon}) = \mathbf{M}_{ll}(\varepsilon^*) - \mathbf{M}_{lk}(\varepsilon^*) \mathbf{M}_{kk}^{-1}(\varepsilon^*) \mathbf{M}_{kl}(\varepsilon^*). \quad (2.7.5)$$

Из (2.7.5) и теоремы 1.1.13 следует:

$$\mathbf{M}_{ll}(\tilde{\varepsilon}) - (1 - \alpha) \mathbf{M}_{ll}(\varepsilon^*) - \alpha \mathbf{M}_{ll}(\varepsilon^0) \geq 0.$$

Отсюда и из теоремы 1.1.14

$$\begin{aligned} \ln |\mathbf{M}_{ll}(\tilde{\varepsilon})| &\geq \ln |(1 - \alpha) \mathbf{M}_{ll}(\varepsilon^*) + \alpha \mathbf{M}_{ll}(\varepsilon^0)| \geq \\ &\geq (1 - \alpha) \ln |\mathbf{M}_{ll}(\varepsilon^*)| + \alpha \ln |\mathbf{M}_{ll}(\varepsilon^0)|. \end{aligned} \quad (2.7.6)$$

Неравенство (2.7.6) говорит о том, что функция  $\ln |\mathbf{M}_{ll}(\tilde{\varepsilon})|$  является вогнутой.

Учитывая определение плана  $\varepsilon^0$ , из (2.7.6) получим

$$\begin{aligned} \ln |\mathbf{D}_{ll}(\tilde{\varepsilon})| &\leq (1 - \alpha) \ln |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)| + \\ &+ \alpha \ln |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^0)| < \ln |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)|. \end{aligned}$$

Отсюда с учетом определения плана  $\varepsilon^0$  получим, что

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{D}_{ll}(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=0} \leq \ln |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^0)| - \ln |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)| < 0. \quad (2.7.7)$$

С другой стороны,

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln | \mathbf{D}_{ll}(\tilde{\epsilon}) | \Big|_{\alpha=0} = l - \text{Sp } \Delta(\epsilon^*) \mathbf{M}(\epsilon^0). \quad (2.7.8)$$

Перепишем (2.7.8) в виде

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln | \mathbf{D}_{ll}(\tilde{\epsilon}) | \Big|_{\alpha=0} = l - \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) d(\mathbf{x}_i, l, \epsilon^*), \quad (2.7.9)$$

где суммирование ведется по спектру плана  $\epsilon^0$ . Из (2.7.9) и определения плана  $\epsilon^*$  следует:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln | \mathbf{D}_{ll}(\tilde{\epsilon}) | \Big|_{\alpha=0} \geq l - \sum_{i=1}^n p_i l = 0. \quad (2.7.10)$$

Полученное противоречие (см. (2.7.7) и (2.7.10)) доказывает наше утверждение.

3. Эквивалентность утверждений 1 и 3, 2 и 3 непосредственно следует из эквивалентности утверждений 1 и 2 и неравенства (2.7.4).

4. Заключительное утверждение непосредственно следует из вогнутости функции  $\ln | \mathbf{M}_{ll}(\epsilon) |$ .

*Замечание.* Очень часто усеченные  $D$ -оптимальные планы имеют особенную информационную матрицу (соответствующий план называется вырожденным).

При доказательстве предполагалось, что

$$| \mathbf{M}(\epsilon^*) | \neq 0.$$

В тех случаях, когда  $| \mathbf{M}(\epsilon^*) | = 0$ , матрица  $\Delta(\epsilon)$  определяется следующим образом:

$$\Delta(\epsilon) = \tilde{\mathbf{D}}(\epsilon) \mathbf{L} \mathbf{D}_{ll}^{-1}(\epsilon) \mathbf{L}^T \tilde{\mathbf{D}}(\epsilon),$$

где  $\mathbf{L}^T = \| \mathbf{I}_l \mathbf{0} \|$ , матрица  $\tilde{\mathbf{D}}(\epsilon)$  является псевдообратной (в смысле Мура [8, стр. 32]) к матрице  $\mathbf{M}(\epsilon)$ :

$$\tilde{\mathbf{D}}(\epsilon) = \mathbf{M}^{-}(\epsilon).$$

Матрица  $\mathbf{M}^{-}(\epsilon)$  единственна и удовлетворяет следующим требованиям:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\epsilon) \mathbf{M}^{-}(\epsilon) \mathbf{M}(\epsilon) &= \mathbf{M}(\epsilon), & \mathbf{M}^{-}(\epsilon) \mathbf{M}(\epsilon) \mathbf{M}^{-}(\epsilon) &= \mathbf{M}^{-}(\epsilon), \\ (\mathbf{M}(\epsilon) \mathbf{M}^{-}(\epsilon))^T &= \mathbf{M}(\epsilon) \mathbf{M}^{-}(\epsilon), & (\mathbf{M}^{-}(\epsilon) \mathbf{M}(\epsilon))^T &= \mathbf{M}^{-}(\epsilon) \mathbf{M}(\epsilon). \end{aligned}$$

Заметим, что  $\mathbf{D}_{ll}(\epsilon) = \tilde{\mathbf{D}}_{ll}(\epsilon)$ .



*Следствие.* В точках спектра усеченного  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon^*$  величина  $\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, l, \varepsilon^*)$  достигает своего максимального значения  $l$ .

В справедливости данного утверждения читатель может без труда убедиться, проводя рассуждения, аналогичные использованным при доказательстве следствия из теоремы 2.2.1.

Ранее в § 2.2 было показано, что всегда найдется  $D$ -оптимальный план, содержащий не более чем  $\frac{m(m+1)}{2}$  точек. Для усеченных  $D$ -оптимальных планов эту границу можно понизить.

Прежде всего отметим, что матрица  $\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon)$  полностью характеризуется (см. (2.7.5))

$$n_0 = \frac{l(l+1)}{2} + lk = \frac{l}{2}(2k + l + 1)$$

элементами информационной матрицы. Отсюда нетрудно видеть (ср. с заключительной частью теоремы 2.1.2), что для любого плана  $\varepsilon$  с заданной матрицей  $\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon)$  найдется план  $\varepsilon_0$ , спектр которого содержит не более чем  $n_0 + 1$  точек, такой, что

$$\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon) = \mathbf{D}_{ll}(\varepsilon_0).$$

Можно также показать, что для любого усеченного  $D$ -оптимального плана  $\varepsilon^*_0$  всегда найдется план  $\varepsilon^*$ , спектр которого содержит  $n_0$  точек  $\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*) = \mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*_0)$ .

Последнее утверждение доказывается в полной аналогии с теоремой 2.2.3.

III. Для численного построения усеченных  $D$ -оптимальных планов можно использовать итерационную процедуру, рассмотренную в §§ 2.2.5 и 2.2.6 для  $D$ -оптимальных планов. При этом вместо

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)$$

следует искать

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, l, \varepsilon_s).$$

Шаг  $\alpha_s$  можно выбирать соответствующим

$$\max_{\alpha} (1 - \alpha)^{l-m} \cdot \left[ 1 - \frac{\alpha \lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, l, \varepsilon_s)}{1 - \alpha + \alpha \lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s)} \right]. \quad (2.7.11)$$

**Теорема 2.7.2.** Предложенная выше итерационная процедура сходится:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} |D_{II}(\varepsilon_s)| = |D_{II}(\tilde{\varepsilon})|.$$

Причем, если план  $\tilde{\varepsilon}$  невырожден ( $|M(\tilde{\varepsilon})| \neq 0$ ), то

$$|D_{II}(\tilde{\varepsilon})| = \min_{\varepsilon} |D_{II}(\varepsilon)|. \quad (2.7.12)$$

Доказательство данной теоремы аналогично доказательству теоремы 2.5.3 и может быть проведено читателем самостоятельно.

Следует отметить, что план  $\tilde{\varepsilon}$  всегда лучше, чем начальный план  $\varepsilon_0$  (если последний не совпадает с усеченным  $D$ -оптимальным планом):

$$|D_{II}(\tilde{\varepsilon})| < |D_{II}(\varepsilon_0)|.$$

Поэтому если начальное приближение  $\varepsilon$  выбрано достаточно близко к оптимальному плану, равенство (2.7.12) имеет место и для вырожденных планов  $\tilde{\varepsilon}$ .

Возможность сходимости итерационной процедуры для  $\alpha_s$  ( $s=0, 1 \dots$ ), выбранных на основе (2.7.11), при существовании вырожденных оптимальных планов к планам, отличным от оптимальных, объясняется тем, что выражение  $\lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s)$ , входящее в знаменатель (2.7.11), может быстро расти, и это вызовет, в свою очередь, слишком быстрое уменьшение  $\alpha_s$ .

Если последовательность  $\{\alpha_s\}$  выбрать так, чтобы

$$\sum_{s=1}^{\infty} \alpha_s = \infty,$$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \alpha_s = 0,$$

или выбирать ее так, чтобы  $\alpha_s$  уменьшалось в  $\gamma > 1$  раз, как только имеет место неравенство

$$|D_{II}(\varepsilon_{s+1})| \geq |D_{II}(\varepsilon_s)|,$$

то можно показать, что для соответствующих итерационных процедур будет также иметь место теорема 2.7.2.

При реализации рассмотренного метода численного построения усеченных  $D$ -оптимальных планов следует учитывать рекомендации, приведенные в § 2.6.

Так как свойства  $D$ -оптимальных и усеченных  $D$ -оптимальных планов близки между собой, то там, где это не сможет исказить смысл текста, мы будем объединять те и другие планы под общим названием:  $D$ -оптимальные планы.

## § 2.8. Нелинейная параметризация поверхностей отклика. Локально $D$ -оптимальные планы.

Предположим, что поверхность отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  — нелинейная функция параметров  $\theta$  и что известна эффективность  $\lambda(\mathbf{x})$  эксперимента, в котором производится измерение величины  $y$ .

Как показано в § 1.4, с практической точки зрения наиболее удобными являются наилучшие квазилинейные оценки  $\hat{\theta}$ , которые имеют дисперсионную матрицу

$$\mathbf{D}(\hat{\theta}, \varepsilon) \cong \mathbf{M}^{-1}(\theta_{\text{ист}}, \varepsilon), \quad (2.8.1)$$

где  $\mathbf{M}(\theta_{\text{ист}}, \varepsilon) = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)$  (остальные обозначения см. в пояснениях к (1.4.5)).

Очевидно, что матрица  $\mathbf{M}(\theta_{\text{ист}}, \varepsilon)$  обладает теми же свойствами, что и информационная матрица Фишера, определенная для случая линейной параметризации поверхности отклика. В частности, для нее справедливы теоремы 2.1.2 и 2.2.3.

Из теоремы 2.2.4, например, следует, что при выполнении (2.8.1) для плана  $\varepsilon^*$ , минимизирующего определитель  $|\mathbf{M}^{-1}(\theta_{\text{ист}}, \varepsilon)|$ , всегда найдется план с тем же значением определителя и содержащий не более чем  $t(t+1)/2$  точек. В рамках приближения (2.8.1) оказываются справедливыми и остальные результаты § 2.2, а также результаты §§ 2.5 — 2.8. Так как элементы минимизируемого функционала зависят от истинных значений искомых параметров (см. § 1.4), то, вообще говоря, мы не можем априори построить  $D$ -оптимальный план. Максимум наших возможностей — это построение оптимального плана в предположении, что нам заданы истинные значения искомых параметров. Это означает, что  $D$ -оптимальный план при нелинейной параметризации есть функция неизвестных параметров  $\theta_{\text{ист}}$ . Чтобы подчеркнуть этот факт, план  $\varepsilon^*(\theta_{\text{ист}})$  называют локально  $D$ -оптимальным

планом [38]. Явное построение этих планов оказывается возможным лишь в простейших случаях.

Несколько проще обстоит дело в тех случаях, когда удастся априори выделить область  $\Omega$ , которой заведомо (или с достаточно большой вероятностью) принадлежит точка  $\theta_{\text{ист}}$ . Если в этой области значения производных  $f_{\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \theta)}{\partial \theta_{\alpha}}$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ) меняются мало, то задача

планирования становится эквивалентной задаче планирования при линейной параметризации поверхности отклика.

Следует, однако, отметить, что выделение области  $\Omega$  возможно лишь при наличии некоторой априорной информации. Как будет показано ниже (см. гл. 4), в этих случаях более эффективным является последовательное планирование, учитывающее априорную информацию.

**Пример [38].** Предположим, что

$$p(x) = e^{-\theta x} \quad (\theta > 0, x \geq 0)$$

есть вероятность того, что микроорганизм выживет после воздействия на него некоторого вещества, доза которого равна  $x$ .

Обычно эксперимент проводится следующим образом. Берется  $N$  микроорганизмов, которые разбиваются на  $n$  групп по  $r_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) штук в каждой. Каждая группа подвергается воздействию исследуемого вещества при дозе  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Подсчитывают число выживших микроорганизмов  $\tilde{r}_i$  в каждой группе и проводится регрессионный анализ для определения оценки параметра активности  $\theta$  (заметим, что  $E(\tilde{p}_i/x_i) = e^{-\theta x_i}$ , где  $\tilde{p}_i = \tilde{r}_i/r_i$ ).

Так как число неизвестных параметров  $m = 1$ , то согласно изложенным выше результатам найдется оптимальный план, содержащий единственную точку  $x^*$ . Следовательно, разбиение на группы невыгодно.

Для отыскания оптимальной точки  $x^*$  необходимо знать эффективность планируемого эксперимента. Нетрудно проверить, что

$$D(\tilde{p}_i) = \frac{p_i(1-p_i)}{r_i}.$$

Поэтому

$$\lambda(x_i) r_i = D^{-1}(\tilde{p}_i) \quad \text{и} \quad \lambda^{-1}(x_i) = p_i(1-p_i), \quad x_i \geq 0.$$

Учитывая, что  $f(x) = \frac{\partial e^{-\theta x}}{\partial \theta} = -x e^{-\theta x}$  и измерения в оптимальном плане должны проводиться в единственной точке, вычислим матрицу  $M$  (состоящую здесь из одного элемента) в предположении, что  $\theta$  задано:

$$NM(\varepsilon) = N\lambda(x) f^2(x) = N \frac{x^2 e^{-\theta x}}{1 - e^{-\theta x}}, \quad x > 0$$

и

$$NM(\varepsilon) = 0, \quad x = 0.$$

Локально  $D$ -оптимальным планом будет план, при котором все  $N$  микроорганизмов должны подвергнуться воздействию вещества при одной и той же дозе  $x^*$ , где доза  $x^*$  определяется из уравнения

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{x^2 e^{-\theta x}}{1 - e^{-\theta x}} = 0,$$

или

$$2e^{-\theta x} + \theta x = 2$$

и приблизительно равна  $1,6 \cdot \theta^{-1}$ . Таким образом, данный локально  $D$ -оптимальный план существенно зависит от истинного значения параметра активности исследуемого вещества.

## § 2.9. Линейные критерии оптимальности

I. Пусть планы экспериментов сравниваются по правилу:

$$\varepsilon_1 \succ \varepsilon_2,$$

если

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon_1)] < L[\mathbf{D}(\varepsilon_2)]. \quad (2.9.1)$$

Направление знака «больше» выбрано из соображений согласия с наиболее широко распространенным критерием оптимальности экспериментов.

Функционал  $L$  ставит в соответствие каждой матрице  $\mathbf{D}(\varepsilon)$  некоторую скалярную величину. Будем предполагать, что этот функционал линеен, т. е.

$$L(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = L(\mathbf{A}) + L(\mathbf{B}), \quad (2.9.2)$$

$$L(c\mathbf{A}) = cL(\mathbf{A}). \quad (2.9.3)$$

Потребуем также, чтобы неравенство

$$L[A] \geq 0 \quad (2.9.4)$$

выполнялось для любой положительно полуопределенной матрицы  $A$ . Назовем для краткости план линейно оптимальным, если

$$L[D(\epsilon^*)] = \min_{\epsilon} L[D(\epsilon)].$$

II. Рассмотрим основные свойства линейно оптимальных планов.

**Теорема 2.9.1.** *Для любого линейно оптимального плана  $\epsilon^*$  всегда найдется план  $\epsilon_0^*$ , спектр которого состоит не более чем из  $n_0$  точек, и такой, что*

$$L[D(\epsilon_0^*)] = L[D(\epsilon^*)].$$

*Здесь  $n_0$  — число элементов информационной матрицы, от которых зависит величина  $L[D(\epsilon)]$  (напомним, что информационная матрица полностью характеризуется своими  $t(t+1)/2$  элементами).*

Доказательство данной теоремы совершенно аналогично доказательству теоремы 2.2.3 (см. также пояснения на стр. 33).

Теорема 2.9.1 имеет важное практическое значение, так как позволяет ограничиться рассмотрением планов, имеющих конечные спектры. В дальнейшем, если не будет сделано дополнительных оговорок, мы будем рассматривать только подобные планы.

**Лемма 2.9.1.** *1. Функция  $L[M^{-1}(\epsilon)]$  является выпуклой функцией от  $M(\epsilon)$ .*

*2. Если вместо (2.9.4) имеет место усиленное условие*

$$L[A] > 0 \quad (2.9.5)$$

*для любой положительно определенной матрицы, то функция  $L[M^{-1}(\epsilon)]$  является строго выпуклой функцией от  $M(\epsilon)$  на множестве невырожденных планов.*

Доказательство. Из теоремы 2.1.1 следует, что множество информационных матриц  $M(\epsilon)$  является выпуклым замкнутым множеством. Отсюда и из определения выпуклой функции для доказательства первой части леммы достаточно показать, что

$$L\{[(1-\alpha)M(\epsilon_1) + \alpha M(\epsilon_2)]^{-1}\} \leq \\ \leq (1-\alpha)L[M^{-1}(\epsilon_1)] + \alpha L[M^{-1}(\epsilon_2)] \quad (2.9.6)$$

для любых  $M(\varepsilon_1)$  и  $M(\varepsilon_2)$ . Неравенство (2.9.6) следует из (2.9.2), (2.9.4) и того факта, что (см. теорему 1.1.12)

$$(1-\alpha)M^{-1}(\varepsilon_1) + \alpha M^{-1}(\varepsilon_2) \geq [(1-\alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2)]^{-1}. \quad (2.9.7)$$

Для доказательства второй части необходимо показать, что

$$L\{[(1-\alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2)]^{-1}\} < < (1-\alpha)L[M^{-1}(\varepsilon_1)] + \alpha L[M(\varepsilon_2)] \quad (2.9.8)$$

при  $M(\varepsilon_1) \neq M(\varepsilon_2)$ ,  $0 < \alpha < 1$ .

Так как знак равенства в (2.9.7) имеет место только при  $M(\varepsilon_1) = M(\varepsilon_2)$  (см. теорему 1.1.12), то из (2.9.5) и (2.9.6) следует (2.9.8).

*Замечание.* Если какая-либо информационная матрица в проделанных выше выкладках особенная, то следует воспользоваться предельным переходом типа (1.3.23 б).

**Лемма 2.9.2.** Пусть  $\varepsilon = (1-\alpha)\varepsilon_1 + \alpha\varepsilon_2$ , тогда

$$\frac{\partial D(\varepsilon)}{\partial \alpha} = -D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon) \quad (2.9.9)$$

и

$$\frac{\partial^2 D(\varepsilon)}{\partial \alpha^2} = 2D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon) \geq 0. \quad (2.9.10)$$

**Доказательство.** 1. Так как

$$D^{-1}(\varepsilon) = M(\varepsilon) = (1-\alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2),$$

то отсюда и из (1.1.5) следует, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial D(\varepsilon)}{\partial \alpha} &= -D(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \alpha} [(1-\alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2)] D(\varepsilon) = \\ &= -D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon). \end{aligned}$$

2. Дифференцируя (2.9.9) по  $\alpha$ , получим

$$\frac{\partial^2 D(\varepsilon)}{\partial \alpha^2} = 2D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon). \quad (2.9.11)$$

Умножим (2.9.11) слева на  $q^T$  и справа на  $q$ :

$$\begin{aligned} q^T \frac{\partial^2 D(\varepsilon)}{\partial \alpha^2} q &= \\ &= 2q^T D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]D(\varepsilon)q = I^T D(\varepsilon)I, \end{aligned}$$

где

$$I = [M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)] D(\varepsilon) q.$$

Так как матрица  $D(\varepsilon)$  — положительно полуопределенная, то  $I^T D(\varepsilon) I \geq 0$ , следовательно,

$$q^T \frac{\partial^2 D(\varepsilon)}{\partial \alpha^2} q \geq 0,$$

т. е. матрица  $\frac{\partial^2 D(\varepsilon)}{\partial \alpha^2}$  — положительно полуопределенная матрица.

**Теорема 2.9.2.** Следующие утверждения:

1. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $L[D(\varepsilon)]$ ;

2. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $\max_{x \in X} \lambda(x) L[D(\varepsilon) f(x) f^T(x) \times$

$\times D(\varepsilon)]$ ;

3.  $\max_{x \in X} \lambda(x) L[D(\varepsilon^*) f(x) f^T(x) D(\varepsilon^*)] = L[D(\varepsilon^*)]$  — эк-

вивалентны между собой. Любая линейная комбинация планов, удовлетворяющих 1—3, также удовлетворяет 1—3.

Доказательство. 1. Покажем, что из 1 следует 2. Для этого рассмотрим план  $\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha)\varepsilon^* + \alpha\varepsilon$ , где  $\varepsilon$  — некоторый произвольный план.

В силу линейности функционала  $L$

$$\frac{\partial L[D(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} = L \left[ \frac{\partial}{\partial \alpha} D(\tilde{\varepsilon}) \right]. \quad (2.9.12)$$

Из (2.9.12) и леммы 2.9.2 получим:

$$\left. \frac{\partial L[D(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} = L \{ D(\varepsilon^*) [M(\varepsilon^*) - M(\varepsilon)] D(\varepsilon^*) \}.$$

В силу определения плана  $\varepsilon^*$  и выпуклости  $L[M^{-1}(\varepsilon)]$  должно выполняться неравенство

$$\left. \frac{\partial L[D(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} \geq 0. \quad (2.9.13)$$

Если план  $\varepsilon$  сосредоточен в единственной точке  $x$ , то (2.9.12) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L[D(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} &= L[D(\varepsilon^*)] - \\ &- \lambda(x) L[D(\varepsilon^*) f(x) f^T(x) D(\varepsilon^*)] \geq 0, \end{aligned} \quad (2.9.14)$$

так как  $M(\varepsilon(x)) = \lambda(x) f(x) f^T(x)$ .



С другой стороны, для любого плана  $\varepsilon$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{D}(\varepsilon)] &= \\ &= L\left[\mathbf{D}(\varepsilon) \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{D}(\varepsilon)\right] = \\ &= L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{M}(\varepsilon) \mathbf{D}(\varepsilon)] = L[\mathbf{D}(\varepsilon)], \end{aligned}$$

или, так как  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ ,

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)] &\geq \\ &\geq \max_i \lambda(\mathbf{x}_i) L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{D}(\varepsilon)] \geq \\ &\geq L[\mathbf{D}(\varepsilon)] \geq L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)]. \end{aligned} \quad (2.9.15)$$

Сравнивая (2.9.14) и (2.9.15), нетрудно видеть, что для линейно  $D$ -оптимального плана величина

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) = \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) L[\mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon^*)]$$

достигает наименьшего возможного значения.

В дальнейших рассуждениях для краткости будем называть планы, минимизирующие  $\max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$ , минимаксными.

2. Покажем, что из 2 следует 1.

Предположим, что минимаксный план  $\varepsilon^*$  не удовлетворяет 1, т. е.

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] > \min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon)].$$

Тогда найдется такой план  $\tilde{\varepsilon}$ , что

$$\frac{\partial L(\tilde{\varepsilon})}{\partial \alpha} < 0, \quad \tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha) \varepsilon^* + \alpha \varepsilon. \quad (2.9.16)$$

В качестве плана  $\varepsilon$  можно, например, выбрать план  $\varepsilon^0$ , минимизирующий  $L[\mathbf{D}(\varepsilon)]$ .

Тогда (2.9.16) будет непосредственно следовать из (2.9.2) — (2.9.4) и (см. теорему 1.1.12) неравенства:

$$\begin{aligned} L[\mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*)] &> (1 - \alpha) L[\mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*)] + \alpha L[\mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^0)] \geq \\ &\geq L\{[(1 - \alpha) \mathbf{M}(\varepsilon^*) + \alpha \mathbf{M}(\varepsilon^0)]^{-1}\}; \\ \frac{\partial L[\mathbf{M}^{-1}(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} &\leq L[\mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^0)] - L[\mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*)] < 0. \end{aligned}$$

Из предыдущего пункта доказательства данной теоремы следует, что

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) \leq \min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon)].$$

Отсюда и из (2.9.9) получим, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0} &= L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{M}(\varepsilon) \mathbf{D}(\varepsilon^*)] = \\ &= L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] - \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) L[\mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{D}(\varepsilon^*)] \geq \\ &\geq L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] - \max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) \geq 0, \end{aligned} \quad (2.9.17)$$

где  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  — спектр плана  $\varepsilon$ . Полученное противоречие (см. (2.9.16) и (2.9.17)) доказывает наше утверждение.

3. Предположим, что план  $\varepsilon^*$ , удовлетворяющий  $\mathcal{Z}$ , не линейно оптимален. Тогда найдется план  $\varepsilon$ , для которого будет иметь место неравенство (2.9.16). Но согласно (2.9.15) и определению плана  $\varepsilon^*$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})]}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0} &= L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] - \sum_{i=1}^n p_i \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) \geq \\ &\geq L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] \sum_{i=1}^n p_i = 0. \end{aligned} \quad (2.9.18)$$

Полученное противоречие (ср. (2.9.16) и (2.9.18)) доказывает утверждение о том, что если план  $\varepsilon^*$  удовлетворяет  $\mathcal{Z}$ , то он — линейно оптимальный и, следовательно, минимаксный.

4. Заключительная часть теоремы следует непосредственно из вогнутости функции  $L[\mathbf{M}^{-1}(\varepsilon)]$ .

*Замечание.* При доказательстве теоремы предполагалось, что  $|\mathbf{M}(\varepsilon^*)| \neq 0$ . Теорема остается справедливой, если под функцией  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$  в случае вырожденного плана  $\varepsilon$  подразумевать функцию  $\lambda(\mathbf{x}) L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)]$ , где матрица  $\tilde{\mathbf{D}}(\varepsilon)$  определена в замечании к теореме 2.7.1.

В условии только что доказанной теоремы предполагалось, что имеет место (2.9.4). Если условие (2.9.4)

заменить на строгое неравенство  $L(\mathbf{A}) > 0$  для любой положительно определенной матрицы  $\mathbf{A}$  и предположить, что оптимальные планы невырождены, то результаты теоремы 2.9.2 можно несколько усилить.

**Теорема 2.9.2\*.** *Следующие утверждения:*

1. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $L[\mathbf{D}(\varepsilon)]$ ;

2. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$ ;

3.  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) = L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)]$  — эквивалентны между собой.

*Информационные матрицы планов, удовлетворяющих 1—3, совпадают между собой. Любая линейная комбинация планов, удовлетворяющих 1—3, также удовлетворяет 1—3.*

Единственность информационной матрицы линейно оптимальных планов следует из строгой выпуклости функции при выполнении неравенства (2.9.7).

Отметим, что при ослабленном условии (2.9.4) могут существовать оптимальные планы, имеющие различные информационные матрицы.

Теорема 2.9.2\* является основой различных методов построения линейно оптимальных планов. Опираясь на результаты этой теоремы, можно сравнительно легко проверить, оптимален данный план или нет. При этом удобно пользоваться следующим свойством линейно оптимальных планов.

*Следствие.* В точках  $\mathbf{x}_i^*$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) спектра линейно оптимального плана

$$\varphi(\mathbf{x}_i, \varepsilon) = L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)].$$

Предположим противное: имеется точка спектра  $\mathbf{x}_j$ , в которой

$$\varphi(\mathbf{x}_j, \varepsilon^*) < L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)].$$

Тогда, перенеся малую часть затрат  $\alpha$  в точку  $\mathbf{x}$ , где  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) = L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)]$  (такая точка найдется в силу теоремы 2.9.2), получим

$$\begin{aligned} L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})] &= L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] - [\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) - \varphi(\mathbf{x}_j, \varepsilon^*)] \alpha < \\ &< L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] = \min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon)]. \end{aligned}$$

Полученное противоречие доказывает наше утверждение.

Заметим, что фигурирующая в проведенных выше рассуждениях величина  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$  всегда неотрицательна. Действительно,

$$\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) = L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)] = L[\mathbf{A}\mathbf{A}^T],$$

где  $\mathbf{A} = \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ . Но матрица вида  $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$  — положительно полуопределенная (см. теорему 1.1.9) и, следовательно,

$$\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) = L[\mathbf{A}\mathbf{A}^T] \geq 0.$$

**Пример.** Рассмотрим случай, когда необходимо наибольшее уточнение одного параметра, который можно, не ограничивая общности, обозначить  $\theta_1$ . Функционал  $L$  действует при этом на матрицу  $\mathbf{D}(\hat{\theta})$  как

$$\Gamma^T \mathbf{D}(\hat{\theta}) \mathbf{1},$$

где

$$\Gamma = \|1, 0, \dots, 0\|, \quad \theta_1 = \Gamma^T \theta.$$

Легко проверить, что

$$\Gamma^T (\mathbf{A} + \mathbf{B}) \mathbf{1} = \Gamma^T \mathbf{A} \mathbf{1} + \Gamma^T \mathbf{B} \mathbf{1},$$

$$\Gamma^T k \mathbf{A} \mathbf{1} = k \Gamma^T \mathbf{A} \mathbf{1},$$

$$\Gamma^T \mathbf{A} \mathbf{1} \geq 0$$

для любой положительно полуопределенной матрицы  $\mathbf{A}$  функция  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) &= \lambda(\mathbf{x}) \Gamma^T \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{1} = \\ &= \lambda(\mathbf{x}) \left[ \sum_{\alpha=1}^m D_{1\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}) \right]^2. \end{aligned}$$

Для того чтобы найти оптимальный план, достаточно построить функцию  $\lambda^{1/2}(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^m D_{1\alpha}(\varepsilon^*) f_{\alpha}(\mathbf{x})$ , которая вписалась бы в коридор  $\pm D_{11}^{1/2}(\varepsilon^*)$ . Иногда удобнее вместо функции  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$  использовать функцию

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{x}, \varepsilon) = \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) D_{11}^{-1/2}(\varepsilon)$$

и соответственно вписывать в коридор  $\pm 1$  функцию  $\lambda^{1/2}(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^m D_{1\alpha}(\varepsilon^*) D_{11}^{-1/2}(\varepsilon^*) f_{\alpha}(\mathbf{x})$  или функцию  $\sum_{\alpha=1}^m D_{1\alpha} \times \times (\varepsilon^*) D_{11}^{-1/2}(\varepsilon^*) f_{\alpha}(\mathbf{x})$  в коридор  $\pm \lambda^{-1/2}(\mathbf{x})$ .

Нетрудно убедиться, что, как и следовало ожидать, условие  $\max_{x \in X} \tilde{\varphi}(x, \varepsilon^*) \leq 1$  совпадает с условием

$$\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, 1, \varepsilon^*) \leq 1$$

(см. § 2.2.7). Действительно,

$$\begin{aligned} \lambda(x) d(x, 1, \varepsilon) &= \lambda(x) f^T(x) \times \\ &\times \left\| \begin{array}{cc} D_{11}(\varepsilon) & D_{1(m-1)}(\varepsilon) \\ D_{(m-1)1}(\varepsilon) & D_{(m-1)(m-1)}(\varepsilon) - M_{(m-1)(m-1)}^{-1}(\varepsilon) \end{array} \right\| f(x) = \\ &= \lambda(x) f^T(x) D(\varepsilon) \left\| \begin{array}{cc} D_{11}^{-1}(\varepsilon) & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right\| D(\varepsilon) f(x) = \hat{\varphi}(x, \varepsilon). \end{aligned}$$

Здесь использовалось, что

$$\begin{aligned} D(\varepsilon) \left\| \begin{array}{cc} D_{11}^{-1}(\varepsilon) & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right\| D(\varepsilon) &= \\ &= \left\| \begin{array}{cc} D_{11}(\varepsilon) & D_{1(m-1)}(\varepsilon) \\ D_{(m-1)1}(\varepsilon) & D_{(m-1)(m-1)}(\varepsilon) D_{11}^{-1}(\varepsilon) D_{1(m-1)}(\varepsilon) \end{array} \right\|, \end{aligned}$$

и формула Фробениуса (см. § 1.1).

а) Пусть

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2, \quad \lambda(x) = (1 - |x|)^2, \quad -1 \leq x \leq 1.$$

График функции  $\lambda(x)$  представлен на рис. 13а.

Попытаемся найти невырожденный план, минимизирующий дисперсию  $\hat{\theta}_3$ . Очевидно, что функция

$$\lambda^{-1/2}(x) \tilde{\varphi}^{1/2}(x, \varepsilon) = \sum_{i=1}^3 D_{3i}(\varepsilon) D_{33}^{-1/2}(\varepsilon) x^{2-i}$$

полином второй степени. Отметим, что у этого полинома коэффициент при  $x^2$  не может быть нулевым, так как это означало бы, что  $D_{33}(\varepsilon) = 0$ .

В точках спектра оптимального плана должны выполняться равенства

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}^{1/2}(x, \varepsilon^*) &= (1 - |x_i|)^{-1}, \\ \frac{\partial \tilde{\varphi}^{1/2}(x, \varepsilon^*)}{\partial x} \Big|_{x=x_i} &= \frac{\partial (1 - |x_i|)^{-1}}{\partial x} \Big|_{x=x_i}, \\ &i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Так как ищется невырожденный план, то таких точек должно быть не менее трех. Из соображений симметрии

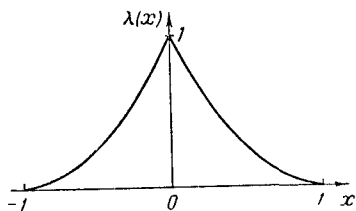


Рис. 13а. Функция эффективности  $\lambda(x) = (1-x)^2$ .

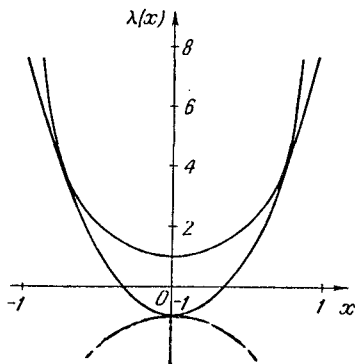


Рис. 13б. Геометрическое построение плана, минимизирующего дисперсию одного из параметров.

(рис. 13б) вытекает, что  $\lambda^{-1/2}(x) \tilde{\varphi}^{1/2}(x, \epsilon^*) = -1 + bx^2$ ,  $b \geq 0$ . В точках касания должны выполняться уравнения

$$-1 + bx^2 = (1-x)^{-1}, \quad 2bx = (1-x)^{-2}, \quad 1 \geq x \geq 0;$$

$$-1 + bx^2 = (1+x)^{-1}, \quad 2bx = (1+x)^{-2}, \quad 0 \geq x \geq -1.$$

Нетрудно проверить, что единственными решениями этих систем являются при  $b > 0$

$$x_1 = -\frac{7 - \sqrt{17}}{4} \simeq -0,72, \quad x_3 = -x_1, \quad b \simeq 8,85.$$

Третьей точкой касания, как нетрудно видеть, является точка  $x=0$ .

Отсюда искомый полином равен

$$\lambda^{-1/2}(x) \tilde{\varphi}^{1/2}(x, \epsilon^*) = -1 + 8,85x^2.$$

Так как

$$D_{31}(\epsilon^*) D_{33}^{-1/2}(\epsilon^*) + D_{32}(\epsilon^*) D_{33}^{-1/2}(\epsilon^*) x + D_{33}^{1/2}(\epsilon^*) x^2 \equiv \\ \equiv -1 + 8,85x^2,$$

то  $D_{33}(\epsilon^*) = 78,3$ ,  $D_{32}(\epsilon^*) = 0$  и  $D_{31}(\epsilon^*) = -8,85$ .

С другой стороны, непосредственно вычисляя элементы дисперсионной матрицы при спектре  $-0,72; 0; 0,72$  и  $p_1 = p_3$ , легко убедиться, что

$$D_{13} = -(p_2 \cdot 0,72^2)^{-1}.$$

Отсюда, используя полученное выше численное значение данного элемента дисперсионной матрицы, получим

$$p_2 \simeq 0,22 \text{ и } p_1 = p_3 = \frac{1}{2} (1 - p_2) \simeq 0,39.$$

Заметим, что для равномерного плана

$$\varepsilon = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -\frac{1}{2}, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = \frac{1}{2} \\ p_1 = p_2 = p_3 = \frac{1}{3} \end{array} \right\}$$

дисперсия оценки третьего параметра равна  $D_{33} = 144$ , т. е. почти вдвое больше. Более подробную информацию о планировании экспериментов по определению оценки одного параметра, изложенную с несколько иных позиций, можно получить в [39] (см. также [40]).

б) Покажем, что существуют линейно оптимальные планы, которые для одной и той же регрессионной задачи имеют разные информационные матрицы.

Пусть  $\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x$ ,  $\lambda(x) \equiv 1$  и  $-1 \leq x \leq 1$ . Рассмотрим два плана:

$$\varepsilon_1 = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = 0 \\ p_1 = 1 \end{array} \right\} \text{ и } \varepsilon_2 = \left\{ \begin{array}{ll} x_1 = -\gamma, & x_2 = \gamma \\ p_1 = \frac{1}{2}, & p_2 = \frac{1}{2} \end{array} \right\}, \quad 0 \leq \gamma \leq 1.$$

Для плана  $\varepsilon_1$  имеем:

$$M(\varepsilon_1) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \text{ и } \tilde{D}(\varepsilon_1) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

Проверим, что вырожденный план  $\varepsilon_1$  минимизирует  $D(\hat{\theta}_1) = D_{11}(\varepsilon)$ . Для этого достаточно проверить, что  $\max_{x \in X} \varphi(x, \varepsilon_1) = 1$ . Вычислим  $\varphi(x, \varepsilon_1)$ :

$$\varphi(x, \varepsilon_1) = \left[ \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 \\ x \end{vmatrix} \right]^2 = 1.$$

Так как  $\max_x 1 = 1$ , то план  $\varepsilon_1$  оптимален.

Для плана  $\varepsilon_2$  имеем:

$$M(\varepsilon_2) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma^2 \end{vmatrix}, \quad D(\varepsilon_2) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma^{-2} \end{vmatrix}$$

$$\max_x \varphi(x, \varepsilon_2) = \max_x \left[ \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma^2 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma^{-2} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 1 \\ x \end{vmatrix}^2 \right] = \max_x 1 = 1.$$

Таким образом, оба плана  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  оптимальны, но их информационные матрицы отличны. Отметим, что в силу теоремы 2.9.2 линейная комбинация планов  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  также дает оптимальный план.

## § 2.10. Итерационный метод построения линейно оптимальных планов

1. Явное построение линейно оптимальных планов возможно лишь в простейших случаях, которые будут рассмотрены при изучении конкретных линейных критериев сравнения планов. В настоящем параграфе будет изложен численный метод построения оптимальных планов, который в основном опирается на результаты теоремы 2.9.2.

Пусть имеется некоторый невырожденный план  $\varepsilon_0$ . Рассмотрим план  $\varepsilon_1 = (1 - \alpha)\varepsilon_0 + \alpha\varepsilon(x)$ . Согласно лемме 2.9.2 при малых  $\alpha$

$$\begin{aligned} L[D(\varepsilon_1)] &\simeq L[D(\varepsilon_0)] + \left. \frac{\partial L[D(\varepsilon_1)]}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} \cdot \alpha = \\ &= L[D(\varepsilon_0)] - \{\varphi(x, \varepsilon_0) - L[D(\varepsilon_0)]\} \alpha. \end{aligned}$$

Если план  $\varepsilon_0$  не линейно оптимален, то в силу теоремы 2.9.2 всегда найдется точка  $x$ , где

$$\varphi(x, \varepsilon_0) - L[D(\varepsilon_0)] > 0.$$

Перенеся часть затрат в ту точку  $x_0$ , где разность  $\varphi(x, \varepsilon_0) - L[D(\varepsilon_0)]$  достигает своего максимального значения, мы получим план  $\varepsilon_1$  лучший, чем план  $\varepsilon_0$ . Повторяя подобное «усовершенствование» плана достаточно долго, мы достигнем такого момента, когда улучшение



будет несущественно, т. е.

$$\frac{L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})]}{L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})]} \leq \gamma,$$

где  $\gamma$  — некоторое малое положительное число. Последовательность  $\{L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)]\}$  при  $s \rightarrow \infty$  сойдется, так как любая убывающая последовательность, ограниченная снизу (в данном случае граница снизу равна  $\min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon)]$ ),

сходится. Наша задача заключается в том, чтобы выбрать такую последовательность  $\{\alpha_s\}$ , при которой последовательность  $\{L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)]\}$  сходилась бы к  $\min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon)]$ .

**II.** Рассмотрим теперь численный метод поиска линейно оптимальных планов с более строгих математических позиций.

**Лемма 2.10.1.** Для любого не линейно оптимального плана  $\varepsilon$  в точках, где  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) - L[\mathbf{D}(\varepsilon)] > 0$ , имеет место неравенство

$$\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) - 1 \geq \frac{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) - L[\mathbf{D}(\varepsilon)]}{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)} \geq 0. \quad (2.10.1)$$

**Доказательство.** Согласно лемме 2.9.2 для плана  $\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha)\varepsilon + \alpha\varepsilon(\mathbf{x})$  справедливо неравенство:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})}{\partial \alpha^2} \Big|_{\alpha=0} &= \mathbf{D}(\varepsilon) [\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) - \\ &- \mathbf{M}(\varepsilon)] \mathbf{D}(\varepsilon) [\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) - \mathbf{M}(\varepsilon)] \mathbf{D}(\varepsilon) = \\ &= \lambda^2(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) - \\ &- 2\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) + \mathbf{D}(\varepsilon) = \\ &= \lambda(\mathbf{x}) [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) - 1] \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) - \\ &- [\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) - \mathbf{D}(\varepsilon)] \geq 0. \end{aligned}$$

Подсчитывая значения функционала  $L$  от обеих частей данного матричного неравенства, получим

$$\begin{aligned} [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon) - 1] \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) - \\ - \{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) - L[\mathbf{D}(\varepsilon)]\} \geq 0; \quad (2.10.2) \end{aligned}$$

так как  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) - L[\mathbf{D}(\varepsilon)] > 0$ , то из (2.10.2) следует (2.10.1).

**Лемма 2.10.2.** Пусть план  $\varepsilon_{s+1} = (1 - \alpha) \varepsilon_s + \alpha \varepsilon(\mathbf{x})$ , тогда:

$$1. L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})] = (1 - \alpha)^{-1} \left\{ L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - \frac{\alpha \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s)}{1 - \alpha + \alpha \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s)} \right\}, \quad (2.10.3)$$

2.  $L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})] > 0$ , если в точке  $\mathbf{x}$

$$\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] > 0$$

и

$$0 < \alpha < \frac{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)]}{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s) [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - 1]}. \quad (2.10.4)$$

**Доказательство.** Согласно теореме 2.6.1

$$\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1}) = (1 - \alpha)^{-1} \left[ \mathbf{I}_m - \frac{\alpha \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})}{1 + \alpha [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - 1]} \right] \mathbf{D}(\varepsilon_s).$$

Воспользовавшись определением функционала  $L$ , отсюда нетрудно получить в согласии с (2.10.3), что

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})] = (1 - \alpha)^{-1} \left\{ L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - \frac{\alpha \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s)}{1 + \alpha [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - 1]} \right\}.$$

Из (2.10.3)

$$\begin{aligned} L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})] &= \\ &= \frac{\alpha}{1 - \alpha} \left\{ \frac{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s)}{1 + \alpha [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - 1]} - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] \right\}. \end{aligned}$$

Непосредственной проверкой легко убедиться, что

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})] < 0,$$

если (см. также лемму 2.10.1)  $\alpha$  заключено в пределах

$$0 < \alpha < \frac{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)]}{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s) [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - 1]}.$$

Обратим внимание на то, что в силу леммы 2.10.1 верхняя граница (см.(2.10.4)) для значения коэффициента  $\alpha$ , при котором план  $\varepsilon_{s+1}$  предпочтительнее плана  $\varepsilon_s$ , всегда не больше единицы ( $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] > 0$ ).

Рассмотрим следующую итерационную процедуру.

1. Имеется некоторый невырожденный план  $\varepsilon_s$  с дисперсионной матрицей  $\mathbf{D}(\varepsilon_s)$ .

2. Отыскивается точка  $\mathbf{x}_s$ , соответствующая

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \{\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)]\}.$$

3. Строится план

$$\varepsilon_{s+1} = (1 - \alpha_s) \varepsilon_s + \alpha \varepsilon(\mathbf{x}_s),$$

где

$$\alpha_s = \frac{\varphi(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)]}{\gamma \varphi(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) [\lambda(\mathbf{x}_s) d(\mathbf{x}_s, \varepsilon_s) - 1]} \quad (2.10.5)$$

и  $\gamma$  — некоторая константа, большая 1.

4. Подсчитывается  $\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})$  и  $L[\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})]$ . Далее все действия 1 ÷ 3 повторяются с планом  $\varepsilon_{s+1}$  и т. д.

**Теорема 2.10.1.** Последовательность  $\{L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)]\}$  сходится:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] = L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})],$$

причем если план  $\tilde{\varepsilon}$  невырожден, т. е.  $|\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})| \neq 0$ , то

$$L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})] = \min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon)].$$

**Доказательство.** Если  $\alpha_s$  выбирается согласно (2.10.5), то по лемме 2.10.2

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon_0)] \geq L[\mathbf{D}(\varepsilon_1)] \geq \dots \geq L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] \geq \dots \geq \min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)].$$

Но всякая монотонно убывающая ограниченная снизу последовательность сходится:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] = L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})].$$

Покажем, что при невырожденном плане  $\tilde{\varepsilon}$

$$L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})] = \min_{\varepsilon} L[\mathbf{D}(\varepsilon)].$$

Если это не так и план  $\tilde{\varepsilon}$  отличен от линейно оптимального, то по теореме 2.9.2.

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \{\varphi(\mathbf{x}, \tilde{\varepsilon}) - L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})]\} = \Delta > 0.$$

Так как план  $\tilde{\varepsilon}$  — невырожденный, то  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \tilde{\varepsilon}) = c < \infty$ . Поэтому

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \alpha_s = \frac{\Delta}{\gamma \varphi(\mathbf{x}, \tilde{\varepsilon}) (c - 1)} \geq \nu > 0.$$

Но, с другой стороны, при  $\max_{x \in X} \lambda(x) d(x, \bar{\varepsilon}) = c < \infty$  из формулы (2.10.3) и необходимого условия сходимости

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \{L[D(\varepsilon_s)] - L[D(\varepsilon_{s+1})]\} = 0$$

следует, что  $\lim_{s \rightarrow \infty} \alpha_s = 0$ . Полученное противоречие доказывает наше утверждение.

III. Можно показать, что итерационная процедура 1—4 сходится и при ином выборе последовательности  $\alpha_s$ . Так же, как и при построении  $D$ -оптимальных планов,  $\alpha_s$  надо выбрать достаточно малым при малых  $s$ , чтобы последовательность  $\{L[D(\varepsilon_s)]\}$  уменьшалась с ростом  $s$ , и  $\alpha_s$  не должны убывать слишком быстро, чтобы последовательность  $\{L[D(\varepsilon_s)]\}$  не сошлась к пределу, для которого  $\varphi(\varepsilon_s) - L[D(\bar{\varepsilon})] > 0$ . Для выполнения последнего условия достаточно потребовать, чтобы

$$\sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s = \infty, \quad \lim_{s \rightarrow \infty} \alpha_s = 0. \quad (2.10.6)$$

Простейшей последовательностью, удовлетворяющей условиям (2.10.6), является  $\alpha_s \sim s^{-1}$ .

Как показывает практика, наиболее удовлетворительные результаты в смысле скорости сходимости итерационной процедуры получаются при последовательности  $\alpha_s$ , выбираемых согласно (2.10.5), и при  $\alpha_s$ , уменьшаемых в  $\gamma > 1$  раз, как только

$$L[D(\varepsilon_{s+1})] \geq L[D(\varepsilon_s)].$$

И в первом и во втором из указанных случаев скорость сходимости зависит от значения  $\gamma$ .

Выход из итерационного процесса 1—4 можно осуществить по одному из правил:

$$\alpha_s \leq \delta_1, \quad \frac{L[D(\varepsilon_s)] - L[D(\varepsilon_{s+1})]}{L[D(\varepsilon_{s+1})]} \leq \delta_2,$$

$$\max_{x \in X} \varphi(x, \varepsilon_s) - L[D(\varepsilon_s)] \leq \delta_3,$$

где  $\delta_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) — наперед заданная «точность» приближения.

Последнее правило окончания счета наиболее удобно. Зная  $\delta_3$ , мы можем оценить сверху разность

$L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)]$ . Действительно, рассмотрим план  $\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha)\varepsilon_s + \alpha\varepsilon^*$ , где  $\varepsilon^*$  — линейно оптимальный план. Из лемм 2.9.1 и 2.9.2 и определения функционала  $L$  следует, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})] \Big|_{\alpha=0} &= L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{M}(\varepsilon^*) \mathbf{D}(\varepsilon_s)] \geq \\ &\geq L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - \max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s); \\ \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})] &\geq 0. \end{aligned}$$

Из данных неравенств нетрудно видеть, что

$$\begin{aligned} L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})] \Big|_{\alpha=1} - L[\mathbf{D}(\tilde{\varepsilon})] \Big|_{\alpha=0} &= L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] - \\ &- L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] \geq L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - \max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon_s), \end{aligned}$$

или, окончательно,

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon_s)] - L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] \leq \delta_3.$$

Очевидно, что данный результат может быть использован и для проверки того, насколько близок к линейно оптимальному любой заданный план  $\varepsilon$ .

Если предельный план  $\tilde{\varepsilon}$  оказался вырожденным, то рекомендуется проверить, выполнение неравенств (см. также следствие теоремы 2.9.2):

$$\varphi(\mathbf{x}, \tilde{\varepsilon}) - L[\tilde{\mathbf{D}}(\tilde{\varepsilon})] \leq 0, \quad \mathbf{x} \in X.$$

В тех случаях, когда данное неравенство нарушается, итерационную процедуру необходимо повторить с иным первоначальным приближением.

При конкретных реализациях исследованного итерационного метода на вычислительных машинах следует руководствоваться теми же замечаниями, которые были высказаны к итерационной процедуре по построению  $D$ -оптимальных планов.

## § 2.11. Планы, минимизирующие $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)$

1. Эксперименты, минимизирующие  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)$ , и соответствующие планы, как упоминалось выше, называются  $A$ -оптимальными. Минимизация  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)$  эквивалентна минимизации средней дисперсии оценок параметров

$$\bar{D} = m^{-1} \sum_{\alpha=1}^m \mathbf{D}(\hat{\theta}_\alpha) = m^{-1} \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon).$$

Требование минимума суммы квадратов ошибок оценок искомых параметров  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)$  наглядно и естественно. Именно наглядность данного критерия объясняет, по видимому, тот факт, что экспериментаторы, как правило, сравнивают результаты различных экспериментов, опираясь на  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)$ . Напомним, что  $[\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)]^{1/2}$  равен половине длины диагонали прямоугольника, описанного около эллипсоида рассеяния (см. рис. 3). С математической точки зрения этот критерий менее удобен, чем минимальный критерий или критерий  $D$ -оптимальности. Так, например,  $A$ -оптимальные планы не инвариантны относительно любого невырожденного линейного преобразования в пространстве оцениваемых параметров (ср. с теоремой 2.2.4). Методы построения  $A$ -оптимальных планов несколько сложнее, чем методы построения  $D$ -оптимальных планов.

II. Критерий  $A$ -оптимальности так же, как и критерий  $D$ -оптимальности, опирается на элементы дисперсионной матрицы  $\mathbf{D}(\varepsilon)$ . Поэтому многие свойства  $D$ -оптимальных планов, вытекающие из определения дисперсионной матрицы или информационной матрицы, остаются справедливыми и для  $A$ -оптимальных планов. Ниже мы будем изучать  $A$ -оптимальные планы, используя математический аппарат, развитый в § 2.9 и § 2.10.

Покажем, что функционал

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon)] = \text{Sp}_l \mathbf{D}(\varepsilon), \quad (2.11.1)$$

где индекс  $l$  указывает на то, что суммируются только те диагональные элементы матрицы  $\mathbf{D}(\varepsilon)$ , которые соответствуют  $l$  параметрам, представляющим интерес для экспериментатора ( $l \leq m$ ), удовлетворяет условиям (2.9.2) — (2.9.4).

Действительно (см. § 1.1),

$$\text{Sp}_l (\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \text{Sp}_l \mathbf{A} + \text{Sp}_l \mathbf{B} \quad (2.11.2)$$

и

$$\text{Sp}_l k\mathbf{A} = k \text{Sp}_l \mathbf{A}. \quad (2.11.3)$$

Очевидно также, что

$$\text{Sp}_l \mathbf{A} \geq 0 \quad (2.11.4)$$

для любой положительно полуопределенной матрицы  $\mathbf{A}$ .

Из (2.11.2) — (2.11.4) следует, что для  $A$ -оптимальных планов справедливы теоремы 2.9.1 и 2.9.2.

Более сильные результаты удается получить, когда  $l=m$ . При этом

$$\text{Sp } \mathbf{A} > 0$$

для любой положительно полуопределенной матрицы и, следовательно, имеет место теорема 2.9.2\*.

Величина  $\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$ , введенная в § 2.9, принимает для рассматриваемого случая вид:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) &= \lambda(\mathbf{x}) L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)] = \\ &= \lambda(\mathbf{x}) \text{Sp}[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)] = \lambda(\mathbf{x}) \text{Sp}[\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})] = \\ &= \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.11.5)$$

В (2.11.5) было использовано, что  $\text{Sp } \mathbf{AB} = \text{Sp } \mathbf{BA}$ . Опираясь на (2.11.5), можно получить достаточное условие эквивалентности  $D$ - и  $A$ -оптимальных планов.

**Теорема 2.11.1.** *План  $\varepsilon^*$  является одновременно  $D$ - и  $A$ -оптимальным, если*

$$k\mathbf{D}(\varepsilon^*) = \mathbf{D}^2(\varepsilon^*). \quad (2.11.6)$$

При этом

$$\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon^*) = km, \quad (2.11.7)$$

где  $k$  — некоторая константа и  $m$  — число неизвестных параметров.

**Доказательство.** 1. Пусть  $\varepsilon^*$  является  $D$ -оптимальным планом, тогда по теореме 2.2.1 этот же план минимизирует величину  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ . Принимая во внимание (2.11.6), нетрудно видеть, что одновременно минимизируется также величина  $\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \times \times \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ . Но план, минимизирующий максимальное значение функции  $\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ , является (см. теорему 2.9.2)  $A$ -оптимальным.

Совершенно аналогично доказывается обратное утверждение о том, что из  $A$ -оптимальности следует  $D$ -оптимальность, если справедливо (2.11.6).

2. По теореме 2.2.1 для  $D$ -оптимальных планов

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = m.$$

Используя (2.11.6) и пункт 3 теоремы 2.9.2, получим

$$\begin{aligned} \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon^*) &= \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \\ &= k \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = km. \end{aligned}$$

Теорема доказана.

III. Аналитическое построение  $A$ -оптимальных планов возможно лишь в простейших случаях (см., например, [41]). При этом, опираясь на теорему 2.11.1, нетрудно проверить, что часть  $A$ -оптимальных планов совпадает с соответствующими  $D$ -оптимальными планами (например, для полиномиальной регрессии первого порядка на  $k$ -мерном кубе и тригонометрической регрессии).

При численном построении  $A$ -оптимальных планов удобно пользоваться итерационной процедурой, предложенной в § 2.10.

Если  $l = m$  (т. е. ищется минимум средней дисперсии всех параметров), то оказывается справедливым усиленный вариант теоремы 2.10.1.

**Теорема 2.11.2.** *Итерационный процесс 1 ÷ 4 (см. 2.10) сходится, причем*

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_s) = \min_{\varepsilon} \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon).$$

**Доказательство.** По теореме 2.10.1

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_s) = \text{Sp } \mathbf{D}(\tilde{\varepsilon}),$$

где план  $\tilde{\varepsilon}$  является либо вырожденным, либо оптимальным.

Покажем, что если  $l = m$ , то последовательность  $\{\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_s)\}$  не может сходиться к вырожденному плану.

Действительно, если план  $\tilde{\varepsilon}$  вырожден, то

$$\text{Sp } \mathbf{D}(\tilde{\varepsilon}) = \infty. \quad (2.11.8)$$

Но  $\varepsilon_0$  выбирается не вырожденным и, следовательно,

$$\infty > \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_0) \geq \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_1) \geq \dots \geq \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_s)$$

или

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_s) = \text{Sp } \mathbf{D}(\tilde{\varepsilon}) < \infty. \quad (2.11.9)$$

Полученное противоречие (см. (2.11.8) и (2.11.9)) доказывает теорему.



Выход из итерационного процесса при  $l=m$  можно осуществить по одному из правил

$$\alpha_s < \delta_1; \quad \frac{\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon) - \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})}{\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})} < \delta_2;$$

$$\max_{x \in X} \lambda(x) \mathbf{f}^T(x) \mathbf{D}^2(\varepsilon_s) \mathbf{f}(x) - \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_s) < \delta_3.$$

Здесь  $\delta_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) — наперед заданная «точность».

В силу единственности дисперсионной матрицы, соответствующей  $A$ -оптимальным планам, все три правила связаны между собой и эти правила практически эквивалентны.

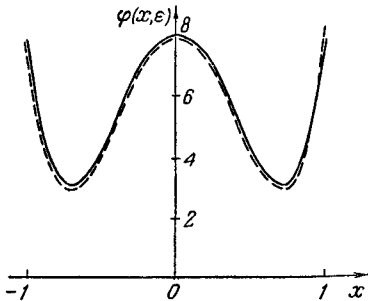
**Пример.** Пусть некоторая величина  $y$  может измеряться при  $-1 \leq x \leq 1$  и пусть

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2, \\ \lambda(x) \equiv 1.$$

Требуется найти план, минимизирующий  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon)$ .

Рассмотрим вначале аналитический метод построения, опирающийся на теорему 2.9.2\*.

Рис. 14. Поведение функции  $\varphi(x, \varepsilon)$  для точного и приближенного  $A$ -оптимального плана.



Согласно следствию из этой теоремы в точках спектра оптимального плана  $\varepsilon^*$  величина  $\varphi(x, \varepsilon^*) = \mathbf{f}^T(x) \times \times \mathbf{D}^2(\varepsilon^*) \mathbf{f}(x)$ , где  $\mathbf{f}^T(x) = \|1, x, x^2\|$ , должна равняться своему максимальному значению, равному  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon^*)$ . Функция  $\varphi(x, \varepsilon^*)$  для рассматриваемой регрессионной задачи есть полином четвертой степени, больший нуля для всех  $x$ , и следовательно, имеет лишь одну экстремальную точку, соответствующую максимуму. Отсюда, спектр плана должен состоять из этой точки и двух крайних точек  $-1$  и  $1$ . Из соображений симметрии очевидно, что координата средней точки должна равняться нулю (рис. 14) и что  $p(-1) = p(1) = p$ .

Несложные расчеты показывают, что для спектра  $-1, 0, 1$  сумма диагональных элементов равна (см. также пример из § 1.8):

$$\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon) = \frac{1}{p(1-2p)}.$$

Минимум данного выражения достигается для  $p = \frac{1}{4}$  и при этом

$$\varphi(x, \varepsilon) = 8 - 20x^2 + 20x^4.$$

Опираясь на теорему 2.9.2, нетрудно убедиться (см. рис. 14), что построенный план

$$\varepsilon^* = \left\{ \begin{array}{ccc} -1, & 0, & 1 \\ \frac{1}{4}, & \frac{1}{2}, & \frac{1}{4} \end{array} \right\}$$

является  $A$ -оптимальным. Из вида кривой  $\varphi(x, \varepsilon^*)$  вытекает, что этот план единствен.

Для данной задачи было проведено также численное построение оптимального плана. В качестве начального плана был выбран план

$$\varepsilon_0 = \left\{ \begin{array}{ccc} -\frac{1}{2}, & 0, & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3}, & \frac{1}{3}, & \frac{1}{3} \end{array} \right\}.$$

После 15 итераций значение  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_{15})$  было равно 8,01. Кривая  $\varphi(x, \varepsilon_{15})$  обозначена на рис. 14 пунктирной линией.

## § 2.12. Планы, минимизирующие среднее по области значение дисперсии оценки поверхности отклика

I. Если экспериментатора интересует общая закономерность зависимости изучаемой величины от контролируемых переменных, т. е. он может пожертвовать точностью описания в малых областях ради хорошего описания во всей области (рис. 15), то разумно потребовать, чтобы минимизировалась величина

$$\begin{aligned} \left( \int_Z dx \right)^{-1} E \left\{ \int_Z [\hat{\eta}(x, \theta) - \eta(x, \theta_{\text{ист}})]^2 dx \right\} = \\ = \left( \int_Z dx \right)^{-1} \int_Z d(x, \varepsilon) dx, \end{aligned}$$

где  $Z$ , вообще говоря, не совпадает с областью действия  $X$ . Планирование эксперимента заключается в

отыскании плана  $\varepsilon^*$ , дающего

$$\min_{\varepsilon} \int_Z d(\mathbf{x}, \varepsilon) d\mathbf{x} = \min_{\varepsilon} Q(\varepsilon).$$

В дальнейшем план  $\varepsilon^*$  мы будем называть  $Q$ -оптимальным.

II. Функционал  $Q(\varepsilon)$  удовлетворяет условиям (2.9.2) и (2.9.3). Если функции  $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) = \|f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})\|$  линейно независимы в области  $Z$ , то функционал  $Q(\varepsilon)$  удовлетворяет также условию (2.9.5) и, следовательно, для него имеет место теорема 2.9.2\*.

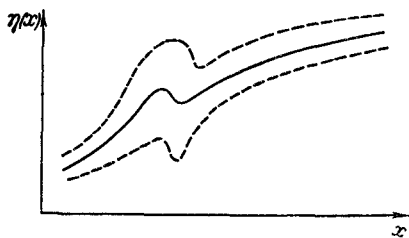


Рис. 15. Сплошной линией нанесена оценка искомой кривой, расстояние между пунктирными линиями равно  $2\sqrt{d(\mathbf{x})}$ .

При использовании результатов теоремы 2.9.2 для проверки планов на  $Q$ -оптимальность удобно использовать

следующие выражения для величины  $Q[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \times \times \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)]$ :

$$1. Q[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)] = \lambda(\mathbf{x}) \int_Z d^2(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}, \varepsilon) d\tilde{\mathbf{x}}, \quad (2.12.1)$$

где  $d(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}, \varepsilon) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})$  есть ковариация оценок поверхности отклика в точках  $\mathbf{x}$  и  $\tilde{\mathbf{x}}$ ;

$$2. Q[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)] = \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \bar{\mathbf{M}} \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (2.12.2)$$

где  $\bar{\mathbf{M}} = \int_Z \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ .

Формулы (2.12.1) и (2.12.2) легко получить, используя определение оператора  $Q$  и учитывая, что  $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \times \times \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}}) = \mathbf{f}^T(\tilde{\mathbf{x}}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ . Опираясь на (2.12.2), можно получить достаточные условия эквивалентности  $Q$ - и  $A$ -оптимальных планов и  $Q$ - и  $D$ -оптимальных планов (при  $l=m$ ).

**Теорема 2.12.1.** План  $\varepsilon^*$  является одновременно

1.  $Q$ - и  $A$ -оптимальным, если функции  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  являются ортонормированными в области  $Z$ ;

2.  $Q$ - и  $D$ -оптимальным, если  $\mathbf{D}(\varepsilon^*) \overline{\mathbf{M}} \mathbf{D}(\varepsilon^*) = k \mathbf{D}(\varepsilon^*)$ , при этом  $\max_{\mathbf{z}} Q(\varepsilon^*) = km$ , где  $k$  — некоторая константа.

**Доказательство.** 1. Если функции  $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) = \|\mathbf{f}_1(\mathbf{x}), \mathbf{f}_2(\mathbf{x}), \dots, \mathbf{f}_m(\mathbf{x})\|$  ортонормированы, то

$$\int_{\mathbf{z}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{I}_m \quad (2.12.3)$$

и

$$\mathbf{D}(\varepsilon^*) \overline{\mathbf{M}} \mathbf{D}(\varepsilon^*) = \mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{I}_m \mathbf{D}(\varepsilon^*) = \mathbf{D}^2(\varepsilon^*). \quad (2.12.4)$$

Из (2.12.4) и теоремы 2.9.2 немедленно следует справедливость пункта 1 доказываемой теоремы.

Этот же результат можно получить, опираясь непосредственно на определение  $A$ - и  $Q$ -оптимальных планов. Действительно,

$$\begin{aligned} Q(\varepsilon^*) &= \int_{\mathbf{z}} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ &= \int_{\mathbf{z}} \text{Sp} [\mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})] d\mathbf{x} = \int_{\mathbf{z}} \text{Sp} [\mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{I}_m] d\mathbf{x} = \text{Sp} \mathbf{D}(\varepsilon^*), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

2. Второй пункт теоремы доказывается совершенно аналогично теореме 2.11.1.

Теорема 2.12.1 позволяет сравнительно просто выделить планы, являющиеся одновременно  $D$ - и  $Q$ -оптимальными.

**III.** Так как  $\int_{\mathbf{z}} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} < \infty$ , если только  $\mathbf{D}(\varepsilon)$  не вырождена, то так же, как и для  $A$ -оптимальных планов, имеет место следующая теорема.

**Теорема 2.12.2.** Итерационный процесс 1-÷ 4 (см. § 2.10) сходится, причем

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \int_{\mathbf{z}} d(\mathbf{x}, \varepsilon_s) d\mathbf{x} = \min_{\varepsilon} \int_{\mathbf{z}} d(\mathbf{x}, \varepsilon) d\mathbf{x}.$$

Доказательство данной теоремы полностью аналогично доказательству теоремы 2.11.2.

**Пример.** Интересные результаты удается получить для полиномиальной регрессии на отрезке ( $\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1$ ). Оказывается (см. [42]), в данном случае спектры  $Q$ - и  $D$ -оптимальных планов совпадают, т. е. измерения следует проводить в точках, являющихся корнями полинома  $(1-x^2) \dot{P}_m(x)$ , если исследуется полином  $m$ -й степени.

Отличаются лишь веса  $p_i$ , соответствующие каждой  $i$ -й точке спектра ( $i=1, 2, \dots, m+1$ ). Если для  $D$ -оптимальных планов  $p_i = \frac{1}{m+1}$ , то для  $Q$ -оптимальных планов

$$p_i = \frac{|P_m(x_i)|^{-1}}{\sum_{i=1}^{m+1} |P_m(x_i)|^{-1}},$$

где  $P_m(x)$  —  $m$ -полином Лежандра.

## § 2.13. Экстраполяция в точку

I. Во многих экспериментальных задачах оказывается необходимым знать зависимость изучаемой величины от контролируемых переменных в тех областях, где измерения невозможны или трудно осуществимы с практической точки зрения (мала эффективность  $\lambda(x)$ ). В этих случаях не остается ничего иного, как изучить поведение интересующей нас величины в доступной нам области и затем экстраполировать полученные зависимости в недоступную область.

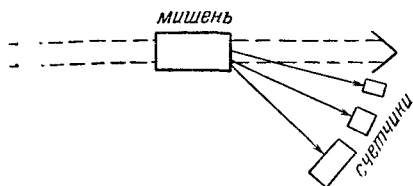


Рис. 16. Схема простейшего опыта по рассеянию элементарных частиц. Пунктирными линиями обозначен первичный пучок.

**Пример 1.** В качестве одного из многочисленных примеров можно рассмотреть эксперименты по рассеянию элементарных частиц. Известно, что для многих теоретических исследований в физике элементарных частиц необходимо знать дифференциальное сечение ( $y$ ) при нулевом угле рассеяния ( $x$ ). В то же время производить измерение дифференциального сечения при угле рассеяния, равном нулю, невозможно, так как в счетчик попадают нерассеянные частицы первичного пучка. При малых углах  $x$ , чтобы избавиться от фона нерассеянных частиц, размеры счетчиков приходится уменьшать. Это влечет за собой уменьшение числа попадающих в счетчик рассеянных частиц, что, в свою очередь, вызывает увеличение ошибки  $\sigma(y)$  в определении дифференциаль-

ного сечения рассеяния  $y$  (рис. 16). В [7] показано, что

$$\sigma^2(y_i) = \frac{\eta_{\text{ист}}^2(x_i)}{r_i},$$

где  $r_i$  — число частиц, попавших в счетчик,  $\eta_{\text{ист}}(x_i)$  — среднее значение  $y$  в области, захватываемой счетчиком. Полагая, что  $\eta_{\text{ист}}(x)$  медленно меняется в области, близкой к  $x=0$ , легко видеть, что

$$\sigma^2(y_i) \sim r_i^{-1} \sim x_i^{-2}.$$

Иными словами, вблизи нуля эффективность опыта по измерению дифференциального сечения пропорциональна  $x^2$ . Таким образом, с одной стороны, для наиболее точного определения  $\eta_{\text{ист}}(0)$  естественно стремиться расположить измерения как можно ближе к  $x=0$ , с другой стороны, это оказывается невыгодным, так как эффективность  $\lambda(x) \sim x^2$  и равна нулю при  $x=0$ . Поэтому необходимо найти компромиссное решение. Решению подобных задач и будет посвящен настоящий параграф.

II. Пусть экспериментальную зависимость необходимо экстраполировать в заданную точку  $\mathbf{x}_0$ . Очевидно, что необходимо стремиться к тому, чтобы дисперсия  $d(\mathbf{x}_0, \varepsilon)$  предсказываемого значения  $\hat{\eta}(\mathbf{x}_0, \theta)$  была как можно меньше. Поэтому будем считать оптимальным тот план  $\varepsilon^*$ , который минимизирует величину  $d(\mathbf{x}_0, \varepsilon)$ . Дисперсия  $d(\mathbf{x}_0, \varepsilon)$  при заданном невырожденном плане  $\varepsilon$  равна  $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}_0)$  (см. § 1.3). Очевидно, что

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) (\mathbf{A} + \mathbf{B}) \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) &= \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) \mathbf{A} \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) + \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) \mathbf{B} \mathbf{f}(\mathbf{x}_0), \\ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) k \mathbf{A} \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) &= k \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) \mathbf{A} \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \end{aligned} \quad (2.13.1)$$

и

$$\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) \mathbf{A} \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \geq 0 \quad (2.13.2)$$

для любой положительно определенной матрицы  $\mathbf{A}$ . Из (2.13.1) и (2.13.2) следует, что для планов, минимизирующих дисперсию в заданной точке, применимы результаты, полученные в §§ 2.9 и 2.10. В дальнейшем особо важное значение для нас будет иметь теорема 2.9.2. Фигурирующая в формулировке этой теоремы величина  $L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)]$  в данном случае имеет вид

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon)] = d^2(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, \varepsilon). \quad (2.13.3)$$

III. Если на функции  $f^T(\mathbf{x}) = \|f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})\|$  и эффективность  $\lambda(\mathbf{x})$  наложены некоторые ограничения в области  $X$ , где возможны измерения, то класс планов  $\varepsilon$ , среди которых необходимо искать оптимальный план  $\varepsilon^*$ , можно сузить.

**Теорема 2.13.1.** Если оптимальный план  $\varepsilon^*$  имеет число точек  $n = m$ , то затраты в  $i$ -й точке плана должны быть равны

$$\rho_i = \frac{|\mathcal{L}_i(\mathbf{x}_0)| \lambda^{-1/2}(\mathbf{x}_i)}{\sum_{j=1}^m |\mathcal{L}_j(\mathbf{x}_0)| \lambda^{-1/2}(\mathbf{x}_j)}, \quad (2.13.4)$$

где

$$\mathcal{L}_i(y) = \frac{|F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{i-1}, \mathbf{x}, \mathbf{x}_{i+1}, \dots, \mathbf{x}_m)|}{|F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m)|},$$

$$F(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m) = \|f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \dots, f(\mathbf{x}_m)\|.$$

**Доказательство.** Согласно следствию 1 из теоремы 2.9.2 в точках плана

$$\lambda(\mathbf{x}_i) d^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_0, \varepsilon) = d(\mathbf{x}_0, \varepsilon) = \text{const} \quad (i=1, 2, \dots, m). \quad (2.13.5)$$

Перейдем к интерполяционным полиномам Лагранжа [22].

Нетрудно проверить (см. § 1.3), что

$$\eta(\mathbf{x}, \theta) = \sum_{i=1}^m y_i \mathcal{L}_i(\mathbf{x}),$$

$$d(\mathbf{x}, \varepsilon) = \sum_{i=1}^m \mathcal{L}_i^2(\mathbf{x}) / \rho_i \lambda(\mathbf{x}_i), \quad (2.13.6)$$

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0, \varepsilon) = \sum_{i=1}^m \mathcal{L}_i(\mathbf{x}) \mathcal{L}_i(\mathbf{x}_0) / \rho_i \lambda(\mathbf{x}_i).$$

Так как  $\mathcal{L}_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$  ( $\delta_{ii} = 1$ ;  $\delta_{ij} = 0$ ,  $i \neq j$ ), то:

$$\lambda(\mathbf{x}_i) d^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_0, \varepsilon) = \frac{\mathcal{L}_i^2(\mathbf{x}_0)}{\rho_i \lambda(\mathbf{x}_i)} = \text{const}.$$

Отсюда и из условия нормировки  $\sum_{i=1}^m \rho_i = 1$ :

$$\rho_i = \frac{|\mathcal{L}_i(\mathbf{x}_0)| \lambda^{-1/2}(\mathbf{x}_i)}{\sum_{i=1}^m |\mathcal{L}_i(\mathbf{x}_0)| \lambda^{-1/2}(\mathbf{x}_i)},$$

что и доказывает теорему.

IV. Наиболее законченные результаты можно получить (см. [39], [40], [43], [44]), когда имеется единственная контролируемая переменная  $x$ .

Пусть система функций

$$\lambda^{1/2}(x) \mathbf{f}^T(x) = \|\lambda^{1/2}(x) f_1(x), \lambda^{1/2}(x) f_2(x), \dots, \lambda^{1/2}(x) f_m(x)\|$$

— чебышевская на отрезке  $[a, b]$ . Тогда (см. [45]) на отрезке  $[a, b]$  существует полином

$$u(x) = \sum_{\alpha=1}^m a_{\alpha}^* \lambda^{1/2}(x) f_{\alpha}(x)$$

такой, что:

- 1)  $|u(x)| \leq 1$ ,  $x \in [a, b]$  и
- 2) имеется  $m$  точек  $a \leq x_1^* \leq x_2^* \leq \dots \leq x_m^* \leq b$ , в которых

$$u(x_i^*) = (-1)^{m-i}.$$

**Теорема 2.13.2.** Если система функций  $\lambda^{1/2}(x) \mathbf{f}(x)$  — чебышевская на отрезке  $[a, b]$ , то план  $\varepsilon^*$ , сосредоточенный в точках  $x_1^*, x_2^*, \dots, x_m^*$ , с распределением затрат

$$p_i^* = \frac{|\mathcal{L}_i(x_0)| \lambda^{-1/2}(x_i)}{\sum_{j=1}^m |\mathcal{L}_j(x_0)| \lambda^{-1/2}(x_j)} \quad (i=1, 2, \dots, m) \quad (2.13.7)$$

минимизирует дисперсию оценки в заданной точке  $|x_0| > 1$ .

Доказательство. Рассмотрим случай, когда  $\lambda(x) \equiv 1$ . Остальные случаи сведутся к этому заменой  $\Phi(x) = \lambda^{1/2}(x) \mathbf{f}(x)$ .

Предположим, что оптимальный план из  $m$  точек существует. Тогда по теореме 2.13.1 затраты должны быть выбраны согласно (2.13.7). Согласно (2.13.6)

$$\begin{aligned} d(x, x_0, \varepsilon) &= \sum_{i=1}^m p_i^{-1} \mathcal{L}_i(x) \mathcal{L}_i(x_0) = \\ &= \sum_{j=1}^m |\mathcal{L}_j(x_0)| \sum_{i=1}^m (-1)^{m-i} \mathcal{L}_i(x). \end{aligned} \quad (2.13.8)$$

В (2.13.8) мы использовали явный вид интерполяционного полинома  $\mathcal{L}_j(x)$  и тот факт, что для чебышевской системы функций определитель  $|F(x_1, x_2, \dots, x_m)|$  имеет один и тот же знак (см. (2.3.5)) для любых  $a \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_m \leq b$  (напомним, что  $|x_0| > 1$ ).



Полином  $u(x)$ , определенный выше, можно представить в виде

$$u(x) = \sum_{i=1}^m (-1)^{m-i} \mathcal{L}_i(x), \quad (2.13.9)$$

где  $\mathcal{L}_i(x)$  — интерполяционные полиномы, построенные на точках  $x_1^*$ ,  $x_2^*$ , ...,  $x_m^*$ .

Согласно определению

$$|u(x)| \leq 1 \quad \text{и} \quad |u(x_i^*)| = 1. \quad (2.13.10)$$

Сравнивая (2.13.8) и (2.13.9), мы видим, что

$$d(x, x_0, \varepsilon) = cu(x).$$

Отсюда и из (2.13.10)

$$d(x_i^*, x_0, \varepsilon) = c$$

и

$$d(x, x_0, \varepsilon) \leq c, \quad x \neq x_i^*.$$

Поэтому для доказательства теоремы достаточно показать (см. теорему 2.9.2), что

$$d(x_0, \varepsilon) = \max_x d^2(x, x_0, \varepsilon) = d^2(x_i^*, x_0, \varepsilon).$$

Из (2.13.6), (2.13.7) и (2.13.8) следует:

$$d(x_0, \varepsilon) = \sum_{i=1}^m \mathcal{L}_i^2(x_0) \frac{\sum_{j=1}^m |\mathcal{L}_j(x_0)|}{|\mathcal{L}_j(x_0)|} = \left[ \sum_{i=1}^m |\mathcal{L}_i(x_0)| \right]^2$$

и

$$\begin{aligned} d^2(x_i^*, x_0, \varepsilon) &= \left[ \sum_{j=1}^m |\mathcal{L}_j(x_0)| \cdot \sum_{i=1}^m (-1)^{m-i} \delta_{ij} \right]^2 = \\ &= \left[ \sum_{j=1}^m |\mathcal{L}_j(x_0)| \right]^2. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$d(x_0, \varepsilon^*) = d^2(x_i^*, x_0, \varepsilon), \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

что и доказывает теорему.

Отметим, что координаты точек, в которых необходимо производить измерения, для оптимального плана не зависят от положения  $x_0$ . При перемещении  $x_0$  меняется лишь размещение затрат (см. (2.13.7)).

**Пример 2.** Пусть  $f^T(x) = \|1, x, \dots, x^{m-1}\|$ ,  $\lambda(x) \equiv 1$  и  $[a, b] = [-1, 1]$ . Как известно, алгебраическим многочленом, наименее отклоняющимся от нуля, является полином Чебышева первого рода (см. [22])

$$T_{m-1}(x) = \frac{1}{2^{m-2}} \cos [(m-1) \arccos x].$$

Этот многочлен на отрезке  $[-1, 1]$  имеет экстремальные значения  $-1$  и  $1$  и достигает этих экстремальных значений поочередно в точках

$$x_i^* = \cos \frac{(m-i)\pi}{m-1} \quad (i = 1, 2, \dots, m).$$

Так как точек  $x_i^*$ , где  $|T_{m-1}(x)|$  достигает своего наибольшего значения, всего  $m$ , то план, сосредоточенный в них, — единственный (точки плана могут быть расположены только там, где  $d(x, x_0, \varepsilon) = cT_{m-1}(x)$  достигает своего максимума.

Размещение затрат определяется формулой (2.13.7). В качестве конкретного примера выберем

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2.$$

Если требуется знать оценку функции в точке  $x=2$ , то оптимальный план имеет вид

$$\varepsilon^* = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = 1 \\ p_1 = \frac{1}{7}; \quad p_2 = \frac{3}{7}; \quad p_3 = \frac{3}{7} \end{array} \right\}.$$

Дисперсия оценки кривой  $\eta(x, \theta)$  при  $x=2$  для оптимального плана равна  $d(2, \varepsilon^*) = 49$ .

При равномерном плане

$$\varepsilon = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = 1 \\ p_i = \frac{1}{3} \quad (i = 1, 2, 3) \end{array} \right\},$$

та же дисперсия равна  $d(2, \varepsilon) = 57$ .

Интересно, что увеличение числа точек в спектре равномерного плана приводит к понижению точности определения оценки  $\eta(x, \theta)$  (рис. 17). При  $n=50$   $d(2, \varepsilon) \cong 165$ .

**Пример 3.** Во многих случаях при малом числе неизвестных параметров задачу экстраполяции в точку можно

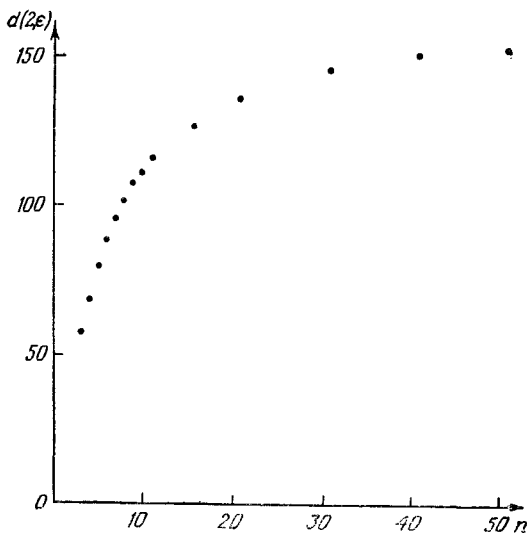


Рис. 17. Рост дисперсии предсказываемого значения поверхности отклика в точке  $x=2$  при увеличении числа точек в спектре равномерного плана

решать геометрическим путем ([40]). Для этого надо отыскать кривую

$$u(x) = \lambda^{1/2}(x) \sum_{\alpha=1}^m a_{\alpha} f_{\alpha}(x),$$

которая вписывалась бы внутрь коридора  $[-1, 1]$ .

Пусть

$$\eta_1(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x$$

и

$$\lambda(x) = x^2, \quad 0 \leq x \leq 1.$$

Требуется найти план, минимизирующий  $d(0, \epsilon)$ . Сформулированная регрессионная задача очень часто встречается в ситуациях, изложенных в примере 1 данного параграфа.

Обратим внимание на то, что система функций

$$\lambda^{1/2}(x) f_1(x) = x, \quad \lambda^{1/2}(x) f_2(x) = x^2, \quad \lambda^{1/2}(x) f_3(x) = x^3$$

не является чебышевской.

В данном конкретном случае вместо того чтобы вписать

$$u(x) = \lambda^{1/2}(x) \sum_{\alpha=1}^3 a_{\alpha} f_{\alpha}(x)$$

в постоянный коридор  $\pm 1$ , удобнее вписать

$$\tilde{u}(x) = \lambda^{-1/2}(x) u(x)$$

в коридор  $\pm \lambda^{-1/2}(x)$ .

На рис. 18 представлена прямая, которая имеет две общие точки с границами коридора. Координаты точек соприкосновения 0,414 : 1.

Если мы хотим знать оценку  $\hat{\eta}(x, \theta)$  с наименьшей дисперсией в

точке  $x=0$ , то распределение затрат должно быть

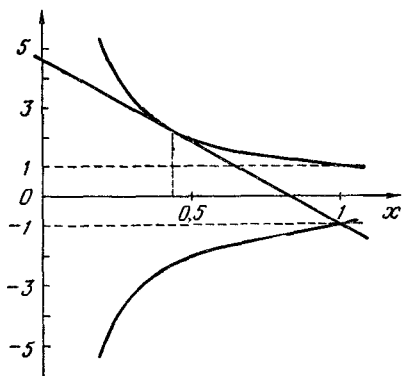


Рис. 18. Геометрическое построение плана, минимизирующего дисперсию регрессионной кривой в заданной точке.

$$p_1 = \frac{|\mathcal{L}_1(0)| \lambda^{-1/2}(x_1)}{|\mathcal{L}_1(0)| \lambda^{-1/2}(x_1) + |\mathcal{L}_2(0)| \lambda^{-1/2}(x_2)} = 0,71$$

и

$$p_2 = \frac{|\mathcal{L}_2(0)| \lambda^{-1/2}(x_2)}{|\mathcal{L}_1(0)| \lambda^{-1/2}(x_1) + |\mathcal{L}_2(0)| \lambda^{-1/2}(x_2)} = 1 - p_1 = 0,29,$$

где интерполяционные полиномы равны

$$\mathcal{L}_i(x) = \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad (i=1, 2; \quad j \neq i).$$

Дисперсия кривой  $\hat{\eta}(x, \theta)$  в точке  $x=0$  оказывается для оптимального плана равной

$$d(0, \varepsilon^*) = \sum_{i=1}^2 \mathcal{L}_i^2(0) / p_i \lambda(x_i) = 14,2.$$

Если кривую  $\hat{\eta}(x, \theta)$  требуется экстраполировать в иные точки, например  $x_0 < 0$ , то спектр плана остается прежним, а затраты в точках  $x_1$  и  $x_2$  будут определяться отношением

$$\frac{F_1}{p_2} = \frac{|\mathcal{L}_1(x_0)| \lambda^{1/2}(x_2)}{|\mathcal{L}_2(x_0)| \lambda^{1/2}(x_1)} = \frac{1-x_0}{0,414-x_0} \cdot 0,242.$$

V. Численные методы построения планов, минимизирующих дисперсию  $\hat{\eta}(x, \theta)$  в заданной точке  $x_0$ , не принадлежащей области действия, практически идентичны численным методам построения  $A$ - и  $D$ -оптимальных планов. Как и ранее, наиболее удобным методом является итерационный метод построения оптимальных планов.

Если планы  $\varepsilon_s$  сходятся к плану  $\tilde{\varepsilon}$ , содержащему  $m$  точек, то размещение затрат рекомендуется уточнить по формуле (2.13.4).

## § 2.14. Квадратичные потери

Пусть эксперимент  $\mathfrak{E}_1$  предпочтительнее эксперимента  $\mathfrak{E}_2$  ( $\mathfrak{E}_1 \succ \mathfrak{E}_2$ ), если

$$E[W/\mathfrak{E}_1] < E[W/\mathfrak{E}_2].$$

Здесь  $E$  — оператор математического ожидания,  $W = (\hat{\theta} - \theta)^T Q (\hat{\theta} - \theta)$ ,  $Q$  — положительно полуопределенная матрица размером  $m \times m$ . Величина  $E[W/\mathfrak{E}]$  обычно называется квадратичными потерями (см. [26]) при эксперименте  $\mathfrak{E}$ .

Если эксперимент  $\mathfrak{E}$  задан, то квадратичные потери минимальны, когда

$$\hat{\theta} = M^{-1}(\mathfrak{E}) Y, \quad (2.14.1)$$

где  $M(\mathfrak{E})$  и  $Y$  определяются формулами (1.3.7) и (1.3.8). В этом легко убедиться, если учесть, что матрицу  $Q$  можно представить в виде  $CC^T$  (см. теорему 1.1.9). При этом  $W = (\hat{\theta} - \theta)^T CC^T (\hat{\theta} - \theta)$ , и задача становится эквивалентной отысканию минимума:

$$E(W) = E[(\hat{t} - t)^T (\hat{t} - t)] = \text{Sp } D(\hat{t}), \quad (2.14.2)$$

где  $t = C^T \theta$ . В силу следствия 4 теоремы 1.3.2 наилучшая линейная оценка (2.14.1) минимизирует (2.14.2) при заданном эксперименте.

Мы должны выбрать такой план эксперимента, который бы минимизировал  $E(W)$ , если оценки строятся по правилу (2.14.1). Так как квадратичные потери можно представить в виде

$$E(W) = \text{Sp } \mathbf{D}(\hat{\theta}) = \text{Sp } \mathbf{D}(\hat{\theta}) \mathbf{Q},$$

то план  $\varepsilon_1 \succ \varepsilon_2$ , если

$$\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_1) \mathbf{Q} < \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon_2) \mathbf{Q}. \quad (2.14.3)$$

Проверим, что оператор, действующий в (2.14.3) на матрицу  $\mathbf{D}(\varepsilon)$ , удовлетворяет требованиям (2.9.2), (2.9.3) и (2.9.7) или (2.9.4).

Действительно,

$$\text{Sp}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \mathbf{Q} = \text{Sp } \mathbf{A} \mathbf{Q} + \text{Sp } \mathbf{B} \mathbf{Q},$$

$$\text{Sp}(k\mathbf{A}) \mathbf{Q} = k \text{Sp } \mathbf{A} \mathbf{Q}$$

для произвольных матриц  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  размером  $m \times m$ ,  $\text{Sp } \mathbf{A} \mathbf{B} > 0$  для любой положительно определенной матрицы  $\mathbf{A}$  и  $\text{Sp } \mathbf{A} \mathbf{Q} \geq 0$  для любой положительно полуопределенной матрицы  $\mathbf{A}$ .

Отсюда следует, что развитый в § 2.9 и § 2.10 аппарат построения оптимальных планов применим к рассматриваемому критерию сравнения экспериментов.

Отметим, что при  $\mathbf{Q} = \mathbf{I}_m$ , где  $\mathbf{I}_m$  — единичная матрица, мы приходим к уже рассмотренной выше  $\mathbf{A}$ -оптимальности. Если  $Q_{\gamma\gamma} = 1$  и  $Q_{\alpha\beta} = 0$ ,  $\alpha \neq \gamma$  и  $\beta \neq \gamma$ , то мы приходим к случаю, когда для экспериментатора особый интерес представляет параметр  $\theta_\gamma$  и именно  $\mathbf{D}(\hat{\theta}_\gamma)$  должна быть наименьшей. Дальнейший перечень частных случаев, применяемых на практике, читатель может продолжить самостоятельно.

**Пример.** Остановимся на случае

$$Q_{\alpha\beta} = Q_\alpha \delta_{\alpha\beta}.$$

Выбор подобной матрицы  $\mathbf{Q}$  соответствует тому, что потери за счет неточного определения оценки параметра — свои для каждого параметра и что потери за счет связи оценок различных параметров между собой отсутствуют. При этом

$$L[\mathbf{D}(\varepsilon)] = \text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{Q} = \sum_{\alpha=1}^m Q_\alpha D_{\alpha\alpha}(\varepsilon).$$

Рассмотрим случай одномерной полиномиальной регрессии второго порядка на отрезке  $[-1, 1]$ ,  $\lambda(x) \equiv 1$ . Очевидно, что при  $Q_{\alpha\alpha} \neq 0$ ,  $\alpha=1, 2, 3$ , оптимальный план должен иметь вид (ср. с примером из § 2.11):

$$\varepsilon = \left\{ \begin{array}{ccc} -1; & 0; & 1 \\ p; & 1-2p; & p \end{array} \right\}.$$

Непосредственными расчетами нетрудно проверить, что

$$\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon) \mathbf{Q} = \frac{Q_{11}}{1-2p} + \frac{Q_{22}}{2p} + \frac{Q_{33}}{2p(1-2p)}.$$

Дифференцируя данное выражение по  $p$  и приравнявая производную нулю, можно найти оптимальный план. Например, при  $Q_{11}=1$ ,  $Q_{22}=2$ ,  $Q_{33}=4$  оптимальное значение доли измерений для крайних точек равно

$$p = \frac{12 - \sqrt{120}}{4} \simeq 0,26.$$

Кривая  $\varphi(x, \varepsilon^*)$  при данном  $p$ , как нетрудно проверить, имеет вид

$$\varphi(x, \varepsilon^*) = 69x^4 - 69x^2 + 22.$$

Ее максимальные значения на отрезке  $[-1, 1]$  достигаются в точках спектра плана  $\varepsilon^*$  и равны  $\varphi(-1, \varepsilon^*) = \varphi(0, \varepsilon^*) = \varphi(1, \varepsilon^*) = 22$ . Элементарные расчеты показывают, что  $\text{Sp } \mathbf{D}(\varepsilon^*) \mathbf{Q} = 22$ . Таким образом, в силу теоремы 2.9.2 план  $\varepsilon^*$  является оптимальным.

## ГЛАВА 3

### СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ ТОЧНЫХ ОПТИМАЛЬНЫХ ПЛАНОВ

#### § 3.1. Дискретные планы

В гл. 2 мы изучали свойства только непрерывных оптимальных планов. Эти планы можно считать приближенными по отношению к дискретным планам  $\epsilon(N)$  (см. § 1.10). В данном параграфе обсуждается зависимость точности приближения дискретных планов непрерывными от возможного числа измерений. Для тех случаев, когда эта точность не может считаться удовлетворительной, даются некоторые рекомендации по построению точных оптимальных планов. Под точными оптимальными планами здесь и в дальнейшем, если это не будет оговорено специально, подразумеваются планы, оптимальные при заданном  $N$ .

I. Пусть нормированный план  $\epsilon_1$  лучше нормированного плана  $\epsilon_2$ , если

$$\tilde{L} [M(\epsilon_1)] > \tilde{L} [M(\epsilon_2)], \quad (3.1.1)$$

где  $M(\epsilon)$  — информационная матрица, соответствующая плану  $\epsilon$ , а функционал  $\tilde{L}$  удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} \tilde{L} (A + B) &\geq \tilde{L} (A), \\ \tilde{L} (kA) &= k\tilde{L} (A), \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

где  $A$  и  $B$  — положительно полуопределенные матрицы. Предположим, что  $\epsilon^*$  — непрерывный нормированный план, максимизирующий  $\tilde{L} [M(\epsilon)]$  на множестве непрерывных планов, а  $\epsilon^*(N)$  — нормированный точный план, макси-



мизирующий  $\tilde{L} [M(\epsilon(N))]$  на множестве дискретных планов, и пусть  $M(\epsilon^*)$  и  $M(\epsilon^*(N))$  — их информационные матрицы. Так как  $\max_{\epsilon(N)} \tilde{L} [M(\epsilon^*(N))]$  ищется на более узком множестве, чем  $\max_{\epsilon} \tilde{L} [M(\epsilon)]$ , то очевидно, что

$$\max_{\epsilon(N)} \tilde{L} [M(\epsilon(N))] \leq \max_{\epsilon} \tilde{L} [M(\epsilon)].$$

II. Между обеими указанными выше величинами  $\max_{\epsilon(N)} \tilde{L} [M(\epsilon(N))]$  и  $\max_{\epsilon} \tilde{L} [M(\epsilon)]$  можно найти связь, которая оказывается весьма полезной при построении точных планов [46].

**Теорема 3.1.1.** Если суммарное число возможных измерений есть  $N$ , а  $n$  — число точек в спектре плана  $\epsilon^*$ , то

$$\frac{N-n}{N} \tilde{L} [M(\epsilon^*)] \leq \tilde{L} [M(\epsilon^*(N))] \leq \tilde{L} [M(\epsilon^*)]. \quad (3.1.3)$$

Доказательство. Пусть  $[c]^+$  означает наименьшее целое число, удовлетворяющее неравенству  $[c]^+ \geq c$ . Тогда в силу (3.1.2) можно записать

$$\begin{aligned} \tilde{L} \left[ \sum_{i=1}^n [N\rho_i^*]^+ f(x_i^*) f^T(x_i^*) \right] &\geq \\ &\geq \tilde{L} \left[ \sum_{i=1}^n N\rho_i^* f(x_i^*) f^T(x_i^*) \right] = N \tilde{L} [M(\epsilon^*)]. \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Пусть  $N_1 > N_2$ . Рассмотрим эксперимент из  $N_1$  измерений, в котором  $N_2$  измерения проводятся по плану  $\epsilon^*(N_2)$ , а  $(N_1 - N_2)$  — по любому плану  $\epsilon(N_1 - N_2)$ . Согласно (3.1.2)

$$\begin{aligned} \tilde{L} [N_2 M(\epsilon^*(N_2)) + (N_1 - N_2) M(\epsilon(N_1 - N_2))] &\geq \\ &\geq \tilde{L} [N_2 M(\epsilon^*(N_2))]. \end{aligned}$$

Отсюда и из определения плана  $\epsilon^*(N_1)$  немедленно следует

$$\tilde{L} [N_1 M(\epsilon^*(N_1))] \geq \tilde{L} [N_2 M(\epsilon^*(N_2))].$$

Из последнего неравенства и из (3.1.4) —

$$(N+n) \tilde{L} [M(\epsilon^*(N+n))] \geq \\ \geq \tilde{L} \left[ \sum_{i=1}^n [Np_i^*]^+ f(x_i) f^T(x_i) \right] \geq N \tilde{L} [M(\epsilon^*)] \quad (3.1.5)$$

или

$$(N+n) \tilde{L} [M(\epsilon^*)] \geq \\ \geq (N+n) \tilde{L} [M(\epsilon^*(N+n))] \geq N \tilde{L} [M(\epsilon^*)]. \quad (3.1.6)$$

В (3.1.5) учитывалось, что

$$\sum_{i=1}^n [Np_i^*]^+ \leq N+n.$$

Из (3.1.6) следует

$$\tilde{L} [M(\epsilon^*)] \geq \tilde{L} [M(\epsilon^*(N+n))] \geq \frac{N}{N+n} \tilde{L} [M(\epsilon^*)].$$

Проведя замену  $N+n = \tilde{N}$ , легко убедиться в справедливости доказываемой теоремы.

Знак равенства в правой части (3.1.4) имеет место тогда и только тогда, когда все  $Np_i^*$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) — целые числа хотя бы для одного оптимального плана  $\epsilon^*$ . В этом случае  $\epsilon^*$  и  $\epsilon^*(N)$  совпадают. В иных случаях  $\tilde{L} [M(\epsilon^*(N))] < \tilde{L} [M(\epsilon^*)]$ . Как уже отмечалось выше (см. § 1.10), построение точных оптимальных планов  $\epsilon^*(N)$  — задача значительно более трудоемкая, чем отыскание  $\epsilon^*$ . К тому же для каждого  $N$  необходимо, вообще говоря, искать свое решение. Поэтому выгодно найти процедуру исправления непрерывного плана  $\epsilon^*$  на близкий ему дискретный  $\epsilon^*(N)$ , который бы по значению  $\tilde{L} [M(\epsilon^*(N))]$  мало отличался от плана  $\epsilon^*$ .

В качестве одной из возможных является следующая процедура. Строится план  $\tilde{\epsilon}(N)$  с размещением затрат  $p_i \sim [(N-n)p_i^*]^+$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ). Для этого плана

$\sum_{i=1}^n [(N-n)p_i^*]^+ < N$ , поэтому оставшиеся «неиспользован-

ные» средства  $N - \sum_{i=1}^n [(N-n)p_i^*]^+$  можно, например,

добавить по одному в точки, где

$$(N-n) p_j^* \geq [(N-n) p_j^*]^+ - \frac{1}{2}.$$

Остаток  $N - \sum_{i=1}^n [(N-n) p_i^*]^+$  можно распределить и между другими точками  $x \in X$ . Построенный план обозначим через  $\tilde{e}$ .

*Следствие.* Точный оптимальный план  $e^*(N)$  и план  $\tilde{e}(N)$ , полученный округлением непрерывного оптимального плана, связаны между собой неравенством

$$\tilde{L} [M(e^*(N))] - \tilde{L} [M(\tilde{e}(N))] \leq \frac{n}{N} \tilde{L} [M(e^*)]. \quad (3.1.7)$$

Неравенство (3.1.7) можно получить, если учесть, что

$$\begin{aligned} N \tilde{L} [M(\tilde{e}(N))] &\geq \tilde{L} \left[ \sum_{i=1}^n [(N-n) p_i^*]^+ f(x_i^*) f^T(x_i^*) \right] \geq \\ &\geq \tilde{L} \left[ \sum_{i=1}^n (N-n) p_i^* f(x_i^*) f^T(x_i^*) \right] = (N-n) \tilde{L} [M(e^*)] \end{aligned}$$

или

$$\tilde{L} [M(e^*(N))] \geq \tilde{L} [M(\tilde{e}(N))] \geq \frac{N-n}{N} \tilde{L} [M(e^*)].$$

Отсюда и из (3.1.3)

$$\tilde{L} [M(e^*(N))] - \tilde{L} [M(\tilde{e}(N))] \leq \frac{n}{N} \tilde{L} [M(e^*)],$$

что и требовалось получить.

Если для данной задачи существует несколько непрерывных оптимальных планов, то неравенство (3.1.7) говорит о том, что выгоднее всего, исключая те редкие случаи, когда  $e(N)$  и какой-либо непрерывный оптимальный план совпадают (т. е. числа  $p_i N_i$  ( $i=1, 2, 3, \dots, n$ ) являются целыми), округлять до дискретного тот план  $e^*$ , спектр которого содержит наименьшее число точек. Напомним, что для большинства критериев оптимальности минимальное число точек спектра  $n_0$  для непрерывных оптимальных планов может быть заключено в пределах

$$m \leq n_0 \leq \frac{m(m+1)}{2}.$$

III. Проверим, какие критерии сравнения планов удовлетворяют требованиям (3.1.2) и (3.1.3).

1. Пусть план  $e_1 \succ e_2$ , если

$$|M(e_1)| > |M(e_2)|.$$

Непосредственно операция взятия определителя требованиям (3.1.2) и (3.1.3) не удовлетворяет. Однако данный критерий сравнения можно заменить на эквивалентный ему:

$$|M(e_1)|^{1/m} > |M(e_2)|^{1/m}, \quad (3.1.8)$$

где  $m$  — число неизвестных параметров. Способ сравнения (3.1.8) уже удовлетворяет требованиям (3.1.2) и (3.1.3). Из (3.1.8) и (3.1.3) нетрудно получить, что  $D$ -оптимальные планы — точные и непрерывные — связаны соотношением:

$$\left(\frac{N-n}{N}\right)^m |M(e^*)| \leq |M(e^*(N))| \leq |M(e^*)|.$$

2. Пусть план  $e_1 \prec e_2$ , если

$$\max_{x \in Z} d(x, e_1) < \max_{x \in Z} d(x, e_2). \quad (3.1.9)$$

Заменим критерий (3.1.9) на эквивалентный ему

$$\min_{x \in Z} d^{-1}(x, e_1) > \min_{x \in Z} d^{-1}(x, e_2).$$

Проверим, что оператор

$$\tilde{L}(A) = \min_{x \in Z} [f^T(x) A^{-1} f(x)]^{-1}$$

удовлетворяет (3.1.2). Действительно, если  $A$  и  $B$  — положительно полуопределенные матрицы, то  $(A+B)^{-1} \leq A^{-1}$ , следовательно,

$$f^T(x) (A+B)^{-1} f(x) \leq f^T(x) A^{-1} f(x),$$

или, в согласии с первым условием из (3.1.2),

$$\min_{x \in Z} [f^T(x) (A+B)^{-1} f(x)]^{-1} \geq \min_{x \in Z} [f^T(x) A^{-1} f(x)]^{-1}.$$

Справедливость второго условия из (3.1.2) следует из того, что

$$f^T(x) (kA)^{-1} f(x) = k^{-1} f^T(x) A^{-1} f(x).$$

Отсюда

$$\min_{x \in Z} [f^T(x) (kA)^{-1} f(x)]^{-1} = \min_{x \in Z} [f^T(x) A^{-1} f(x)]^{-1} \cdot k.$$

Из (3.1.3) имеем:

$$\frac{N}{N-n} \max_{x \in Z} d(x, \varepsilon^*) \geq \max_{x \in Z} d(x, \varepsilon(N)) \geq \max_{x \in Z} d(x, \varepsilon^*).$$

3. Обратимся к линейным критериям сравнения планов. В частности, к этим критериям относятся  $A$ -критерий,  $Q$ -критерий, критерий сравнения планов при экстраполяции в точку.

Итак, пусть  $\varepsilon_1 \prec \varepsilon_2$ , если

$$L[D(\varepsilon_1)] < L[D(\varepsilon_2)]$$

и оператор  $L$  удовлетворяет требованиям (2.9.2) — (2.9.4). Положим

$$\tilde{L}[M(\varepsilon)] = \{L[M^{-1}(\varepsilon)]\}^{-1}.$$

Так как  $L[(A+B)^{-1}] \leq L[A^{-1}]$ , то

$$\tilde{L}(A+B) = \{L[(A+B)^{-1}]\}^{-1} \geq \{L[A^{-1}]\}^{-1} = \tilde{L}(A).$$

Иными словами, первое условие (3.1.2) выполняется. Выполнение второго условия (3.1.2) следует из того, что

$$L(kA) = kL(A).$$

Неравенства (3.1.3) для оператора  $L$  можно переписать в виде

$$\frac{N}{N-n} L[D(\varepsilon^*)] \geq L[D(\varepsilon^*(N))] \geq L[D(\varepsilon^*)].$$

Например, для  $A$ -критерия данная цепочка неравенств выглядит следующим образом:

$$\frac{N}{N-n} \text{Sp } D(\varepsilon^*) \geq \text{Sp } D(\varepsilon^*(N)) \geq \text{Sp } D(\varepsilon^*).$$

IV. Для рассмотренных в п. III критериев сравнения экспериментов применим способ округления непрерывных оптимальных планов до дискретных планов, изложенный в пояснениях к следствию теоремы 3.1.1. Полученные планы  $\tilde{\varepsilon}(N)$  будут удовлетворять (3.1.7). Например, для  $D$ -критерия (3.1.7) принимает вид

$$|M(\varepsilon^*(N))| - |M(\tilde{\varepsilon}(N))| \leq \left[1 - \left(\frac{N-n}{N}\right)^m\right] |M(\varepsilon^*)|,$$

для  $A$ -критерия —

$$\text{Sp } D(\tilde{\varepsilon}(N)) - \text{Sp } D(\varepsilon^*(N)) \leq \frac{n}{N-n} \text{Sp } D(\varepsilon^*).$$

Очевидно, что план  $\tilde{\varepsilon}(N)$  по своим показателям тем ближе к  $\varepsilon^*(N)$ , чем больше  $N$  и меньше  $n$ . Если  $N \gg n$ , то в большинстве практических случаев трудоемкую операцию поиска плана  $\varepsilon^*(N)$  можно без существенных потерь в точности полученных результатов заменить во много раз более простой операцией округления табличного плана  $\varepsilon^*$ . При  $N < n$  указанный способ округления не применим вообще.

### § 3.2. Свойства и методы построения точных $D$ -оптимальных планов

Во многих исследованиях, особенно в экспериментах на действующих производственных установках, ввиду высокой стоимости каждого измерения, число измерений стремятся свести к минимуму. В подобных случаях поиск точных оптимальных планов становится необходимым.

I. Дискретные планы не обладают многими свойствами непрерывных планов, которые были крайне полезны при построении оптимальных планов. Например,  $D$ -оптимальные и минимаксные точные планы оказываются не эквивалентными при произвольном  $N$  даже при  $\lambda(x) \equiv \text{const}$ . При произвольном  $N$  не выполняется теорема 2.9.2, число точек в спектре оптимального дискретного плана может превышать в общем случае верхнюю границу для числа точек в спектре  $n = \frac{m(m+1)}{2}$  непрерывных оптимальных планов.

**Пример 1** [37]. Рассмотрим линейную регрессию на отрезке:

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x, \quad \lambda(x) \equiv 1, \quad -1 \leq x \leq 1.$$

Пусть  $N=3$ . Опираясь на явный вид дисперсионной матрицы, легко проверить, что

$$\varepsilon_1(3) = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1; \quad x_2 = 0; \quad x_3 = 1 \\ \rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \frac{1}{3} \end{array} \right\}$$

минимизирует  $\max_x d(x, \varepsilon(3))$ , а план

$$\varepsilon_2(3) = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1, \quad x_2 = 1 \\ \rho_1 = \frac{1}{3}, \quad \rho_2 = \frac{2}{3} \end{array} \right\}$$

минимизирует значение определителя дисперсионной матрицы. Указанные планы имеют следующие характеристики:

$$|D(\varepsilon_1(3))| = \frac{3}{2},$$

$$\max_x d(x, \varepsilon_1(3)) = d(1, \varepsilon_1(3)) = d(-1, \varepsilon_1(3)) = \frac{5}{2}$$

и

$$|D(\varepsilon_2(3))| = \frac{9}{8},$$

$$\max_x d(x, \varepsilon_2(3)) = d(-1, \varepsilon_2(3)) = 3.$$

II. В настоящем разделе основное внимание будет уделено изучению некоторых свойств точных оптимальных планов [46], которые позволят затем развить достаточно простой (по сравнению с прямыми методами поиска экстремума  $L[M(\varepsilon(N))]$ ), например, градиентным или методом случайного поиска) численный метод построения оптимальных планов.

Остановимся вначале на  $D$ -оптимальных планах. При этом нам удобнее оперировать с ненормированными дискретными планами, которые в отличие от нормированных обозначаются  $\mathcal{G}(N)$ . Напомним, что

$$M(\mathcal{G}(N)) = NM(\varepsilon(N)).$$

Пусть имеется план  $\mathcal{G}(N)$  со спектром  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \dots, \mathbf{x}_n$  и пусть часть измерений из точек  $\mathbf{x}_{j_1}, \mathbf{x}_{j_2}, \dots, \mathbf{x}_{j_l}$ , принадлежащих этому спектру, перенесено в произвольные точки  $\tilde{\mathbf{x}}_k$  ( $k=1, 2, \dots, l$ ).

Обозначим новый план через  $\tilde{\mathcal{G}}(N)$ .

**Лемма 3.2.1.** Пусть  $M(\mathcal{G}(N))$  — информационная матрица плана  $\mathcal{G}(N)$ , тогда определитель информационной матрицы плана  $\tilde{\mathcal{G}}(N)$  равен

$$|M(\tilde{\mathcal{G}}(N))| = |M(\mathcal{G}(N))| \cdot |I_l + F^T M^{-1}(\mathcal{G}(N)) F|, \quad (3.2.1)$$

где

$$F = \|\ i\lambda^{1/2}(\mathbf{x}_{j_1}) \mathbf{f}(\mathbf{x}_{j_1}), \lambda^{1/2}(\tilde{\mathbf{x}}_1) \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}}_1), \dots$$

$$\dots, i\lambda^{1/2}(\mathbf{x}_{j_l}) \mathbf{f}(\mathbf{x}_{j_l}), \lambda^{1/2}(\mathbf{x}_l) \mathbf{f}(\mathbf{x}_l) \|, \quad i = \sqrt{-1}.$$

Доказательство. По определению

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\tilde{\mathcal{G}}(N)) = \mathbf{M}(\mathcal{G}(N)) - \sum_{k=1}^l \lambda(\mathbf{x}_{j_k}) \mathbf{f}(\mathbf{x}_{j_k}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_{j_k}) + \\ + \sum_{k=1}^l \lambda(\mathbf{x}_k) \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_k) \end{aligned}$$

Это выражение можно переписать в виде:

$$\mathbf{M}(\tilde{\mathcal{G}}(N)) = \mathbf{M}(\mathcal{G}(N)) + \mathbf{F}\mathbf{F}^T.$$

Применив к последнему равенству лемму 2.5.1, мы получим необходимый результат.

В дальнейшем мы будем неоднократно сталкиваться с величиной  $|\mathbf{I}_l + \mathbf{F}^T \mathbf{M}^{-1}(\mathcal{G}(N)) \mathbf{F}|$ . Из положительной полуопределенности информационных матриц  $\mathbf{M}(\tilde{\mathcal{G}}(N))$  и  $\mathbf{M}(\mathcal{G}(N))$  и равенства (3.2.1) следует, что эта величина не меньше нуля, причем равенство нулю имеет место лишь при  $|\mathbf{M}(\tilde{\mathcal{G}}(N))| = 0$ .

**Теорема 3.2.1.** В точках  $\mathbf{x}_j^*$  ( $j=1, 2, \dots, n$ ) спектра точного  $D$ -оптимального плана  $\mathcal{G}^*(N)$

$$\begin{aligned} \lambda(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}_j^*) \geq \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}) - \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}_j^*) \times \\ \times [d(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}) - d^2(\mathbf{x}_j, \mathbf{x})], \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

где

$$d(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x}, \mathcal{G}^*(N)) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathcal{G}^*(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}),$$

$$d(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}) = d(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}, \mathcal{G}^*(N)) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathcal{G}^*(N)) \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{x}}),$$

и  $\mathbf{x} \in X$ .

Доказательство. Пусть  $\mathbf{x}$  — некоторая точка, принадлежащая области  $X$ , где возможны измерения. Предположим, что в эту точку из точки  $\mathbf{x}_j^*$ , принадлежащей спектру точного  $D$ -оптимального плана, перенесено одно измерение. Воспользуемся результатами леммы 3.2.1. Введем матрицу

$$\mathbf{F} = \|\ i\lambda^{1/2}(\mathbf{x}_j^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}_j^*), \quad \lambda^{1/2}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \ \|.$$

Согласно (3.2.1) определитель информационной матрицы нового плана  $\tilde{\mathcal{G}}(N)$  будет равен

$$|\mathbf{M}(\tilde{\mathcal{G}}(N))| = |\mathbf{M}(\mathcal{G}(N))| \cdot |\mathbf{I} + \mathbf{F}^T \mathbf{M}^{-1}(\mathcal{G}(N)) \mathbf{F}|.$$



Так как (см. пояснения к (3.2.2))

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^T \mathbf{M}^{-1}(\mathcal{G}(N)) \mathbf{F} &= \mathbf{F}^T \mathbf{D}(\mathcal{G}(N)) \mathbf{F} = \\ &= \left\| \begin{array}{cc} \lambda(\mathbf{x}_j) d(\mathbf{x}_j) & i\lambda^{1/2}(\mathbf{x}_j^*) \lambda^{1/2}(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) \\ i\lambda^{1/2}(\mathbf{x}_j) \lambda^{1/2}(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) & -\lambda(\mathbf{x}^*) d(\mathbf{x}^*) \end{array} \right\| \end{aligned}$$

и

$$|\mathbf{I} + \mathbf{F}^T \mathbf{M}^{-1}(\mathcal{G}^*(N)) \mathbf{F}| = 1 - \lambda(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}_j^*) + \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}) - \lambda(\mathbf{x}) \lambda(\mathbf{x}_j^*) [d(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}) - d^2(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x})],$$

то

$$|\mathbf{M}(\mathcal{G}(N))| = |\mathbf{M}(\mathcal{G}^*(N))| \cdot \{1 - \lambda(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}_j^*) + \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}) - \lambda(\mathbf{x}) \lambda(\mathbf{x}_j^*) [d(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}) - d^2(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x})]\}.$$

Но по определению

$$|\mathbf{M}(\mathcal{G}(N))| \leq |\mathbf{M}(\mathcal{G}^*(N))|,$$

следовательно, из последнего равенства вытекает (3.2.2).

Второе слагаемое в (3.2.2) всегда не меньше нуля. В этом легко убедиться, если учесть, что  $d(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x})$  есть ковариация двух случайных величин  $\hat{\eta}(\mathbf{x}_j^*, \theta)$  и  $\hat{\eta}(\mathbf{x}, \theta)$ , а  $d(\mathbf{x}_j^*)$  и  $d(\mathbf{x})$  — дисперсии этих же величин.

Как известно (см., например, [16])

$$\rho^2(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) = \frac{d(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x})}{d(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x})} \leq 1.$$

Отсюда

$$d(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}) - d^2(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) \geq 0.$$

Таким образом, в точках точного  $D$ -оптимального плана поверхность  $\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x})$  не обязательно достигает своего максимального значения, как это было в непрерывных  $D$ -оптимальных планах. Теорема 3.2.1 удобна для проверки планов на  $D$ -оптимальность. Обратим внимание на то, что условие (3.2.2) является необходимым, но не достаточным.

Устремляя число возможных измерений к бесконечности (т. е. переходя к непрерывным планам), легко убедиться, что (3.2.2) с точностью до членов  $O(N^{-1})$  переходит в неравенство

$$\lambda(\mathbf{x}_j) d(\mathbf{x}_j, \varepsilon^*) \geq \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon^*), \quad \mathbf{x} \in X.$$

Отсюда также следует, что

$$\lambda(\mathbf{x}_j) d(\mathbf{x}_j, \varepsilon^*) = \lambda(\mathbf{x}_k) d(\mathbf{x}_k, \varepsilon^*),$$

где  $x_j$  и  $x_k$  — различные точки спектра плана  $e^*$ . Последние два соотношения находятся в полном соответствии с теоремой 2.2.1.

III. Опираясь на теорему 3.2.1, можно построить итерационную процедуру отыскания точных  $D$ -оптимальных планов. Пусть есть план  $\mathcal{E}_0(N)$ , для точек спектра которого не выполняется неравенство (3.2.2). Предположим, что неравенство не выполняется для точки  $x_i$  на некотором множестве точек  $x \in X$ . Перенесение одного измерения из точки  $x_i$  в точку  $x$  приведет к увеличению определителя информационной матрицы:

$$|M(\mathcal{E}(N))| = |M(\mathcal{E}_0(N))| \cdot [1 + \Delta_0(x_i, x)],$$

если  $\Delta_0(x_i, x) > 0$ .

Здесь

$$\Delta_s(x_i, x) = \lambda(x) d_s(x) - \lambda(x) \lambda(x_i) [d_s(x) d_s(x_i) - d_s^2(x, x_i)] - \lambda(x_i) d_s(x_i),$$

$$d_s(x) = d(x, \mathcal{E}_s(N)), \quad d_s(x, x_i) = d(x, x_i, \mathcal{E}_s(N)),$$

$$s = 0, 1, \dots$$

Чтобы увеличение определителя информационной матрицы при заданном  $x_i$  было на данном шаге максимальным, измерение следует переносить в точку  $x^0$ , где  $\Delta_0(x_i, x)$  достигает своего максимального значения. Прирост определителя можно увеличить, если провести дополнительную максимизацию по  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n_0$ ).

Для полученного плана  $\mathcal{E}_1(N)$  отыскивается  $\max_i \max_x \Delta_1(x_i, x)$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Если

$$\max_i \max_x \Delta_1(x_i, x) > 0$$

и максимальное значение  $\Delta_1(x_i, x)$  достигается при  $i = j_1$  в точке  $x^1$ , то из точки  $x_{j_1}$  в точку  $x^1$  переносится одно измерение.

Данная процедура продолжается до тех пор, пока не будет иметь место соотношение:

$$\max_i \max_x \Delta_s(x_i, x) \leq \delta,$$

где  $\delta$  — некоторое малое наперед заданное положительное число.

Так как

$$|\mathbf{M}(\mathcal{E}_0(N))| \leq |\mathbf{M}(\mathcal{E}_1(N))| \leq \dots \leq |\mathbf{M}(\mathcal{E}_s(N))| \leq \dots \leq |\mathbf{M}(\mathcal{E}^*(N))|,$$

то сходимость последовательности  $\{|\mathbf{M}(\mathcal{E}(N))|\}$  следует из существования верхней границы.

Основное неприятное отличие предложенной процедуры от аналогичной процедуры по построению непрерывных  $D$ -оптимальных планов состоит в том, что план, к которому сходится последовательность  $\{\mathcal{E}_s(N)\}$ , в некоторых случаях может отличаться от оптимального плана:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} |\mathbf{M}(\mathcal{E}_s(N))| = |\mathbf{M}(\tilde{\mathcal{E}}(N))| \leq |\mathbf{M}(\mathcal{E}^*(N))|.$$

В связи с этим рекомендуется проводить итерационную процедуру несколько раз, начиная с различных  $\mathcal{E}_0(N)$ . Если определители информационных матриц для всех случаев совпадают, то планы  $\tilde{\mathcal{E}}(N)$ , к которым сходятся соответствующие последовательности планов  $\{\mathcal{E}_s(N)\}$ , с большой вероятностью будут совпадать с точными оптимальными планами. Если итерационные процедуры сходятся к различным планам  $\tilde{\mathcal{E}}(N, j)$  ( $j=1, 2, \dots, q$ ), для которых определители информационных матриц различны, то рекомендуется продолжать попытки поиска оптимального плана до тех пор, пока не удастся выделить группу планов  $\tilde{\mathcal{E}}(N, j_1), \tilde{\mathcal{E}}(N, j_2), \dots, \tilde{\mathcal{E}}(N, j_l)$  ( $l < q$ ), у которых определители информационных матриц равны между собой и превышают все остальные.

Для проверки того, является ли план  $\tilde{\mathcal{E}}(N)$   $D$ -оптимальным, рекомендуется также использовать соотношения (3.1.3) и (3.1.7).

Заметим, что в отличие от непрерывных  $D$ -оптимальных планов, где всем оптимальным планам для данной регрессионной задачи соответствует одна и та же матрица  $\mathbf{M}(\mathcal{E}^*)$ , для каждого точного  $D$ -оптимального плана может существовать, вообще говоря, своя информационная матрица, но все определители этих матриц равны между собой.

**Пример 2.** Рассмотрим регрессионную кривую вида

$$\eta(x, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2 + \theta_4 x^3, \quad -1 \leq x \leq 1.$$

Функцию эффективности  $\lambda(x)$  будем предполагать постоянной на указанном отрезке.

Непрерывный  $D$ -оптимальный план для данной регрессионной задачи известен и равен

$$\varepsilon = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1,0; \quad x_2 = -0,44; \quad x_3 = 0,44; \quad x_4 = 1,0 \\ p_i = 0,25; \quad i = 1, 2, 3, 4 \end{array} \right\}.$$

По итерационной процедуре, предложенной здесь, были построены точные оптимальные планы для  $N=4, 5, \dots, 15$  (рис. 19). Очевидно, что при  $N=4, 8, 12$

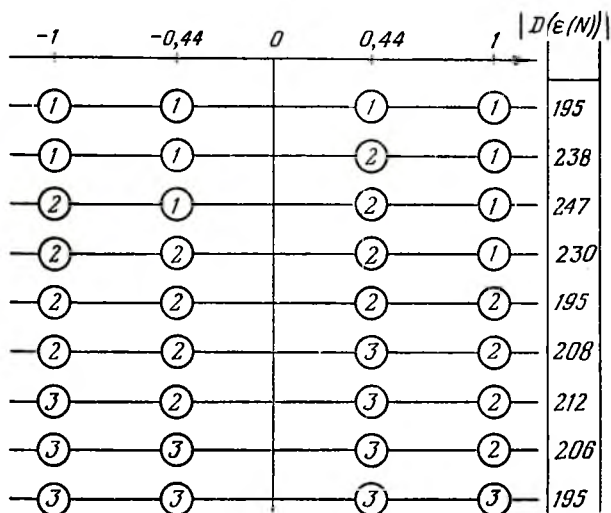


Рис. 19. Точные оптимальные планы для кубической регрессии на отрезке.

планы совпадают по значению определителя, нормированного на одно измерение, со значением определителя непрерывного оптимального плана. Остальные планы практически совпадают с округленными планами, построенными по процедуре, предложенной в § 3.1. Подробное исследование точных  $D$ -оптимальных планов для полиномиальной регрессии на отрезке проведено в [47].

**Пример 3.** Во многих случаях спектры непрерывных  $D$ -оптимальных планов состоят из точек, число которых значительно превышает число искомых параметров.

В связи с этим возникает проблема построения планов, достаточно хороших в смысле величины определителя дисперсионной матрицы и в то же время состоящих из малого числа точек. Развитая выше итерационная процедура позволяет построить такие планы. На рис. 20



Рис. 20. Точные оптимальные планы для полиномиальной регрессии второго и третьего порядка при  $N = m$ .

приведены планы с числом точек, совпадающим с числом неизвестных параметров для регрессионных поверхностей

$$\eta(\mathbf{x}, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_1 x_2 + \theta_5 x_1^2 + \theta_6 x_2^2$$

и

$$\eta(\mathbf{x}, \theta) = \theta_1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_1 x_2 + \theta_5 x_1^2 + \theta_6 x_2^2 + \theta_7 x_1^2 x_2 + \theta_8 x_1 x_2^2 + \theta_9 x_1^3 + \theta_{10} x_2^3$$

соответственно.

Очевидно, что указанные планы не являются единственными. Действительно, «поворотом» этих планов на  $90^\circ$  мы вновь получим планы с тем же значением определителей дисперсионных матриц, что и первоначальные.

### § 3.3. Построение точных линейно оптимальных планов

1. Рассмотрим свойства точных линейно оптимальных планов. При этом для простоты изложения в данном параграфе будут рассматриваться только невырожденные планы. Анализ вырожденных линейно оптимальных планов опирается на прием изложений в гл. 2 при анализе произвольных непрерывных планов и практически полностью повторяет проводимые ниже рассуждения.

Пусть имеют место те же обозначения, что введены в пояснениях к лемме 3.2.1. Докажем следующие две леммы.

**Лемма 3.3.1.** Пусть  $\mathbf{D}(\mathcal{E}(N))$  — дисперсионная матрица плана  $\mathcal{E}(N)$ , тогда дисперсионная матрица плана  $\mathcal{E}(N)$

равна

$$D(\tilde{\mathcal{G}}(N)) = [I_m - D(\mathcal{G}(N)) F (I_l + F^T D(\mathcal{G}(N)) F)^{-1} F^T] D(\mathcal{G}(N)), \quad (3.3.1)$$

где  $m$  — число неизвестных параметров,  $l$  — число переменных  $x_{j_k} \rightarrow \tilde{x}_k$ .

Доказательство. Так как

$$M(\tilde{\mathcal{G}}(N)) = M(\mathcal{G}(N)) + FF^T, \quad (3.3.2)$$

то

$$D(\tilde{\mathcal{G}}(N)) = (I_m + D(\mathcal{G}(N)) FF^T)^{-1} D(\tilde{\mathcal{G}}(N)). \quad (3.3.3)$$

Положив  $A = D(\mathcal{G}(N)) F$  и  $B = F^T$  и воспользовавшись леммой 2.6.1, получим

$$\begin{aligned} (I_m + D(\mathcal{G}(N)) FF^T)^{-1} &= \\ &= I_m - D(\mathcal{G}(N)) F (I_l + F^T D(\mathcal{G}(N)) F)^{-1} F D(\mathcal{G}(N)). \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Объединяя (3.3.3) и (3.3.4), мы убеждаемся в справедливости доказываемой леммы.

**Лемма 3.3.2.** Пусть функционал  $L$  обладает свойствами (2.9.2) и (2.9.3), тогда

$$\begin{aligned} L[D(\tilde{\mathcal{G}}(N))] &= L[D(\mathcal{G}(N))] - \\ &- L[D(\mathcal{G}(N)) F (I_l + F^T D(\mathcal{G}(N)) F)^{-1} F D(\mathcal{G}(N))]. \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

Доказательство. Для того чтобы убедиться в справедливости (3.3.5), достаточно найти от обеих частей уравнения (3.3.1) значения функционала  $L$  и воспользоваться его свойством (2.9.2).

Покажем, что точные линейно оптимальные планы удовлетворяют требованиям, аналогичным изложенным в предыдущем пункте для точных  $D$ -оптимальных планов.

**Теорема 3.3.1.** В точках  $x_j^*$  ( $j=1, 2, \dots, n$ ) спектра точного линейно оптимального плана  $\mathcal{G}^*(N)$

$$\begin{aligned} (1 + \lambda(x) d(x)) \varphi(x_j^*) &> (1 - \lambda(x_j^*) d(x_j^*)) \varphi(x) + \\ &+ 2\lambda^{1/2}(x_j^*) \lambda^{1/2}(x) d(x_j^*, x) \varphi(x, x_j^*), \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

где  $x \in X$ ,

$$\varphi(x) = \varphi(x, \mathcal{G}^*(N)) = \lambda(x) L[D(\mathcal{G}^*(N)) f(x) f^T(x) D(\mathcal{G}^*(N))],$$

$$\varphi(x, \tilde{x}) = \varphi(\tilde{x}, x) = \varphi(x, \tilde{x}, \mathcal{G}^*(N)) =$$

$$= \lambda^{1/2}(x) \lambda^{1/2}(\tilde{x}) L[D(\mathcal{G}^*(N)) f(x) f^T(\tilde{x}) D(\mathcal{G}^*(N))],$$

остальные обозначения те же, что и в теореме 3.2.1.

Доказательство. Пусть  $\mathbf{x}$  — некоторая точка, принадлежащая области  $X$ , где возможны измерения, и пусть из точки  $\mathbf{x}_j^*$  перенесено в точку  $\mathbf{x}$  одно измерение, тогда

$$\mathbf{F} = \|\lambda^{1/2}(\mathbf{x}_j^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}_j^*), \lambda^{1/2}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})\|. \quad (3.3.7)$$

Обозначим через  $\tilde{\mathcal{G}}(N)$  вновь полученный план. Подставив (3.3.7) в (3.3.5), непосредственной проверкой нетрудно убедиться, что

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) &= L[\mathbf{D}(\mathcal{G}^*(N))] - L[\mathbf{D}(\tilde{\mathcal{G}}(N))] = \\ &= |\mathbf{I}_2 + \mathbf{F}^T \mathbf{D}(\mathcal{G}^*(N)) \mathbf{F}|^{-1} [(1 - \lambda(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}_j^*)) \varphi(\mathbf{x}) + \\ &+ \lambda^{1/2}(\mathbf{x}_j^*) \lambda^{1/2}(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) (\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j^*) + \varphi(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x})) - \\ &- (1 - \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x})]. \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

Так как план  $\mathcal{G}^*(N)$  — оптимальный и определитель  $|\mathbf{I}_2 + \mathbf{F}^T \mathbf{D}(\mathcal{G}^*(N)) \mathbf{F}|$  больше нуля (см. замечание к лемме 3.2.1), то

$$L[\mathbf{D}(\mathcal{G}^*(N))] - L[\mathbf{D}(\mathcal{G}(N))] \leq 0. \quad (3.3.9)$$

Объединяя (3.3.8) и (3.3.9), мы убеждаемся в справедливости (3.3.6).

Например, для точных  $A$ -оптимальных планов неравенство (3.3.6) имеет вид

$$(1 + \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}_j^*) \geq (1 - \lambda(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}_j^*)) \varphi(\mathbf{x}) + \\ + 2\lambda^{1/2}(\mathbf{x}) \lambda^{1/2}(\mathbf{x}_j^*) d(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}), \quad (3.3.10)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}) &= \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\mathcal{G}^*(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}), \\ \varphi(\mathbf{x}_j^*, \mathbf{x}) &= \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j^*) = \lambda^{1/2}(\mathbf{x}) \lambda^{1/2}(\mathbf{x}_j^*) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\mathcal{G}^*(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}_j^*). \end{aligned}$$

Если перейти к нормированным величинам, то (3.3.10) можно переписать с точностью до членов  $O(N^{-1})$  в виде

$$(1 + O(N^{-1})) \varphi(\mathbf{x}_j^*, \varepsilon(N)) \geq \\ \geq (1 - O(N^{-1})) \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon(N)) + O(N^{-1}). \quad (3.3.11)$$

При  $N \rightarrow \infty$  неравенство (3.3.11) переходит в знакомое нам неравенство (см. § 2.11), имеющее место для непрерывных  $A$ -оптимальных планов,

$$\lambda(\mathbf{x}_j^*) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_j^*) \mathbf{D}^2(\varepsilon^*) \mathbf{f}(\mathbf{x}_j^*) \geq \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(\varepsilon) \mathbf{f}(\mathbf{x}). \quad (3.3.12)$$

II. При численном построении линейно оптимальных планов так же, как и при построении точных  $D$ -опти-

мальных планов, удобно воспользоваться итерационным методом.

Итерационная процедура состоит из следующих операций:

1. Пусть имеется некоторый невырожденный план  $\mathcal{E}_s(N)$  с дисперсионной матрицей  $\mathbf{D}(\mathcal{E}_s(N))$ . Отыскиваются точки  $\mathbf{x}_{j_s}$  и  $\mathbf{x}^s$ , соответствующие

$$\max_i \max_{\mathbf{x}} \Delta_s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где  $\Delta_s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$  определяется формулой (3.3.8).

2. Из точки  $\mathbf{x}_{j_s}$  в точку  $\mathbf{x}^s$  переносится одно измерение. Полученный план будем обозначать  $\mathcal{E}_{s+1}(N)$ .

3. Подсчитывается дисперсионная матрица

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathcal{E}_{s+1}(N)) &= \\ &= [\mathbf{I}_m - \mathbf{D}(\mathcal{E}_s(N)) \mathbf{F} (\mathbf{I}_2 + \mathbf{F}^T \mathbf{D}(\mathcal{E}_s(N)) \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T] \mathbf{D}(\mathcal{E}_s(N)). \end{aligned}$$

4. Повторяются операции 1—3 с заменой индекса  $s$  на  $(s+1)$  и т. д.

Вычисления заканчиваются, если

$$\max_i \max_{\mathbf{x}} \Delta_s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) \leq \delta, \quad (3.3.13)$$

где  $\delta$  — наперед заданная «точность».

Так как

$$L[\mathbf{D}(\mathcal{E}_0(N))] \leq L[\mathbf{D}(\mathcal{E}_1(N))] \leq \dots \leq L[\mathbf{D}(\mathcal{E}_s(N))],$$

то данная последовательность сходится в силу того, что  $L[\mathbf{D}(\mathcal{E}_s(N))] \leq L[\mathbf{D}(\mathcal{E}^*(N))]$ , где  $\mathcal{E}^*(N)$  — линейно оптимальный план. Однако в некоторых случаях предел этой последовательности может оказаться не равным  $L[\mathbf{D}(\mathcal{E}^*(N))]$ . Поэтому, так же как и в итерационной процедуре по поиску точных  $D$ -оптимальных планов, рекомендуется повторение итерационной процедуры с несколькими различными начальными планами.

III. Несмотря на некоторую громоздкость выражения для  $\Delta_s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$ , предложенная итерационная процедура поиска  $D$ - и  $L$ -оптимальных планов при реализации ее на электронно-вычислительных машинах в большинстве случаев значительно проще, чем прямой поиск  $\max_{\mathcal{E}(N)} |\mathbf{M}(\mathcal{E}(N))|$  или  $\max_{\mathcal{E}(N)} L[\mathbf{D}(\mathcal{E}(N))]$ .

$\mathcal{E}(N)$

$\mathcal{E}(N)$



Действительно, любой прямой метод поиска условного экстремума (например, это может быть одна из модификаций градиентного метода, метод оврагов и т. д.) крайне чувствителен к росту размерности пространства, в котором ищется экстремум. Например, для одной из простейших регрессионных задач — линейной регрессии в факторном пространстве размерности  $k$  — поиск условного экстремума должен вестись в пространстве по крайней мере  $(k+1)k+k$  переменных, из них  $k$  меняются дискретным образом. К тому же в процессе поиска экстремума, который обычно имеет итерационный характер, на каждом шаге необходимо вычислять либо  $|\mathbf{M}(\mathcal{G}(N))|$ , либо обращать матрицу  $\mathbf{M}(\mathcal{G}(N))$  размера  $m \times m$ , где  $m$  — число неизвестных параметров.

В итерационных процедурах, изложенных в данной главе, поиск экстремума ведется в пространстве  $k+1$  переменных (одна переменная  $x_i$  — дискретная). Поиск  $\max_x \Delta_s(x_i, \mathbf{x})$  можно проводить не до конца и прекращать, как только  $\Delta_s(x_i, \mathbf{x})$  превысит некоторый заданный уровень. Это несколько увеличивает число итераций, но значительно сокращает объем промежуточных вычислений. В рассматриваемых алгоритмах удается избежать вычисления определителей и обращения матриц больших размеров. Природа итерационных процедур такова, что эти операции удается заменить на операции типа сверток  $\mathbf{f}^T \mathbf{Df}$ .

### § 3.4. Построение квазиоптимальных планов при неадекватных моделях

I. Выше всюду предполагалось, что функция  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$ , описывающая зависимость среднего по результатам наблюдений от контролируемых переменных, известна. В практических задачах часто приходится сталкиваться с ситуацией, когда известна функция  $\psi(\mathbf{x}, \theta)$ , которая может лишь с некоторой степенью точности описать указанную выше зависимость. Иными словами,

$$E(y/\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}, \theta) + \Delta(\mathbf{x}, \theta, \theta), \quad (3.4.1)$$

где функция  $\psi(\mathbf{x}, \theta)$  предполагается известной, а функция  $\Delta(\mathbf{x}, \theta, \theta)$  — неизвестной.

Как правило, конечной целью регрессионного эксперимента в данном случае является отыскание такой

функции  $\psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ , которая была бы возможно ближе к истинному значению поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}})$ . Значения  $\hat{\boldsymbol{\theta}}$  должны зависеть от результатов наблюдений. Величины  $\boldsymbol{\theta}$  и  $\theta$  могут быть как физически эквивалентны друг другу (например,  $\boldsymbol{\theta}$  и  $\theta$  есть наборы одних и тех же неизвестных физических констант), так и отличны друг от друга (например, величины  $\boldsymbol{\theta}$  есть неизвестные коэффициенты интерполяционного полинома, а  $\theta$  — некоторые физические константы).

Степень близости поверхностей  $\psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$  и  $\eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}})$  можно характеризовать различными способами. Наиболее употребительными мерами близости являются следующие две величины (см., например, [22]):

$$d = \max_{\mathbf{x} \in X} E \{ [\eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}) - \psi(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}})]^2 \} \quad (3.4.2)$$

и

$$Q = E \left\{ \int_X [\eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}) - \psi(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}})]^2 d\mathbf{x} \right\}, \quad (3.4.3)$$

где  $E$  означает операцию усреднения по результатам наблюдений при заданном плане эксперимента. Выбор той или иной меры определяется целями эксперимента.

В дальнейшем мы будем предполагать, что в качестве величин  $\hat{\boldsymbol{\theta}}$  берутся их наилучшие линейные (квазилинейные) оценки  $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ , построенные в предположении, что  $\psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$  действительно является поверхностью отклика. Таким образом, мы постулируем правило выбора указанных величин при заданном эксперименте.

Очевидно, что величины  $d$  и  $Q$ , как и в предыдущем материале, зависят от плана эксперимента. Наша цель — подобрать планы, которые позволяли бы минимизировать одну из этих величин.

Остановимся на способе сравнения (3.4.2). Легко проверить, что

$$\begin{aligned} E [\eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}) - \psi(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}})]^2 &= \\ &= [\eta(\mathbf{x}, \theta_{\text{ист}}) - \psi(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{ист}})]^2 + d(\mathbf{x}, \epsilon), \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

где в случае линейной зависимости  $\psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$  от

параметров  $\hat{\theta}$

$$\hat{\theta} = M^{-1} \sum_{i=1}^n \omega_i y_i f(x_i)$$

и

$$\hat{\theta}_{\text{ист}} = E(\hat{\theta}) = M^{-1} \sum_{i=1}^n \omega_i \eta(x_i, \theta_{\text{ист}}) f(x_i).$$

Для оценки величины  $\zeta$ :

$$\max_x [\eta(x, \theta_{\text{ист}}) - \psi(x, \hat{\theta}_{\text{ист}})]^2 \leq \zeta \quad (3.4.5)$$

необходимо обладать априорной информацией о поверхности отклика  $\eta(x, \theta_{\text{ист}})$ . Чем больше эта информация, тем более точное значение  $\zeta$ , для которого имеет место неравенство (3.4.5), можно указать. Обычно подобная информация заключается в сведениях о значениях производных функции  $\eta(x, \theta_{\text{ист}})$ , о числе перегибов или максимумов в исследуемой области  $X$  и т. д.

**Пример 1.** Пусть пространство контролируемых переменных одномерно и измерения возможны на отрезке  $[-1, 1]$ , причем

$$\lambda(x) \equiv \text{const.}$$

Об интересующей экспериментатора зависимости известно, что она не имеет перегибов на данном отрезке, а ее производные, начиная с третьей, малы по сравнению с первыми двумя. Разлагая ее в ряд Тейлора на отрезке  $[-1, 1]$ , получим

$$\begin{aligned} \eta(x, \theta_{\text{ист}}) &= \\ &= \eta(0, \theta_{\text{ист}}) + \dot{\eta}(0, \theta_{\text{ист}}) x + \frac{1}{2} \ddot{\eta}(0, \theta_{\text{ист}}) x^2 + R(x, \theta_{\text{ист}}). \end{aligned}$$

Точку, около которой ведется разложение, можно выбрать и отличной от нуля, что, как будет ясно из дальнейшего, никаких принципиальных изменений в ходе рассуждений не вызовет. Если искомая кривая хорошо описывается первыми тремя членами ряда Тейлора, то в качестве функции  $\psi(x, \hat{\theta})$  можно выбрать кривую второго порядка

$$\theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2.$$

При этом

$$\begin{aligned}
 E(\hat{\theta}_1) &= \hat{\theta}_{ист1} = \eta(0, \theta_{ист}) + \sum_{\alpha=1}^3 M_{1\alpha}^{-1} \sum_{i=1}^n \omega_i f_{\alpha}(x_i) R(x_i, \theta_{ист}), \\
 E(\hat{\theta}_2) &= \hat{\theta}_{ист2} = \dot{\eta}(0, \theta_{ист}) + \sum_{\alpha=1}^3 M_{2\alpha}^{-1} \sum_{i=1}^n \omega_i f_{\alpha}(x_i) R(x_i, \theta_{ист}), \\
 E(\hat{\theta}_3) &= \hat{\theta}_{ист3} = 1/2 \ddot{\eta}(0, \theta_{ист}) + \sum_{\alpha=1}^3 M_{3\alpha}^{-1} \sum_{i=1}^n \omega_i f_{\alpha}(x_i) R(x_i, \theta_{ист}).
 \end{aligned}
 \tag{3.4.6}$$

Величины  $\hat{\theta}_1$ ,  $\hat{\theta}_2$  и  $\hat{\theta}_3$  при малых  $R(x_i, \theta_{ист})$  могут служить удовлетворительными оценками для соответствующих производных.

Из (3.4.6), переходя к нормированным планам, легко получить, что

$$\begin{aligned}
 \eta(x, \theta_{ист}) - \psi(x, \hat{\theta}_{ист}) &= \\
 &= R(x, \theta_{ист}) - \sum_{i=1}^n \rho_i R(x_i, \theta_{ист}) d(x, x_i, \varepsilon),
 \end{aligned}$$

где веса  $\rho_i = \left( \sum_{j=1}^n \omega_j \right)^{-1} \cdot \omega_i$ . Отсюда и из (3.4.4) следует

$$\begin{aligned}
 E[\eta(x, \theta_{ист}) - \psi(x, \hat{\theta})]^2 &= \\
 &= \left[ R(x, \theta_{ист}) - \sum_{i=1}^n \rho_i R(x_i, \theta_{ист}) d(x, x_i, \varepsilon) \right]^2 + \left( \sum_{i=1}^n \omega_i \right)^{-1} d(x, \varepsilon).
 \end{aligned}
 \tag{3.4.7}$$

Очевидно, что при больших ошибках измерений (или, точнее, при малом суммарном весе измерений  $\sum_{i=1}^n \omega_i$ ) доминирующую роль играет второе слагаемое и оптимальный план должен совпадать с минимаксным ( $D$ -оптимальным). В данном конкретном случае этот план равен

$$\varepsilon_i^* = \left\{ \begin{array}{ccc} -1 & 0 & 1 \\ \rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \frac{1}{3} \end{array} \right\}.$$

Если же точность измерений высока или суммарное число допустимых измерений велико, то основную роль начинает играть первое слагаемое. План, минимизирующий наибольшее значение этого слагаемого, построить довольно трудно, и, что самое неудобное, характеристики этого плана зависят от вида остаточного члена  $R(x, \theta_{\text{ист}})$ , который обычно априори неизвестен.

В настоящем примере мы построим план, который минимизирует указанную величину в предположении, что  $R(x, \theta_{\text{ист}}) = \theta_0 x^3$ , где  $\theta_0$ , вообще говоря, неизвестно. Данное предположение о виде остаточного члена соответствует тому, что  $\eta(x, \theta_{\text{ист}})$  есть полином третьего порядка.

В рассматриваемом случае

$$\eta(x, \theta_{\text{ист}}) - \psi(x, \theta_{\text{ист}}) = \theta_0 \left[ x^3 - \sum_{i=1}^n p_i x_i^3 d(x, x_i, \epsilon) \right]. \quad (3.4.8)$$

Так как функции  $d(x, x_i, \epsilon)$  являются полиномами второго порядка, то задача построения оптимального плана по существу сводится к поиску кривой второго порядка, которая наилучшим образом приближала кривую  $x^3$  или, что то же самое, к поиску полинома третьего порядка

$\pi_3(x) = x^3 - \sum_{i=1}^n p_i x_i^3 d(x, x_i, \epsilon)$ , наименее отклоняющегося от нуля.

Из теории аппроксимации функций известно [22], что полином Чебышева  $T_3(x) = x^3 - \frac{3}{4}x$  является полиномом, наименее отклоняющимся от нуля, с коэффициентом при высшей степени, равным единице. Выбрав точки  $x_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ), совпадающие с корнями полинома  $T_3(x)$ , и переходя к интерполяционным полиномам Лагранжа, получим (см. 2.13.6)

$$\pi_3^*(x) = x^3 - \sum_{i=1}^n p_i x_i^3 \sum_{j=1}^n p_j^{-1} \mathcal{L}_j(x) \mathcal{L}_j(x_i) = x^3 - \sum_{i=1}^n x_i^3 \mathcal{L}_i(x),$$

причем, как нетрудно видеть, корни полинома  $\pi_3^*(x)$  совпадают с корнями полинома  $T_3(x)$ , а коэффициенты при  $x^3$  равны, т. е. эти два полинома совпадают. Отсюда план

$$e_3^* = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}, \quad x_2 = 0 \quad x_3 = \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} \\ p_1 = p_2 = p_3 = \frac{1}{3} \end{array} \right\}$$

минимизирует наибольшее значение первого слагаемого в (3.4.7).

Планы типа  $\varepsilon_1^*$  и  $\varepsilon_2^*$  уместно называть квазиоптимальными. Полученные результаты можно несколько обобщить. А именно, если  $\eta(x, \theta_{\text{ист}})$  — полином  $n$ -й степени, а  $\psi(x, \theta)$  — полином  $(n-1)$ -й степени, то планы, минимизирующие наибольшее на отрезке  $[-1, 1]$  систематическое отклонение  $|\eta(x, \theta_{\text{ист}}) - \psi(x, \theta)|$ , сосредоточены в корнях полинома Чебышева

$$T_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} \cos(n \arccos x), \quad |x| \leq 1,$$

с равными весами  $p_i = \frac{1}{n}$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Доказательство общего случая почти дословно повторяет доказательство для рассмотренного нами случая  $n=3$  и может быть проведено читателем самостоятельно.

Таким образом, при малых ошибках или большом числе измерений (влияние шумов незначительно) затраты при полиномиальной аппроксимации  $(n-1)$ -го порядка следует сосредоточивать в корнях полинома Чебышева  $T_n(x)$ .

При больших ошибках результатов наблюдений доминирующую роль играет дисперсия  $\left(\sum_{i=1}^n \omega_i\right)^{-1} d(x, \varepsilon)$ , и план должен совпадать с минимаксным, т. е. быть сосредоточенным в корнях полинома  $(1-x^2) \dot{P}_{m-1}(x)$  (см. теорему 2.3.3). Более того [78], всегда найдется такое достаточно малое  $\gamma$ , что при  $\theta_0^2 \sum_{i=1}^n \omega_i \leq \gamma$  минимальный план  $\varepsilon^*$  будет минимизировать и величину  $d(\varepsilon)$  (см. (3.4.2)):  $d(\varepsilon^*) = \min d(\varepsilon)$ .

Оптимальные планы для промежуточных случаев будут зависеть от произведения  $\theta_0^2 \sum_{i=1}^n \omega_i$ , и их поиск является трудоемкой задачей.

С некоторыми подходами к задаче аппроксимации полиномом степени  $m-1$  поверхности отклика, являющейся полиномом степени  $m$ , можно познакомиться в [48], [49].

Интересные результаты получены в работе [50]. В этой работе предлагается метод планирования экспериментов при разложении поверхности отклика по некоторой системе базисных функций. Для реализации рекомендуемых в [50] планов требуется проведение большого числа наблюдений ( $N \gg n$ ).

**Пример 2.** Во многих экспериментальных и технологических исследованиях конечной целью эксперимента является поиск экстремального значения поверхности отклика, вид которой неизвестен экспериментатору. Типичным примером подобных исследований является поиск оптимальных условий работы того или иного химического реактора, если в качестве критерия оптимальности выбрано требование максимальности выхода полезного продукта.

Решение подобных задач при отсутствии помех (точнее говоря, когда случайным характером результатов наблюдений можно пренебречь) хорошо изучено и опирается на численные методы поиска экстремальных значений заданных функций.

В большинстве численных методов поиска экстремума производится подсчет значений функции на некоторой дискретной системе точек. По этим значениям, в зависимости от используемого численного метода, отыскиваются конечно-разностные аналоги первых или вторых производных.

Опираясь на полученные величины, строится следующая система точек и расчеты повторяются вновь. Процедура продолжается до тех пор, пока значения координат, при которых достигается экстремум, не будут определены с заданной точностью [22], [34]. Если же, например, ищутся оптимальные условия работы химического реактора при неизвестной поверхности отклика, то вместо вычисляемых значений функции исследуются значения результатов наблюдений на тех же системах точек. В остальном процедуры экспериментального и численного поиска экстремума совпадают.

Основная трудность, с которой приходится сталкиваться в подобных процедурах, — это правило выбора на каждом шагу размера области, ограничивающей систему точек, так как эта система должна удовлетворять двум противоположным требованиям: с одной стороны, точки должны быть расположены достаточно близко друг от

друга, чтобы конечно-разностные аналоги производных не слишком сильно отличались от самих производных и, с другой стороны, точки должны находиться на достаточно больших расстояниях, чтобы скорость сходимости процедуры по поиску экстремума не была слишком мала.

Мы не будем останавливаться на правилах выбора размера областей, ограничивающих системы точек, отсылая читателя к специальной литературе (см., например, [34]).

В тех случаях, когда случайным характером результатов наблюдений нельзя пренебречь (например, ошибки результатов наблюдений одного порядка с разностью наблюдений, проведенных в двух соседних точках), возникают трудности, которые предъявляют дополнительные требования к системам точек, в которых производятся измерения.

Подробное исследование задач данного типа выходит за рамки данной книги, и мы остановимся лишь на двух способах поиска экстремума: на простейшей модификации градиентного метода и метода параболической аппроксимации.

а) Остановимся вначале на градиентном методе. Сущность его заключается в том, что любую достаточно гладкую функцию можно в малых областях аппроксимировать плоскостью

$$\psi(x, \theta) = \vartheta_1 + \vartheta_2 x_1 + \vartheta_3 x_2 + \dots + \vartheta_m x_{m-1}. \quad (3.4.9)$$

Разложением поверхности отклика  $\eta(x, \theta)$  в ряд Тейлора в полной аналогии с предыдущим примером можно показать, что наилучшие линейные оценки  $\hat{\vartheta}_2, \hat{\vartheta}_3, \dots, \hat{\vartheta}_m$  являются удовлетворительными оценками для производных  $\frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial x_1}, \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial x_m}$ , которые в силу предположения о гладкости функции  $\eta(x, \theta)$  слабо меняются в малых областях и которые определяют направление и величину градиента в соответствующих областях.

Пусть на каждом шаге точки могут выбираться из множества, которое является гиперкубом в пространстве размерности  $(m-1)$ . Очевидно, что измерения разумно разместить в минимальном числе точек, которое для регрессионной задачи (3.4.9) равно  $m$ . При этом размещение точек должно быть таково, чтобы при заданном числе измерений (обычно оно равно  $m$ ) параметры определя-



лись как можно точнее. Если в качестве меры точности выбрать определитель информационной матрицы, то данная задача оказывается идентичной задаче построения точного  $D$ -оптимального плана на кубе размерности  $m - 1$ , которая рассматривалась в § 3.2. В двумерном случае  $D$ -оптимальный план должен быть сосредоточен в трех вершинах квадрата. При этом точный  $D$ -оптимальный план имеет недиагональную дисперсионную матрицу. В ряде исследований это неудобно, так как затрудняет анализ степени воздействия того или иного фактора на происходящий процесс. Дисперсионная матрица  $D$ -оптимального плана становится диагональной, если число измерений увеличить до четырех.

Мы не будем останавливаться на построении точных  $D$ -оптимальных планов для пространств более высокой размерности. Соответствующую информацию читатель может найти в [1], [4].

Следует отметить, что выбор области возможных измерений в виде гиперкуба производится обычно из технологических соображений. Действительно, исследователю технически нетрудно проварьировать факторы в заданных границах:

$$|x_j| \leq 1, \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

С математической точки зрения подобный выбор области не является наилучшим. Значительно проще работать с областью, ограниченной гиперсферой:

$$xx^T \leq 1.$$

Здесь точные  $D$ -оптимальные планы при  $N = m$  совпадают с непрерывными  $D$ -оптимальными планами, дисперсионные матрицы которых диагональны. Это устраняет многие трудности, возникающие при построении точных  $D$ -оптимальных планов на гиперкубе (особенно при больших размерностях пространства контролируемых переменных).

б) Необходимость решения задачи на построение точного  $D$ -оптимального или  $Q$ -оптимального плана возникает также при поиске экстремума методом параболической аппроксимации. Сущность этого метода заключается в том, что вблизи экстремальной точки любая достаточно гладкая функция может быть аппроксимирована поверхностью второго порядка. Если удастся выделить не слиш-

ком большую область, которая покрывает искомую точку, то для уменьшения вклада, вносимого случайным характером результатов наблюдений (см. также пример 1 данного параграфа), измерения следует проводить в точках, соответствующих спектру точного  $D$ -оптимального плана для полиномиальной регрессии второго порядка в заданной области действия  $X$ . Как и в пункте (а), в качестве области действия можно выбрать в зависимости от экспериментальных условий  $m$ -мерный шар или куб. При выборе следует руководствоваться тем, какая из этих областей лучше описывает реальную область, в которой экспериментатор может варьировать контрольные переменные. В примере 2 § 3.2 приводится точный  $D$ -оптимальный план (при числе точек в спектре, равном числу неизвестных параметров) для регрессии второго порядка для двумерного случая.

## ГЛАВА 4

# ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО УТОЧНЕНИЮ И ОПРЕДЕЛЕНИЮ ОЦЕНОК ИСКОМЫХ ПАРАМЕТРОВ

### § 4.1. Некоторые особенности современных экспериментальных исследований

В современной экспериментальной практике приходится сталкиваться с опытами, сложными как с точки зрения их технического исполнения, так и с точки зрения их теоретического истолкования. Многие из этих опытов являются настолько длительными, что за время их проведения существенно изменяются экспериментальные условия. Что, вообще говоря, подразумевается под этими условиями?

Как правило, любое фундаментальное исследование нельзя рассматривать изолированно от развития данной отрасли науки или техники. Зачастую над одной и той же проблемой работает несколько коллективов, проводя теоретические и экспериментальные исследования, если не перекрывающиеся, то дополняющие друг друга. Поэтому в ходе исследований экспериментатор, кроме результатов, полученных в собственной лаборатории, получает дополнительные сведения либо благодаря непосредственному контакту с родственными лабораториями, либо из литературных источников. Эти сведения могут носить самый разнообразный характер. Это могут быть и теоретические результаты, уточняющие или коренным образом изменяющие вид поверхности отклика  $\eta(x, \theta)$ , и новые достижения в области методики проведения эксперимента, и появление новых технически более совершен-

ных приборов и установок, и, наконец, непосредственно экспериментальные данные об исследуемых величинах.

В качестве одного из примеров подобных сложных и длительных исследований можно привести эксперименты по исследованию взаимодействия элементарных частиц. В частности, в Объединенном институте ядерных исследований первые эксперименты по взаимодействию нуклонов при энергии 660 Мэв были проведены до 1950 г. (см. [51]) и продолжались до 1966 г. (см. [52], [53]). Просматривая указанные работы, нетрудно проследить влияние всех указанных выше факторов на характер экспериментальных исследований по данному узкому разделу физики элементарных частиц.

Очевидно, что в условиях, аналогичных изложенным выше, не имеет смысла строить план, который указывал бы распределение всех затрат, отведенных для данных исследований (статическое планирование). По-видимому, этот план чаще всего окажется неоптимальным, так как нельзя заранее предусмотреть все возможные изменения (к тому же облученные в количественные характеристики), подстерегающие экспериментатора на его длинном и трудном пути к цели.

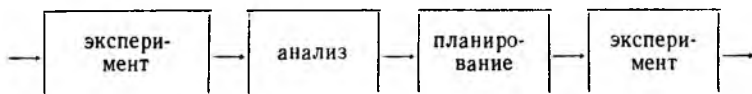
Большинство современных исследований начинается с тщательного отбора информации, имеющейся в мировой научной литературе или иных источниках. Иными словами, эксперимент начинается не с «пустого» места, когда информация об искомым параметрах (поверхностях отклика) отсутствует, а при наличии некоторой априорной информации. Статические же методы сравнительно просто реализуются лишь при отсутствии начальной информации ( $M(0) = 0$ ). В иных случаях ( $M(0) \neq 0$ ) затраты на математические расчеты чаще всего оказываются настолько большими, что подобное планирование становится значительно более трудоемким, чем сам эксперимент.

Таким образом, в указанных случаях от статических методов планирования экспериментов, изложенных в предыдущих главах, приходится отказаться. Наиболее целесообразно при этом обратиться к так называемым методам последовательного планирования экспериментов по определению и уточнению искомым параметров. Указанные методы также очень удобны при последовательной

процедуре, рассмотренной во введении (см. схему на стр. 15).

Идея последовательного планирования заключается в следующем. Отведенные затраты (например, время) делятся на небольшие «порции». Эксперимент разбивается на несколько этапов и на каждом этапе ведется планирование, опирающееся на одну «порцию» затрат. После каждого этапа проводится анализ эксперимента.

На схеме весь процесс эксперимента будет иметь вид:



Блок «анализ» подразумевает не только обычный регрессионный анализ экспериментальных данных, но и анализ сведений, поступающих извне. Эксперимент прекращается, как только заданная характеристика точности оценки группы параметров (например, определитель дисперсионной матрицы оценок искомых параметров  $|D(\hat{\theta})|$ , сумма ее диагональных элементов и т. д.) достигнет необходимого значения.

## § 4.2. Последовательные $D$ -оптимальные планы (линейная параметризация и постоянная во времени эффективность эксперимента)

1. В настоящей главе нам будет удобно использовать ненормированные планы. Пусть результаты экспериментов сравниваются по величине определителя матрицы

$$D_{ll} = \begin{vmatrix} D_{11} & D_{12} & \dots & D_{1l} \\ D_{21} & D_{22} & \dots & D_{2l} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ D_{l1} & D_{l2} & \dots & D_{ll} \end{vmatrix},$$

где  $D_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta \leq l$ ) — элементы дисперсионной матрицы, соответствующие параметрам, интересующим экспериментатора. План  $\mathcal{E}_1(T)$  будет предпочтительнее плана  $\mathcal{E}_2(T)$ , если для одних и тех же затрат

$$|D_{ll}(\mathcal{E}_1(T))| < |D_{ll}(\mathcal{E}_2(T))|, \quad (4.2.1)$$

где  $T$  — затраты, отведенные на данный эксперимент.

Будем предполагать, что стоимость каждого измерения не зависит от того, когда и где (в факторном пространстве  $X$ ) проводится это измерение. Тогда  $T = cN$ , где  $c$  — стоимость одного измерения,  $N$  — число измерений, отведенное для данного эксперимента, и (4.2.1) можно переписать в виде:

$$|D_{ii}(\mathcal{E}_1(N))| < |D_{ii}(\mathcal{E}_2(N))|. \quad (4.2.2)$$

Изучим свойства экспериментов, которые проводятся следующим образом.

1. В каждый заданный момент времени (который мы будем характеризовать числом измерений  $N$ ) измерение проводится в той точке, где возможное уменьшение определителя

$$|D_{ii}(N+1)| = |D_{ii}(\mathcal{E}(N+1))|$$

максимально.

2. После каждого измерения проводится анализ полученных данных. Затем повторяется операция 1 и т. д.

Цель настоящего параграфа вывести формулы, которые облегчали бы вычислительные процедуры при предложенном последовательном методе планирования, и выяснить, насколько эффективно такое планирование (иными словами, выяснить, оптимальна ли предложенная стратегия проведения эксперимента, и если оптимальна, то при каких условиях).

II. С вычислительной точки зрения последовательное планирование при критерии сравнения экспериментов, определяемом (4.2.2), заключается в поиске на каждом этапе

$$\min_{x \in X} |D_{ii}(N+1, x)|. \quad (4.2.3)$$

Так как явное выражение через характеристики поверхности отклика можно выписать только для информационной матрицы  $M(N+1, x)$  (см. гл. 1), то для отыскания минимума 4.2.3 необходимо проделать следующие операции:

- 1) Построить матрицу  $M(N+1, x)$ .
- 2) Вычислить обратную ей матрицу  $D(N+1, x) = M^{-1}(N+1, x)$ .

- 3) Вычислить определитель  $|D_{ii}(N+1, x)|$ .

Наиболее трудоемкими и наименее точными при проведении подобных вычислений являются операции обра-

щения матриц и вычисления определителей. Если учесть, что при вычислении минимума (например, по одной из модификаций градиентного метода) требуется многократное повторение этих операций, то становится очевидной необходимость формул, которые позволили бы заменить обращение матрицы и вычисление определителей на более простые операции.

Рассмотрим вначале случай, когда функции  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  линейно зависят от искоемых параметров  $\theta$  [54], [55]:

$$\eta(\mathbf{x}, \theta) = \sum_{\alpha=1}^m \theta_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}),$$

а область действия  $X$ , эффективность  $\lambda(\mathbf{x})$  и функции  $f_{\alpha}(\mathbf{x})$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, m$ ) удовлетворяют тем же условиям, что и в гл. 2. Предположим, что после  $N$  измерений информационная матрица имеет значение  $\mathbf{M}(N)$ . Пусть в точке  $\mathbf{x}$  проведено дополнительно  $\Delta N$  измерений. Найдем связь между элементами матриц  $\mathbf{D}(N) = \mathbf{M}^{-1}(N)$  и  $\mathbf{D}(N + \Delta N, \mathbf{x}) = \mathbf{M}^{-1}(N + \Delta N, \mathbf{x})$  и определителями  $|\mathbf{D}_{ii}(N)|$  и  $|\mathbf{D}_{ii}(N + \Delta N, \mathbf{x})|$ .

**Лемма 4.2.1.**

$$\mathbf{D}(N + \Delta N, \mathbf{x}) = \left[ \mathbf{I}_m - \frac{\lambda(\mathbf{x}) \Delta N \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})}{1 + \lambda(\mathbf{x}) \Delta N d(\mathbf{x}, N)} \right] \mathbf{D}(N), \quad (4.2.4)$$

где  $d(\mathbf{x}, N) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x})$  — дисперсия поверхности отклика в точке  $\mathbf{x}$  после  $N$  измерений.

**Доказательство.** По определению (см. гл. 1):

$$\mathbf{M}(N + \Delta N, \mathbf{x}) = \mathbf{M}(N) + \lambda(\mathbf{x}) \Delta N \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})$$

или

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(N + \Delta N, \mathbf{x}) &= [\mathbf{M}(N) + \lambda(\mathbf{x}) \Delta N \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})]^{-1} = \\ &= [\mathbf{I}_m + \lambda(\mathbf{x}) \Delta N \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})]^{-1} \mathbf{D}(N) \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

Положив  $\mathbf{A} = \lambda(\mathbf{x}) \Delta N \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x})$  и  $\mathbf{B} = \mathbf{D}(N)$ , из (4.2.5) и леммы 2.6.1 мы убедимся в справедливости леммы.

**Лемма 4.2.2.**

$$|\mathbf{D}_{ii}(N + \Delta N, \mathbf{x})| = |\mathbf{D}_{ii}(N)| \cdot \left[ 1 - \frac{\lambda(\mathbf{x}) \Delta N q^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}_{ii}^{-1}(N) q(\mathbf{x})}{1 + \lambda(\mathbf{x}) \Delta N d(\mathbf{x}, N)} \right], \quad (4.2.6)$$

где

$$q_{\alpha}(x) = \sum_{\beta=1}^m D_{\alpha\beta}(N) f_{\beta}(x), \quad \alpha = 1, 2, \dots, l.$$

Доказательство. Из леммы 4.2.1 следует, что

$$\begin{aligned} |D_{ii}(N + \Delta N, x)| &= \\ &= \left\| \left\| \mathbf{D}(N) - \frac{\lambda(x) \Delta(N) \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(x) \mathbf{f}^T(x) \mathbf{D}(N)}{1 + \lambda(x) d(x, N) \Delta N} \right\|_1^l \right\|. \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Положив в теореме 1.1.3

$$\mathbf{D} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{D}(N),$$

$$\mathbf{B} = \left\| \left\| \frac{\lambda(x) \Delta N \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(x)}{1 + \lambda(x) d(x, N) \Delta N} \right\|_1^l \right\|.$$

и  $\mathbf{C} = \left\| \mathbf{f}^T(x) \mathbf{D}(N) \right\|_1^l$ , получим:

$$\begin{aligned} |D_{ii}(N + \Delta N, x)| &= |D_{ii}(N)| \cdot [1 - \\ &- \frac{\lambda(x) \Delta N}{1 + \lambda(x) \Delta N d(x, N)} \left\| \mathbf{f}^T(x) \mathbf{D}(N) \right\|_1^l \cdot \mathbf{D}_{ii}^{-1}(N) \cdot \left\| \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(x) \right\|_1^l] \end{aligned}$$

или, вводя обозначения  $q_{\alpha}(x) = \sum_{\beta=1}^m D_{\alpha\beta}(N) f_{\beta}(x)$ , придем к (4.2.6).

При использовании результатов лемм 4.2.1 и 4.2.2 операция вычисления определителя производится при поиске  $\min_{x \in X} |D_{ii}(N + \Delta N, x)|$  единственный раз (вычисляется  $|D_{ii}(0)|$ , где  $\mathbf{D}(0)$  — значение дисперсионной матрицы перед началом планирования эксперимента). Обращение матрицы производится единственный раз на каждом этапе планирования (вычисляется  $\mathbf{D}_{ii}^{-1}(N)$ ). Таким образом, леммы 4.2.1 и 4.2.2 позволяют описать процесс планирования следующей системой:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda(x_N) q^T(x_N) \mathbf{D}_{ii}^{-1}(N) q(x_N)}{1 + \lambda(x_N) d(x_N, N)} &= \\ &= \max_{x \in X} \frac{\lambda(x) q^T(x) \mathbf{D}_{ii}^{-1}(N) q(x)}{1 + \lambda(x) d(x, N)}, \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

$$\mathbf{D}(N + 1) = \left[ \mathbf{I}_m - \frac{\lambda(x_N) \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(x_N) \mathbf{f}^T(x_N)}{1 + \lambda(x_N) d(x_N, N)} \right] \mathbf{D}(N).$$



В системе (4.2.8) для простоты полагается  $\Delta N = 1$ , хотя можно рассматривать последовательные процедуры и для  $\Delta N > 1$ .

Особенно простой и наглядный вид принимает (4.2.6) при  $l = m$  и  $l = 1$ :

$$|\mathbf{D}(N + \Delta N, \mathbf{x})| = [1 + \lambda(\mathbf{x}) \Delta N d(\mathbf{x}, N)] \cdot |\mathbf{D}(N)| \quad (4.2.9)$$

и

$$D_{\alpha\alpha}(N + \Delta N, \mathbf{x}) = D_{\alpha\alpha}(N) \left[ 1 - \frac{\lambda(\mathbf{x}) \Delta N \left( \sum_{\beta=1}^m D_{\alpha\beta}(N) f_{\beta}(\mathbf{x}) \right)^2}{1 + \lambda(\mathbf{x}) \Delta N d(\mathbf{x}, N)} \right]. \quad (4.2.10)$$

В этих случаях операция обращения матрицы (вычисляется  $\mathbf{D}(N)$ ) производится один раз на первом этапе последовательного планирования.

Остановимся на случае уточнения оценок всех параметров  $l = m$ . Первое уравнение системы (4.2.8) в этом случае становится эквивалентным уравнению

$$\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}_N, N) = \max_x \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, N). \quad (4.2.11)$$

Уравнение (4.2.11) имеет один и тот же вид для любого  $\Delta N$ . Следовательно, положение точки  $\mathbf{x}_N$ , в которой необходимо производить  $\Delta N$  измерений не зависит от значения  $\Delta N$ . Положение этой точки не меняется также и при умножении функции эффективности  $\lambda(\mathbf{x})$  на любой постоянный множитель. Этот факт крайне важен при практическом использовании (4.2.8), так как во многих случаях функция эффективности  $\lambda(\mathbf{x})$  известна лишь с точностью до постоянного множителя (см., например, [56]).

Отметим следующее интересное свойство последовательного планирования при  $l = m$ . Уравнение (4.2.11) указывает на то, что в каждый момент времени измерение должно проводиться в точке, где дисперсия оценки поверхности отклика максимальна (для простоты мы рассмотрим случай  $\lambda(\mathbf{x}) \equiv \text{const}$ ). Иными словами, экспериментатор может получить наибольшую информацию об изучаемой поверхности от измерений в тех точках, где о ней меньше всего известно.

**III.** Последовательное планирование, опирающееся на систему (4.2.8), дает максимальный прирост информации (в смысле уменьшения величины определителя  $|\mathbf{D}_{ll}|$ ) на каждом отдельном шаге. Но это вовсе не означает, что вся стратегия эксперимента является оптимальной в целом.

Рассмотрим вначале случай, когда эффективность  $\lambda(\mathbf{x})$  не меняется во времени (например, экспериментатор работает с одной и той же аппаратурой, с веществами одной и той же степени чистоты и т. д.). В этом случае (см. гл. 2) существует статический  $D$ -оптимальный непрерывный план  $\mathcal{G}^*(N)$ . Обозначим дисперсионную матрицу оценок параметров  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_l$ , соответствующую нормированному  $D$ -оптимальному плану, через  $\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)$ .

Очевидно, что для любого плана  $\mathcal{G}(N)$  должно выполняться неравенство

$$N^{-l} |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)| \leq |\mathbf{D}_{ll}(N)|. \quad (4.2.12)$$

Исходя из (4.2.12), мы будем считать стратегию последовательного планирования тем лучше, чем меньше разница между  $N |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)|$  и  $|\mathbf{D}_{ll}(N)|$ , где под  $\mathbf{D}(N)$  подразумевается дисперсионная матрица, соответствующая последовательному плану  $\mathcal{G}(N)$ .

Справедлива следующая теорема.

**Теорема 4.2.1.** *Последовательное планирование, проводимое по стратегии, предложенной выше, является асимптотически (при  $N \rightarrow \infty$ )  $D$ -оптимальным:*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-l} |\mathbf{D}_{ll}(N)| = |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)|.$$

**Доказательство.** Для уменьшения алгебраических выкладок рассмотрим случай  $l = m$ . Для усеченных  $D$ -оптимальных планов доказательство строится абсолютно аналогичным способом.

Перейдем к нормированным планам. Тогда система (4.2.8) примет вид:

$$\begin{cases} \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N)) = \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon(N)), \\ (N+1)^{-1} \mathbf{D}(\varepsilon(N+1)) = \\ = \left[ \mathbf{I}_m - \frac{N^{-1} \lambda(\mathbf{x}_N) \mathbf{D}(\varepsilon(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_N)}{1 + N^{-1} \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N))} \right] N^{-1} \mathbf{D}(\varepsilon(N)), \end{cases} \quad (4.2.13)$$

где  $\varepsilon(N)$  — нормированный план, соответствующий плану  $\mathcal{E}(N)$ . Положив  $\alpha_N = N^{-1}$ , систему (4.2.13) можно переписать в виде:

$$\begin{cases} \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N)) = \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon(N)), \\ \mathbf{D}(\varepsilon(N+1)) = (1 - \alpha_N)^{-1} \left[ 1 - \frac{\alpha_N \lambda(\mathbf{x}_N) \mathbf{D}(\varepsilon(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}'(\mathbf{x}_N)}{1 - \alpha_N + \alpha_N \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N))} \right] \mathbf{D}(\varepsilon(N)). \end{cases} \quad (4.2.14)$$

Сравнивая систему (4.2.14) с итерационной процедурой построения  $D$ -оптимальных планов, рассмотренной в § 2.5, нетрудно убедиться в совпадении нормированных планов, соответствующих планам  $\mathcal{E}(N)$ , с планами  $\varepsilon_N$ , которые строятся на каждой  $N$ -й итерации метода, предложенного в § 2.5, при  $\alpha_N = N^{-1}$ . Но согласно теореме 2.5.3 (см. также пояснения к указанной теореме, приведенные в заключительном разделе § 2.6)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |\mathbf{D}(\varepsilon_N)| = |\mathbf{D}(\varepsilon^*)|.$$

Следовательно,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |\mathbf{D}(\varepsilon(N))| = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-m} |\mathbf{D}(N)| = |\mathbf{D}(\varepsilon^*)|, \quad (4.2.15)$$

что и требовалось доказать.

В практических исследованиях для асимптотически оптимальных стратегий полезно знать, как сильно отличается последовательный план  $\varepsilon(N)$  от оптимального плана  $\varepsilon^*$ . В связи с этим исследуем вопрос о верхней границе для

$$|\mathbf{D}_n(N)| = N^{-l} |\mathbf{D}_n(\varepsilon(N))|.$$

Предположим, что к началу эксперимента, проводимого по предложенной в предыдущем параграфе стратегии, дисперсионная матрица оценок параметров  $\hat{\theta}$  имела значение  $\mathbf{D}(N_0)$ . Если план  $\varepsilon^*$  — непрерывный  $D$ -оптимальный план для данной регрессионной задачи, то найдется такое число  $\tilde{N}$ , что

$$\tilde{N}^{-l} |\mathbf{D}_n(\varepsilon^*)| = |\mathbf{D}_n(N_0)|, \quad (4.2.16)$$

причем  $\tilde{N} + C = N_0$ ,  $C \geq 0$ , где  $N$  — число измерений,

затраченное на эксперимент, в котором были получены оценки неизвестных параметров с дисперсионной матрицей  $\mathbf{D}(N_0)$ . Величину  $C$  можно трактовать как потери вследствие неоптимальности предварительного эксперимента.

Рассмотрим случай, когда  $l=m$ . Из (4.2.9) следует, что за одно измерение логарифм определителя дисперсионной матрицы уменьшается на величину

$$\Delta_N = \ln |\mathbf{D}(N)| - \ln \frac{|\mathbf{D}(N)|}{1 + \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, N)} = \\ = \ln [1 + N^{-1} \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N))].$$

Согласно теореме 2.2.2

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon(N)) > m,$$

если только план  $\varepsilon(N)$  отличен от  $D$ -оптимального. Поэтому

$$\Delta_N \geq \ln \left(1 + \frac{m}{N}\right). \quad (4.2.17)$$

С другой стороны, для непрерывного  $D$ -оптимального плана, удовлетворяющего условию (4.2.16), логарифм определителя дисперсионной матрицы уменьшается при увеличении количества измерений на единицу на величину

$$\Delta_N = \ln (N-C)^{-m} |\mathbf{D}(\varepsilon^*)| - \\ - \ln (N-C+1)^{-m} |\mathbf{D}(\varepsilon^*)| = \ln \left(1 + \frac{1}{N-C}\right)^m. \quad (4.2.18)$$

Опираясь на формулы (4.2.17) и (4.2.18), нетрудно доказать следующее утверждение.

**Теорема 4.2.2.** Если последовательное планирование осуществляется по предложенной выше стратегии и при  $N=N_0$  имеет место неравенство

$$1 + \frac{m}{N_0} \geq \left(1 + \frac{1}{N_0 - C}\right)^m, \quad (4.2.19)$$

то

$$|\mathbf{D}(N)| \leq (N-C)^{-m} |\mathbf{D}(\varepsilon^*)|. \quad (4.2.20)$$

**Доказательство.** Обе части неравенства (4.2.16) являются функциями, равными при  $N_0$  и монотонно

возрастающими при росте  $N$ . Скорость их роста определяется формулами (4.2.17) и (4.2.18) соответственно. Поэтому для доказательства теоремы достаточно показать, что

$$\ln\left(1 + \frac{m}{N}\right) \geq \ln\left(1 + \frac{1}{N-C}\right)^m \quad (4.2.21)$$

для любого  $N \geq N_0$ .

Рассматривая  $N$  как непрерывную переменную и дифференцируя обе части неравенства 4.2.21 по  $N$ , получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial N} \ln\left(1 + \frac{m}{N}\right) &= -\frac{m}{(N+m)N} \geq \\ &\geq \frac{\partial}{\partial N} \ln\left(1 + \frac{1}{N-C}\right)^m = -\frac{m}{(N-C)(N-C+1)}, \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

причем равенство имеет место лишь при  $C=0$ ,  $m=1$ . Из (4.2.19) и (4.2.22) с очевидностью следует справедливость неравенства (4.2.21).

Обобщение теоремы 4.2.2 на случай  $l < m$  хотя и несколько громоздко с вычислительной точки зрения, но принципиальных трудностей не представляет и может быть проделано читателем самостоятельно.

Если  $N_0 \gg l$ , то вместо теоремы 4.2.2 удобно пользоваться ее асимптотическим аналогом [57].

**Теорема 4.2.2\*.** Если  $N$ ,  $N_0 \gg l$ , то справедливо неравенство

$$|\mathbf{D}_l(N)| \leq (N-C)^{-l} |\mathbf{D}_l(\varepsilon^*)|. \quad (4.2.23)$$

**Доказательство.** Как и в теореме 4.2.1, доказательство проведем только для случая  $l=m$ . При достаточно больших  $N_0$  и  $N$  величины  $|\mathbf{D}(N)|$  и  $N^{-m} \times |\mathbf{D}(\varepsilon^*)|$  можно рассматривать как функции непрерывного аргумента  $N$ . Тогда

$$\frac{\partial}{\partial N} \ln(N-C)^m |\mathbf{D}(\varepsilon^*)| = -\frac{m}{N-C}$$

и (см. (4.2.9))

$$\frac{\partial}{\partial N} \ln |\mathbf{D}(N)| = -\lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, N) = -N^{-1} \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N)).$$

В силу теоремы эквивалентности (см. § 2.2)

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \varepsilon(N)) = \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N)) > m,$$

следовательно,

$$\frac{\partial}{\partial N} \ln |\mathbf{D}(N)| < -\frac{m}{N},$$

и для любого  $N \geq N_0$

$$\frac{\partial}{\partial N} \ln |\mathbf{D}(N)| < \frac{\partial}{\partial N} \ln (N-C)^m |\mathbf{D}(\epsilon^*)|. \quad (4.2.24)$$

Так как (см. условие (4.2.16))

$$\ln |\mathbf{D}(N_0)| = \ln N^{-m} |\mathbf{D}(\epsilon^*)|,$$

то из (4.2.24) и ограниченности соответствующих вторых производных следует:

$$\ln |\mathbf{D}(N)| \leq \ln (N-C)^m |\mathbf{D}(\epsilon^*)|,$$

что и доказывает теорему для случая  $l = m$ .

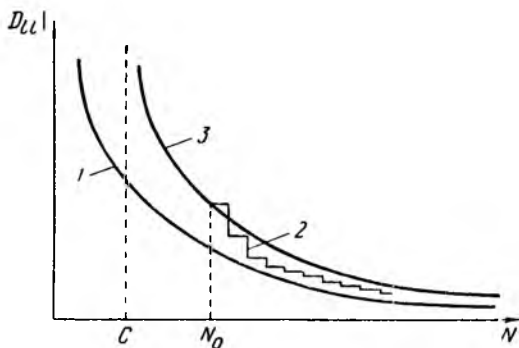


Рис. 21. Графическая интерпретация свойств последовательных планов при больших  $N_0$ .

Доказательство случая  $l < m$  проводится аналогично и опирается соответственно на результаты § 2.7 и формулу (4.2.8).

Таким образом, при достаточно больших  $N_0$  и  $N$  значение определителя  $|\mathbf{D}_{ll}(N)|$  заключено в границах

$$N^{-l} |\mathbf{D}_{ll}(\epsilon^*)| \leq |\mathbf{D}_{ll}(N)| \leq (N-C)^{-l} |\mathbf{D}_{ll}(\epsilon^*)|. \quad (4.2.25)$$

Графическая интерпретация этого результата представлена на рис. 21. Кривая 1 соответствует непрерывному  $D$ -оптимальному плану при  $\sum_{i=1}^n p_i = N$ , кривая 2 —

последовательному плану и кривая  $\mathcal{Z}$  — непрерывному  $D$ -оптимальному плану при  $\sum_{i=1}^n p_i = N - C$ . При неболь-

ших  $N_0$  значения соответствующих определителей могут, вообще говоря, не подчиняться (4.2.25), см. теорему 4.2.2.

Если потери вследствие неоптимальности предварительного эксперимента были невелики ( $N \geq C$ ), то верхняя и нижняя границы для определителя  $|\mathbf{D}_{ll}(N)|$  будут близки между собой и характеристики последовательных планов не будут практически отличаться от характеристик статических  $D$ -оптимальных планов.

В экспериментальной практике не всегда удается определить значение величины  $C$ . В этих случаях удаленность последовательного плана от  $D$ -оптимального можно оценить из неравенства

$$|\mathbf{D}_{ll}(N)| \leq N^{-l} e^{\lambda(x)d(x, l, \varepsilon(N)) - l} |\mathbf{D}_{ll}(\varepsilon^*)|. \quad (4.2.26)$$

Неравенство (4.2.26) доказывается тем же способом, что и неравенство (2.6.13).

В некоторых случаях, особенно при больших  $N$  (малых  $\lambda(x)d(x, N)$ ), первое уравнение системы (4.2.8) можно заменить на более простое уравнение

$$\lambda(x_N) q^T(x_N) \mathbf{D}_{ll}^{-1}(N) q(x_N) = \max_x \lambda(x) q^T(x) \mathbf{D}_{ll}^{-1}(N) q(x)$$

или эквивалентное ему уравнение [57] (ср. с § 2.7)

$$\begin{aligned} \lambda(x_N) f^T(x_N) \Delta(N) f(x_N) &= \\ &= \max_x \lambda(x) f^T(x) \Delta(N) f(x), \end{aligned} \quad (4.2.27)$$

где

$$\Delta(N) = \begin{vmatrix} \mathbf{D}_{ll}(N) & \mathbf{D}_{lk}(N) \\ \mathbf{D}_{kl}(N) & \mathbf{D}_{kk}(N) - \mathbf{M}_{kk}^{-1}(N) \end{vmatrix},$$

$l + k = m$ ,  $\mathbf{M}_{kk}(N)$  — подматрица информационной матрицы, соответствующая «ненужным» параметрам. Уменьшение определителя  $|\mathbf{D}_{ll}(N)|$  после  $(N+1)$ -го измерения в точке  $x_N$ , удовлетворяющей (4.2.27), будет меньше, чем при измерении в соответствующей точке, определяемой из первого уравнения системы (4.2.8). Асимптотические свойства последовательного планирования при использовании (4.2.27) остаются прежними, в чем нетрудно убедиться, проведя рассуждения, аналогичные проведенным в теоремах 4.2.1 и 4.2.2.

### § 4.3. Последовательные линейно оптимальные планы (линейная параметризация и постоянная во времени эффективность эксперимента)

Пусть имеют место предположения, сделанные в предыдущем параграфе. Будем считать план  $\mathcal{E}_1(N)$  предпочтительнее плана  $\mathcal{E}_2(N)$ , если

$$L[\mathbf{D}(\mathcal{E}_1(N))] < L[\mathbf{D}(\mathcal{E}_2(N))],$$

где оператор  $L$  удовлетворяет требованиям (2.9.2) — (2.9.4).

Рассмотрим последовательный план, который проводится по следующей схеме:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda(\mathbf{x}_N) L[\mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_N) \mathbf{D}(N)] = \\ \quad = \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) L[\mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N)], \\ \mathbf{D}(N+1) = \left[ \mathbf{I}_m - \frac{\lambda(\mathbf{x}_N) \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_N)}{1 + \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, N)} \right] \mathbf{D}(N). \end{array} \right. \quad (4.3.1)$$

Если

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, N) \neq \infty, \quad \mathbf{x} \in X, \quad (4.3.2)$$

т. е. план, к которому сходится последовательный план, невырожден, то имеет место следующее утверждение.

**Теорема 4.3.1.** *Последовательное планирование, проводимое по стратегии, определяемой системой (4.3.1), является асимптотически при  $N \rightarrow \infty$  линейно оптимальным:*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} L[\mathbf{D}(N)] = [\mathbf{D}(\varepsilon^*)],$$

где  $\varepsilon^*$  — непрерывный нормированный линейно оптимальный план.

**Доказательство.** Перейдем в системе (4.3.1) к нормированным планам:

$$\begin{aligned} \lambda(\mathbf{x}_N) L[\mathbf{D}(\varepsilon(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_N) \mathbf{D}(\varepsilon(N))] &= \\ &= \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) L[\mathbf{D}(\varepsilon(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\varepsilon(N))], \\ \mathbf{D}(\varepsilon(N+1)) &= \\ &= (1 - \alpha_N)^{-1} \left[ \mathbf{I} - \frac{\alpha_N \lambda(\mathbf{x}_N) \mathbf{D}(\varepsilon(N)) \mathbf{f}(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_N)}{1 - \alpha_N + \alpha_N \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon(N))} \right] \mathbf{D}(\varepsilon(N)), \end{aligned}$$

где  $\alpha_N = N^{-1}$ .

Сравнение данной системы и итерационной процедуры § 2.10 показывает, что нормированные планы,



соответствующие последовательным планам  $\mathcal{G}(N)$ , определяемым по системе (4.3.1), совпадают с планами  $\varepsilon_N$ , которые строятся на каждой  $N$ -й итерации численного метода построения линейно оптимальных планов при  $\alpha_N = N^{-1}$ . Согласно теореме 2.10.1 при выполнении условия

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, \varepsilon_N) = \lim_{N \rightarrow \infty} N \lambda(\mathbf{x}_N) d(\mathbf{x}_N, N) < \infty$$

последовательность планов  $\varepsilon_N$  сходится к линейно оптимальному плану, т. е.

$$\lim_{N \rightarrow \infty} L[\mathbf{D}(\varepsilon_N)] = L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)].$$

Переходя в последнем равенстве к ненормированным планам, нетрудно убедиться в справедливости теоремы.

Пусть

$$N^{-1}L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] = L[\mathbf{D}(N_0)], \quad (4.3.3)$$

где  $\tilde{N} + C = N_0$ ,  $C \geq 0$  и  $N_0$  — число измерений, затраченных на эксперимент, в котором были получены оценки искомых параметров с дисперсионной матрицей  $\mathbf{D}(N_0)$ . Имеет место утверждение:

**Теорема 4.3.2.** Если  $N_0 \gg m$ , то:

$$L[\mathbf{D}(N)] \leq (N - C)^{-1}L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)], \quad (4.3.4)$$

где  $N \geq N_0$ ,  $N - N_0$  — измерения, затраченные при последовательном планировании.

Доказательство данной теоремы полностью аналогично доказательству теоремы 4.2.2 и приводиться не будет.

Неравенство (4.3.4) может не выполняться, если нарушается условие (4.3.2). Если значение  $C$  определить невозможно, то вместо (4.3.4) можно пользоваться неравенством

$$L[\mathbf{D}(N)] \leq N^{-1}L[\mathbf{D}(\varepsilon^*)] + \delta, \quad (4.3.5)$$

где

$$\delta = \max_{\mathbf{x} \in X} L[\mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N)] - L[\mathbf{D}(N)].$$

Неравенство (4.3.5) является очевидным следствием неравенства (2.10.9).

Для удобства использования системы (4.3.1) выпишем значения величины  $L[\mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N)]$  для наибо-

лее широко используемых критериев оптимальности (табл. 2).

Таблица 2

$L [D]$	$L [Df(x) f^T(x) D]$
$Sp D$	$f^T(x) D^2 f(x)$
$\int_Z d(x) dx$	$f^T(x) D M D f(x) = \int f(x) f^T(x) dx$ или $\int_Z d^2(x, \tilde{x}) d\tilde{x}$
$l^T D l, l^T = \ l_1, \dots, l_m\ $	$[f^T(x) D l]^2$
$d(x_0)$	$d^2(x, x_0)$
$D_{\alpha\alpha}$	$\left[ \sum_{\beta=1}^m f_{\beta}(x) D_{\beta\alpha} \right]^2$
$E [(\theta - \hat{\theta})^T C (\theta - \hat{\theta})],$ $C = A A^T$	$f^T(x) D C D f(x)$ $Sp \varphi(x) \varphi^T(x), \varphi(x) = A^T D f(x)$

Эффективность последовательного планирования на каждом  $N$ -м шаге можно несколько повысить, если первое уравнение системы (4.3.1) заменить на уравнение:

$$\frac{\varphi(x_N, N)}{1 + \lambda(x_N) d(x_N, N)} = \max_{x \in X} \frac{\varphi(x, N)}{1 + \lambda(x) d(x, N)}, \quad (4.3.6)$$

где

$$\varphi(x, N) = \lambda(x) L [D(N) f(x) f^T(x) D(N)].$$

Проводя измерение в точке  $x_N$ , удовлетворяющей (4.3.6), мы получим наибольшее возможное за одно измерение уменьшение значения  $L [D(N)]$ . Замена первого уравнения системы (4.3.1) приводит к некоторому увеличению объема вычислений на каждом шаге, которое, однако, несущественно при использовании быстродейст-

вующих электронно-вычислительных машин. Асимптотические свойства (при  $N \rightarrow \infty$ ) последовательного планирования при использовании (4.3.6) по-прежнему определяются теоремами 4.3.1 и 4.3.2.

#### § 4.4. Последовательное планирование при нелинейной параметризации

**I.** Последовательное планирование особенно полезно при нелинейной параметризации поверхности отклика. Как указывалось ранее, при нелинейной параметризации возможно строить лишь локально оптимальные статические планы. Априори истинные значения параметров неизвестны, поэтому практическое применение локально оптимальных планов ограничивается лишь теми случаями, когда характеристики плана  $\mathcal{G}(\theta)$  мало изменяются в области  $\Omega$ , которой, по предположению экспериментатора, заведомо или с большой вероятностью принадлежит  $\theta_{\text{ист}}$ .

Рассмотрим два возможных случая:

1. Начальная информация об искомым параметрах  $\theta$  отсутствует. 2. Относительно искомым параметров  $\theta$  имеется некоторая начальная информация.

**II.** Значение матрицы  $M$  для любого плана  $\mathcal{G}(N)$  зависит от значений  $\theta_{\text{ист}}$ , которые неизвестны, поэтому для построения любого оптимального плана (здесь имеются в виду планы, минимизирующие некоторые функционалы от дисперсионной матрицы  $D(\hat{\theta})$ ) требуется найти область  $\Omega$ , которой принадлежат истинные значения параметров  $\theta_{\text{ист}}$  и в которой  $M(\theta, \mathcal{G}(N))$ ,  $\theta \in \Omega$ , не зависит или мало зависит от значения  $\theta$ . Если начальная информация об области локализации  $\theta_{\text{ист}}$  отсутствует, то у экспериментатора не остается иного пути, как проведение некоторого «затравочного» эксперимента для определения этой области.

К сожалению, вследствие недостаточного количества априорных сведений об изучаемой поверхности отклика (известны только вид поверхности  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  и эффективность  $\lambda(\mathbf{x})$ ) априорное построение оптимального плана «затравочного» эксперимента невозможно, так как в общем случае не существует плана  $\mathcal{G}(N)$ , не зависящего от  $\theta$ , при котором имел бы место

$$\min_{\mathcal{G}(N_0)} \mathcal{L} [M(\theta, \mathcal{G}(N_0))], \quad (4.4.1)$$

где  $N_0$  — число измерений, отведенных для «затравочного» эксперимента. Поэтому от «затравочного» плана мы будем требовать, чтобы он был невырожден, т. е. давал однозначные оценки  $\hat{\theta}$ . Обычно построить план, удовлетворяющий этому требованию, не представляет существенного труда. После проведения «затравочного» эксперимента возможны два пути планирования эксперимента: либо отыскать статический план  $\mathcal{E}(N - N_0)$ , минимизирующий величину

$$\mathcal{L}[\mathbf{M}(\hat{\theta}(N_0), \mathcal{E}(N_0) + \mathcal{E}(N - N_0))],$$

где  $N$  — число измерений, отведенное на весь эксперимент, а  $\hat{\theta}(N_0)$  — оценки параметров после  $N_0$  измерений; либо обратиться к последовательному планированию.

Первый вариант имеет следующие недостатки. Во-первых, у нас нет полной гарантии, что

$$\min_{\mathcal{E}(N - N_0)} \mathcal{L}[\mathbf{M}(\hat{\theta}(N_0), \mathcal{E}(N_0) + \mathcal{E}(N - N_0))]$$

близок к

$$\min_{\mathcal{E}(N - N_0)} \mathcal{L}[\mathbf{M}(\theta_{\text{ист}}, \mathcal{E}(N_0) + \mathcal{E}(N - N_0))]$$

вследствие возможного сильного отличия  $\hat{\theta}(N_0)$  от  $\theta_{\text{ист}}$ . Во-вторых, построение статического плана, учитывающего начальную информацию о параметрах ( $\mathbf{M} \neq 0$ ), как уже отмечалось выше, является сложной вычислительной задачей. Если же ограничиться построением плана  $\mathcal{E}^*(N - N_0)$ , осуществляющего

$$\min_{\mathcal{E}(N - N_0)} \mathcal{L}[\mathbf{M}(\hat{\theta}(N_0), \mathcal{E}(N - N_0))],$$

то суммарный план  $\mathcal{E}^*(N - N_0) - \mathcal{E}(N)$  может оказаться мало эффективным, так как при построении плана  $\mathcal{E}^*(N - N_0)$  никоим образом не учитывалось, что о поведении функции  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  в некоторых областях факторного пространства уже получено достаточно много информации (при реализации плана  $\mathcal{E}(N_0)$ ), и проведение дополнительных измерений (при реализации плана  $\mathcal{E}^*(N - N_0)$ ) в этих областях поэтому не выгодно.

Последовательное планирование, проводимое по стратегии, аналогичной предложенной в §§ 4.2, 4.3 для

случая линейной параметризации, свободно от указанных недостатков.

III. Последовательное планирование при нелинейной параметризации поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  осуществляется следующим образом.

1. Проводится некоторый «затравочный» эксперимент по невырожденному плану  $\mathcal{E}(N_0)$  из  $N_0$  измерений, в результате которого получают однозначные оценки  $\hat{\theta}(N_0)$  и приближенное значение их дисперсионной матрицы  $\mathbf{D}(\hat{\theta}(N_0)) \cong \mathbf{M}^{-1}(\hat{\theta}(N_0), \mathcal{E}(N_0))$  (см. § 1.4). Число предварительных измерений  $N_0$  выбирают таким, чтобы оно оказалось достаточным для реализации невырожденного плана  $\mathcal{E}$ , спектр которого содержит наименьшее число точек.

2. Координаты точки, в которой необходимо проводить  $(N+1)$ -е измерение, определяются после каждого  $N$ -го измерения из уравнений

$$\lambda(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}_N^T(\mathbf{x}_N) \Delta(N) \mathbf{f}_N(\mathbf{x}_N) = \\ = \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}_N^T(\mathbf{x}) \Delta(N) \mathbf{f}_N(\mathbf{x}) \quad (4.4.2)$$

для  $D$ -критерия и усеченного  $D$ -критерия сравнения результатов экспериментов и

$$\lambda(\mathbf{x}_N) L[\mathbf{D}(N) \mathbf{f}_N(\mathbf{x}_N) \mathbf{f}_N^T(\mathbf{x}_N) \mathbf{D}(N)] = \\ = \max_{\mathbf{x} \in X} \lambda(\mathbf{x}) L[\mathbf{D}(N) \mathbf{f}_N(\mathbf{x}) \mathbf{f}_N^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N)] \quad (4.4.3)$$

для линейных критериев сравнения результатов эксперимента.

В (4.4.2) и (4.4.3) использованы следующие обозначения:

$$\mathbf{f}_N^T(\mathbf{x}) = \left\| \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \theta)}{\partial \theta_1}, \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \theta)}{\partial \theta_2}, \dots, \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \theta)}{\partial \theta_m} \right\|_{\theta = \hat{\theta}_N}, \quad (4.4.4)$$

$$\mathbf{D}^{-1}(N) = \mathbf{M}(\hat{\theta}(N)) = \sum_{i=1}^n \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}_N(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}_N^T(\mathbf{x}_i), \quad (4.4.5)$$

частные реализации  $L[\mathbf{D}(N) \mathbf{f}_N(\mathbf{x}) \mathbf{f}_N^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N)]$  определяются из таблицы 2 с соответствующим использованием (4.4.4) и (4.4.5), матрица  $\Delta(N)$  определяется так же, как и в пояснениях к (4.2.27).

Вместо уравнений (4.4.2) и (4.4.3) можно использовать уравнения типа (4.2.8) и (4.3.5), которые по сравнению с первыми дают на каждом заданном шаге несколько больший прирост информации.

3. После каждого  $(N + 1)$ -го измерения вычисляется матрица  $\mathbf{D}(N + 1)$  по формуле (4.2.4) с соответствующей заменой функций  $f(\mathbf{x})$  на  $f_{N+1}(\mathbf{x})$ .

При небольшом числе неизвестных параметров и малых  $N$  рекомендуется вычислять дисперсионную матрицу  $\mathbf{D}(N + 1)$ , непосредственно опираясь на метод, изложенный в § 1.4 и использующий результаты всех  $(N + 1)$  измерений. Дело в том, что формула (4.2.4), позволяющая избежать этой операции при линейной параметризации, выведена в предположении независимости элементов матрицы  $\mathbf{M}$  от оценок  $\hat{\theta}(N)$ . В данном случае элементы матрицы  $\mathbf{M}$  зависят от оценок  $\hat{\theta}(N)$ , поэтому указанную формулу можно использовать, лишь когда  $\hat{\theta}(N)$  незначительно отличается от  $\hat{\theta}(N + 1)$ .

Иногда на каждом шаге оказывается удобным проводить по несколько измерений. Асимптотические свойства последовательного планирования при этом не изменяются, но рост точности определения оценок искомых параметров будет в общем случае замедляться. Это объясняется тем, что мы можем «задерживаться» в некоторых точках факторного пространства, в то время как необходимые сведения о поведении поверхности отклика в этих точках уже получены.

Выбор числа измерений на каждом шаге формализовать в общем случае не удастся. Обычно эта величина определяется из соотношения стоимости измерения и стоимости обчета каждого этапа последовательного планирования. Очевидно, что в случае, когда затраты на каждое измерение значительно ниже, чем затраты на соответствующие расчеты, то имеет смысл измерения группировать. В то же время при очень дорогих измерениях можно проводить расчеты после каждого измерения.

Асимптотическая оптимальность последовательного планирования, проводимого по стратегии 1—3, следует из состоятельности \*) наилучшей квазилинейной оценки  $\hat{\theta}$  при невырожденном предельном плане. Действительно,

\*) Точнее, из строгой состоятельности (подробнее см. [79]).

при  $N \rightarrow \infty$  оценка  $\hat{\theta}$  сходится по вероятности к  $\theta_{\text{ист}}$ . Поэтому, начиная с некоторого  $N(\delta)$ ,  $\delta > 0$ , матрица  $\mathbf{M}(\hat{\theta}(N), \mathcal{E}(N))$  будет мало отличаться от  $\mathbf{M}(\theta_{\text{ист}}, \mathcal{E}(N))$ , т. е.

$$\max_{\alpha, \beta} |M_{\alpha\beta}(\hat{\theta}(N), \mathcal{E}(N)) - M_{\alpha\beta}(\theta_{\text{ист}}, \mathcal{E}(N))| < \delta,$$

и следовательно, положения точек  $\mathbf{x}_N$ , определяемые (4.4.2) или (4.4.3), будут близки к точкам, которые определялись бы в результате последовательного планирования при заданном  $\theta_{\text{ист}}$ . Если  $\theta_{\text{ист}}$  известно, то задача планирования при нелинейной параметризации сводится к задаче планирования эксперимента при линейной параметризации (см. § 1.4). Отсюда и из §§ 4.2 и 4.3 следует, что последовательное планирование при известном  $\theta_{\text{ист}}$  является асимптотически оптимальным, что влечет за собой асимптотическую оптимальность планирования, проводимого согласно пунктам 1—3. Таким образом, последовательные планы при  $N \rightarrow \infty$  стремятся к локально оптимальным планам.

IV. Если об искомым параметрах  $\theta$  имеются априорные сведения (известна область локализации  $\theta_{\text{ист}}$ ), то необходимость в «затравочном» эксперименте отпадает и экспериментатор может приступить к последовательному планированию, проводимому по стратегии, определяемой (4.4.2), (4.4.3). Очевидно, что асимптотические свойства подобного планирования будут те же, что и планирования, рассмотренного в предыдущем пункте.

При использовании уравнений (4.4.2) или (4.4.3) необходимо знать матрицу  $\mathbf{D}(N)$ .

Если планируемый эксперимент является продолжением ранее проделанных экспериментальных исследований, результаты которых выражены в терминах оценок и их дисперсионной матрицы, то к моменту отыскания первой оптимальной точки  $\mathbf{x}_0$  нам известны предварительные оценки  $\hat{\theta}(N_0)$  и их дисперсионная матрица  $\mathbf{D}(N_0)$ , и возможность применения (4.4.2) или (4.4.3) очевидна.

Нередко априорные сведения о параметрах  $\theta$  не выражены в терминах оценок и их дисперсионной матрицы. Примером таких сведений могут служить сведения об области  $\Omega$  локализации  $\theta_{\text{ист}}$ , полученные из теоретических соображений, качественного анализа изучаемого процесса, анализа результатов аналогичных экспериментов

и т. д. В подобных случаях области  $\Omega$  рекомендуется сопоставлять некоторый эллипсоид (характеристики которого определяются матрицей  $\mathbf{D}$ , см. § 1.3) с центром, совпадающим (с точки зрения предварительного анализа) с наиболее вероятным значением искомого параметра. Например, если в результате анализа априорной информации экспериментатор может предполагать, что с вероятностью  $p \geq 68\%$  истинное значение искомого параметра  $\theta_{\text{ист}}$  заключено в интервале, определяемом неравенствами  $\theta_{\alpha 1} \leq \theta_{\text{ист}} \leq \theta_{\alpha 2}$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots, m$ , то в качестве  $\hat{\theta}(0)$  можно выбрать следующие величины:

$$\hat{\theta}_{\alpha}(0) = \frac{\theta_{\alpha 2} + \theta_{\alpha 1}}{2}, \quad \text{а в качестве дисперсионной матрицы —}$$

$$D_{\alpha\alpha}(0) = \left(\frac{\theta_{\alpha 2} - \theta_{\alpha 1}}{2}\right)^2; \quad D_{\alpha\beta}(0) = 0, \quad \alpha \neq \beta, \quad (4.4.6)$$

и затем, опираясь на них, строить последовательный план.

В обоих случаях, рассматриваемых в данном пункте, мы сталкиваемся с необходимостью объединять априорную информацию с информацией, поступающей в результате проведения планируемого эксперимента. Объединение априорных и новых результатов удобно проводить, используя следующую теорему.

**Теорема 4.4.1.** Пусть в результате эксперимента  $\mathcal{E}_1$  получены оценки  $\hat{\theta}_1$  с дисперсионной матрицей  $\mathbf{D}_1$ , тогда после проведения эксперимента  $\mathcal{E}_2$  наилучшими линейными (квазилинейными) оценками  $\hat{\theta}$  являются:

$$\hat{\theta} = [\mathbf{M}(\mathcal{E}_1) + \mathbf{M}(\mathcal{E}_2)]^{-1} \mathbf{M}(\mathcal{E}_1) \hat{\theta}_1 +$$

$$+ [\mathbf{M}(\mathcal{E}_1) + \mathbf{M}(\mathcal{E}_2)]^{-1} \mathbf{Y}(\mathcal{E}_2). \quad (4.4.7)$$

Дисперсионная матрица оценок  $\hat{\theta}$  равна

$$\mathbf{D}(\hat{\theta}) = [\mathbf{M}(\mathcal{E}_1) + \mathbf{M}(\mathcal{E}_2)]^{-1}. \quad (4.4.8)$$

Здесь

$$\mathbf{M}(\mathcal{E}_1) = \mathbf{D}^{-1}(\hat{\theta}_1),$$

$$\mathbf{M}(\mathcal{E}_2) = \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i),$$

$$\mathbf{Y}(\mathcal{E}_2) = \sum_{i=1}^n w_i y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i),$$



$y_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) — результаты измерений эксперимента  $\mathcal{E}_2$ ; остальные обозначения те же, что и в § 1.3 (или § 1.4).

Доказательство. Пусть в течение эксперимента  $\mathcal{E}_1$  проведены измерения  $\hat{y}_j$  ( $j=1, 2, \dots, l$ ), тогда согласно § 1.3 (§ 1.4)

$$\hat{\theta} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Y}, \quad (4.4.9)$$

где

$$\mathbf{M} = \sum_{j=1}^l \tilde{\omega}_j \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) = \mathbf{M}(\mathcal{E}_1) + \mathbf{M}(\mathcal{E}_2) \quad (4.4.10)$$

и

$$\mathbf{Y} = \sum_{j=1}^l \tilde{\omega}_j y_j \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^n \omega_i y_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{Y}(\mathcal{E}_1) + \mathbf{Y}(\mathcal{E}_2). \quad (4.4.11)$$

Умножая первое слагаемое (4.4.11) на  $\mathbf{I}_m = \mathbf{M}(\mathcal{E}_1) \mathbf{M}^{-1}(\mathcal{E}_1)$ , получим

$$\mathbf{Y} = \mathbf{M}(\mathcal{E}_1) \hat{\theta}_1 + \mathbf{Y}(\mathcal{E}_2). \quad (4.4.12)$$

Объединяя (4.4.9), (4.4.10) и (4.4.12), получим (4.4.7).

Если план  $\mathcal{E}_2$  невырожден ( $|\mathbf{M}(\mathcal{E}_2)| \neq 0$ ), то вместо формулы (4.4.6) иногда удобно пользоваться ее модификацией:

$$\hat{\theta} = [\mathbf{M}(\mathcal{E}_1) + \mathbf{M}(\mathcal{E}_2)]^{-1} [\mathbf{M}(\mathcal{E}_1) \hat{\theta}_1 + \mathbf{M}(\mathcal{E}_2) \hat{\theta}_2]. \quad (4.4.13)$$

Возможность использования результатов теоремы 4.4.1 в случае, когда априорные сведения заданы в виде результатов некоторого эксперимента, очевидна. В ином случае возможность применения этих результатов не вытекает явно из доказательства теоремы. Однако следует учесть, что для каждой матрицы  $\mathbf{M}(0)$ , обратной матрице  $\mathbf{D}(0)$ , которая определяется, например, по процедуре (4.4.6), можно построить план «фиктивного» эксперимента  $\mathcal{E}_1$  (ср. с теоремой 2.1.2), дающего информационную матрицу, равную  $\mathbf{M}(\mathcal{E}_1) = \mathbf{M}(0)$ . Повторяя затем рассуждения теоремы 4.4.1 уже с «фиктивным» экспериментом  $\mathcal{E}_1$ , нетрудно убедиться в справедливости ее и для случая, когда априорные сведения получены из теоретического или качественного анализа изучаемого процесса или из других косвенных источников.

Предложенная процедура использования априорных сведений близка по своему духу к байесовскому подходу построения оценок (см., например, [58], [59]), опирающемуся на априорную функцию распределения в пространстве искомых параметров. Так же, как и при байесовском подходе, роль априорных сведений при использовании (4.4.7) и (4.4.8) уменьшается при увеличении числа новых измерений. Действительно, при  $N \rightarrow \infty$  суммарный вес новых измерений  $\sum_{i=1}^N \omega_i \rightarrow \infty$  и выражения (4.4.7) и (4.4.8) принимают вид

$$\hat{\theta} \simeq M(\mathcal{G}_2) Y(\mathcal{G}_2), \quad D(\hat{\theta}) \simeq M(\mathcal{G}_2).$$

Данные равенства говорят о том, что даже в случае неправильных априорных сведений при достаточно большом числе измерений результаты будут близки к истинным. В то же время, если априорные сведения были верны, то при небольшом числе измерений мы добиваемся существенного увеличения точности результатов (см. (4.4.8)). Нетрудно видеть, что теорема 4.4.1 позволяет объединять также сведения, полученные в данном эксперименте, и сведения, поступающие извне (например, из новых публикаций) во время его реализации.

Следующий пример в основном (особенно с химической точки зрения) опирается на пример, изложенный в [54].

**Пример.** Рассмотрим химическую реакцию типа



Теоретический анализ данной реакции показал [54], что она может быть описана следующей моделью:

$$\eta(x, \theta) = \frac{\theta_3 \theta_1 x_1}{1 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2}, \quad (4.4.15)$$

где  $\eta$  — скорость химической реакции,  $x_1$  — парциальное давление исходного продукта  $R$ ,  $x_2$  — парциальное давление продукта  $P_1$ ,  $\theta_2$  — адсорбционная равновесная константа для продукта  $P_1$ ,  $\theta_3$  — эффективная константа скорости реакции,  $\theta_1$  — адсорбционная равновесная константа для реагента  $R$ .

Эта модель предложена для некоторых каталитических реакций типа (4.4.15), в которых реагент  $R$  — неко-

торый четвертичный или первичный спирт с длинной цепочкой, продукт  $P_1$  — олефин и продукт  $P$  — вода.

Истинные значения параметров  $\theta^T = \|\theta_1, \theta_2, \theta_3\|$ , которые, конечно, предполагаются неизвестными экспериментатору, были найдены для каталитического обезвоживания  $n$ -гексилового спирта при  $550^\circ\text{F}$ :

$$\theta_{1\text{ист}} = 2,9; \quad \theta_{2\text{ист}} = 12,2; \quad \theta_{3\text{ист}} = 0,69. \quad (4.4.16)$$

Предположим, что цель эксперимента — определить как можно точнее параметры  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$  и что в качестве меры точности используется определитель информационной матрицы. В дальнейшем мы будем считать, что измерения

Таблица 3  
... возможны в области

$$0 \leq x_1 \leq 3, \quad 0 \leq x_2 \leq 3.$$

Номер опыта	$x_1$	$x_2$	$y$
1	1	1	0,126
2	2	1	0,219
3	1	2	0,076
4	2	2	0,126

Результат измерения в точке  $x^T = \|x_1, x_2\|$ , принадлежащей указанной области, будем моделировать, используя таблицы случайных чисел. Предполагается, что  $y$  нор-

мально распределено около среднего  $\eta(x, \theta_{\text{ист}})$  с постоянной по  $x$  дисперсией  $\sigma^2 = 0,01$ .

Предварительные оценки параметров  $\theta$  были получены из эксперимента, проведенного в четырех точках (см. табл. 3), и равны

$$\hat{\theta}_1(4) = 10,39; \quad \hat{\theta}_2(4) = 48,83; \quad \hat{\theta}_3(4) = 0,74.$$

Предполагая, что оценки  $\hat{\theta}(4)$  не слишком сильно отличаются от истинных (в противном случае первые шаги последовательного планирования будут малоэффективными), воспользуемся развитым выше методом. Вычислим функции  $\hat{f}_4(x)$ :

$$\hat{f}_\alpha(4)(x) = \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} \frac{\theta_3 \theta_1 x_1}{1 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2} \Big|_{\hat{\theta} = \hat{\theta}(4)}, \quad (4.4.17)$$

или, более подробно,

$$\hat{f}_1(4)(x) = \frac{0,74x_1 + 36,1x_1x_2}{(1 + 10,39x_1 + 48,83x_2)^2},$$

$$\hat{f}_2(4)(x) = \frac{7,66x_1x_2}{(1 + 10,39x_1 + 48,83x_2)^2},$$

$$\hat{f}_3(4)(x) = \frac{10,39x_1}{(1 + 10,39x_1 + 48,83x_2)}.$$

После четырех измерений информационная матрица с точностью до постоянного множителя будет иметь вид

$$\mathbf{M}(4) = \sum_{i=1}^4 \mathbf{f}_{(4)}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}_{(4)}^T(\mathbf{x}_i), \quad (4.4.18)$$

причем значения координат точек  $\mathbf{x}_i$  ( $i=1, 2, 3, 4$ ) заданы. При составлении (4.4.18) учтено, что все измерения равноточны. Подставив значения  $\mathbf{x}_i$  ( $i=1, 2, 3, 4$ ) и обратив матрицу  $\mathbf{M}(4)$ , построим величину

$$d(\mathbf{x}, 4) = \mathbf{f}_{(4)}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(4) \mathbf{f}_{(4)}(\mathbf{x})$$

и решим уравнение

$$d(\mathbf{x}_5, 4) = \max_{\mathbf{x} \in X} d(\mathbf{x}, 4). \quad (4.4.19)$$

Заметим, что величина  $d(\mathbf{x}, 4)$  приблизительно равна дисперсии оценки поверхности отклика ( $d(\mathbf{x}, 4) \simeq \simeq d[\hat{\eta}(\mathbf{x}, 4)]$ ), причем точность приближения определяется гладкостью  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  как функции  $\theta$  и близостью  $\hat{\theta}(4)$  к  $\theta_{\text{ист}}$  (см. § 1.4). Решением уравнения (4.4.19) является точка (и именно в этой точке необходимо проводить пятое измерение) с координатами

$$x_{1(5)} = 0,1; \quad x_{2(5)} = 0,0.$$

Поиск решения производился методом сетки. (Вычислялись значения  $d(\mathbf{x}, 4)$  в каждой из  $31 \times 31$  точек  $\mathbf{x}_{j_j}$ .)

Эксперимент, «проведенный» в точке  $\mathbf{x}_{(5)}$ , дал результат  $y_5 = 0,186$ . Используя его, получим

$$\hat{\theta}^T(5) = \| 3,11; 15,19; 0,79 \|^T.$$

По формуле (4.4.20) подсчитываем производные при  $\theta = \hat{\theta}(5)$ , составляем матрицу  $\mathbf{M}(5)$ , отыскиваем максимум по  $\mathbf{x}$  величины  $d(\mathbf{x}, 5)$ . Максимум достигается при  $\mathbf{x}^T = \| 3,0; 0,0 \|^T$ . В табл. 4 представлены значения  $d(\mathbf{x}, 5) / \max_{\mathbf{x} \in X} d(\mathbf{x}, 5)$  на сетке, состоящей из  $7 \times 7$  точек.

Вслед за этим проводим измерение в точке  $\mathbf{x}_6$ , находим оценки  $\hat{\theta}(6)$  и т. д. Всего аналогичным образом было спланировано еще семь измерений. Результаты планирования и опытов представлены в табл. 5.

$x_2$	$x_1$						
	0	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0
3,0	0,0015	0,0015	0,0019	0,0019	0,0019	0,0019	0,0019
2,5	0,0015	0,0015	0,0019	0,0019	0,0019	0,0019	0,0019
2,0	0,0015	0,0019	0,0019	0,0019	0,0019	0,0019	0,0022
1,5	0,0015	0,0019	0,0019	0,0019	0,0019	0,0022	0,0030
1,0	0,0015	0,0019	0,0019	0,0019	0,0030	0,0055	0,0101
0,5	0,0015	0,0019	0,0026	0,0082	0,0212	0,0416	0,0676
0	0,0015	0,0145	0,429	0,645	0,800	0,914	1

Таблица 5

Номер опыта	$x_1$	$x_2$	$y$	$\theta_1$	$\theta_2$	$\theta_3$
1	1,0	1,0	0,126			
2	2,0	1,0	0,219			
3	1,0	2,0	0,076			
4	2,0	2,0	0,126	10,39	48,83	0,74
5	0,1	0,0	0,186	3,11	15,19	0,79
6	3,0	0,0	0,606	3,96	15,32	0,66
7	0,2	0,0	0,268	3,61	14,00	0,66
8	3,0	0,0	0,614	3,56	13,96	0,67
9	0,3	0,0	0,318	3,32	13,04	0,67
10	3,0	0,8	0,298	3,33	13,48	0,67
11	3,0	0,0	0,509	3,74	13,71	0,63
12	0,2	0,0	0,247	3,58	13,15	0,63
13	3,0	0,8	0,319	3,57	12,77	0,63

Моделирование эксперимента было прекращено, как только разброс оценок параметров стал незначителен и значения оценок стали близки к теоретическим значениям параметров  $\theta_1$ ,  $\theta_2$ ,  $\theta_3$ . На практике подобные эксперименты обычно прекращаются, если определитель  $|D(N)|$  или функция потерь (см. § 1.9) становится меньше некоторого наперед заданного числа.

Обсудим результаты проведенного планирования. Нетрудно видеть, что значения  $x_i$  ( $i=5, 6, \dots, 13$ ) сосредоточены вблизи трех точек (рис. 22)  $A, B, C$ . Для наглядности на этом же рисунке проведены линии постоянных значений  $\eta(x, \theta_{\text{ист}})$ . Согласно теореме 4.2.1 и результатам

данного параграфа эти точки должны соответствовать локальному  $D$ -оптимальному плану при нулевой начальной информации ( $M=0$ ). Число измерений  $N_1, N_2, N_3$  ( $N_1 + N_2 + N_3 = N$ ), которое необходимо провести в каждой точке локального  $D$ -оптимального плана, должно быть пропорционально частоте появления этой точки в последовательном планировании (ср. с результатами § 2.5). Для точного определения характеристик оптимального

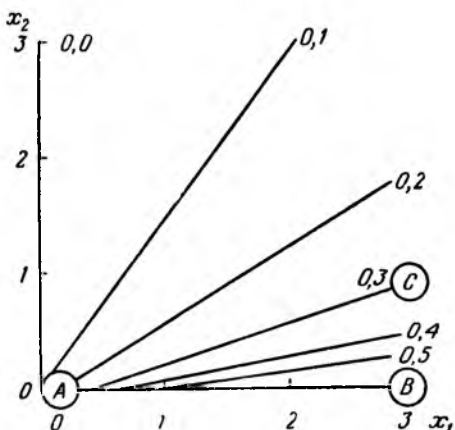


Рис. 22. Контурная диаграмма поверхности отклика для модели (4.4.1) [54].

Кружками отмечены положения точек измерения, полученных методом последовательного планирования.

плана было просчитано еще около ста циклов типа (4.4.17) — (4.4.19). Локальным  $D$ -оптимальным планом для  $\theta_{ист}$ , определяемых (4.4.16), оказался следующий план:

$$e^*(\theta_{ист}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{x}_1^T = \| 0,2; 0,0 \|, \mathbf{x}_2^T = \| 3,0; 0,0 \|, \mathbf{x}_3^T = \| 3,0; 1,0 \| \\ p_1 = p_2 = p_3 = \frac{1}{3} \end{array} \right\}.$$

В табл. 6 приведены характеристики нескольких планов. Как и следовало ожидать, наиболее выгодным является план 3, который, однако, не может быть построен априори ( $\theta_{ист}$  в реальных задачах не известны). За ним следует план 2, затем 1. План, построенный в вершинах области действия (см. рис. 22), вырожден.

№	Характеристики планов	Отношение $ D_j / D(e^*(\theta_{ист}, 12)) $
1	$x_1^T = \ 1,0; 1,0\ $ , $x_2^T = \ 1,0; 2,0\ $ , $x_3^T = \ 2,0; 1,0\ $ , $x_4^T = \ 2,0; 2,0\ $	$\sim 0,5 \cdot 10^8$
	$N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = 3$	
2	Первые 12 точек из табл. 5	$\sim 1,5$
	$N_i = 1 (i = 1, 2, \dots, 12)$	
3	$x_1^T = \ 0,1; 0,0\ $ ; $x_2^T = \ 3,0; 0,0\ $ , $x_3^T = \ 3,0; 0,8\ $	1,0
	$N_1 = N_2 = N_3 = 4$	

В данном примере для поиска максимальных значений  $d(x, N)$  применялся метод сетки. Этот метод несколько громоздок с вычислительной точки зрения, однако он представляет экспериментатору информацию, которую трудно или невозможно получить при другом методе, например, градиентном. Действительно, имея перед собой данные типа табл. 4, экспериментатор легко видит, насколько точно он должен фиксировать каждую из контролируемых переменных.

Так, например, из табл. 4 следует, что особое внимание должно быть уделено фиксации координаты  $x_2$  — парциальному давлению реагента R и значительно меньше внимания может быть уделено фиксации координаты  $x_1$  — парциальному давлению продукта P.

Выше последовательное планирование эксперимента проводилось по стратегии, которая позволяла максимизировать определитель информационной матрицы. Если экспериментальная ситуация такова, что наиболее подходящей мерой точности эксперимента является некоторая иная величина, например, средняя дисперсия оценива-

емых параметров, то на каждом этапе последовательного планирования следует отыскивать соответственно

$$\max_x \mathbf{f}_N^1(\mathbf{x}) \mathbf{D}^2(N) \mathbf{f}_N(\mathbf{x}).$$

Результаты последовательного планирования моделированного эксперимента представлены в табл. 7. В этой же таблице приведены характеристики локально  $A$ -оптимального плана и плана, все измерения в котором сосредоточены в четырех точках, выбранных априори.

Таблица 7

№	Характеристики планов	Отношение $\text{Sp } \mathbf{D}_j / \text{Sp } \mathbf{D} (\varepsilon^* (\theta_{\text{ист}}, 12))$
1	$\mathbf{x}_1^T = \  1,0; 1,0 \ $ , $\mathbf{x}_2^T = \  1,0; 2,0 \ $ , $\mathbf{x}_3^T = \  2,0; 1,0 \ $ , $\mathbf{x}_4^T = \  2,0; 2,0 \ $	$\sim 2,3 \cdot 10^3$
	$N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = 3$	
2	$\mathbf{x}_1^T = \  1,0; 1,0 \ $ ; $\mathbf{x}_2^T = \  1,0; 2,0 \ $ ; $\mathbf{x}_3^T = \  2,0; 1,0 \ $ ; $\mathbf{x}_4^T = \  2,0; 2,0 \ $ ; $\mathbf{x}_5^T = \  0,3; 0,0 \ $ ; $\mathbf{x}_6^T = \  3,0; 0,6 \ $ ; $\mathbf{x}_7^T = \  0,3; 0,0 \ $ ; $\mathbf{x}_8^T = \  3,0; 0,6 \ $ ; $\mathbf{x}_9^T = \  0,3; 0,0 \ $ ; $\mathbf{x}_{10}^T = \  3,0; 0,75 \ $ ; $\mathbf{x}_{11}^T = \  0,3; 0,0 \ $ ; $\mathbf{x}_{12}^T = \  3,0; 0,75 \ $	$\sim 1,5$
3	$\mathbf{x}_1^T = \  0,3; 0,0 \ $ ; $\mathbf{x}_2^T = \  3,0; 0,0 \ $ ; $\mathbf{x}_3^T = \  3,0; 0,6 \ $ ; $\mathbf{x}_4^T = \  3,0; 0,75 \ $	1,0
	$N_1 = 6; N_2 = N_3 = 1, N_4 = 4$	

В заключение отметим, что данный пример иллюстрирует также фундаментальное различие между проблемой, целью которой является оценка поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$ , и проблемой, целью которой является оценка параметров  $\theta$ . Например, после четырех измерений оценка для  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  в области проделанных измерений находится



в хорошем согласии с экспериментом, в то время как оценки  $\hat{\theta}_1(4)$  и  $\hat{\theta}_2(4)$  сильно отличаются от истинных значений соответствующих параметров.

Этот факт характеризует компенсационную природу ошибок оценок  $\hat{\theta}_1(4)$  и  $\hat{\theta}_2(4)$ . Хотя обе оценки много больше, чем соответствующие истинные значения, ошибки таковы, что при подстановке оценок на место  $\theta_1$  и  $\theta_2$  результаты в терминах оценок величины  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  оказываются в хорошем согласии с истинными величинами в области, где проводились измерения. Такая корреляция среди оценок свойственна для моделей рассмотренного типа.

#### § 4.5. Планирование при неизвестной функции эффективности эксперимента

1. Во многих экспериментальных исследованиях функция эффективности эксперимента  $\lambda(\mathbf{x})$  бывает неизвестна или плохо известна. Статическое планирование в этих случаях невозможно (напомним, что для статического планирования функцию эффективности эксперимента необходимо знать с точностью до постоянного множителя). Исследуем, каковы при этом возможности последовательного планирования экспериментов.

Будем предполагать, что функция  $\lambda(\mathbf{x})$  — либо достаточно гладкая в области действия  $X$ , где проводятся измерения, либо известен ее вид  $\lambda(\mathbf{x}, \omega)$  как функции некоторых неизвестных параметров  $\omega^T = \|\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_k\|$ . В дальнейшем мы будем рассматривать только последний случай. Первый случай сводится ко второму путем аппроксимации  $\lambda(\mathbf{x})$  некоторым полиномом  $\sum_{\alpha=1}^k \omega_{\alpha} \varphi_{\alpha}(\mathbf{x})$  (это возможно в силу гладкости  $\lambda(\mathbf{x})$ ).

Отметим, что функция эффективности эксперимента по определению всегда не меньше нуля. Поэтому оценки коэффициентов  $\omega$  должны отыскиваться лишь среди множества, для которого выполняется неравенство  $\sum_{\alpha=1}^k \omega_{\alpha} \varphi_{\alpha}(\mathbf{x}) \geq 0$ .

Обычно это требование вызывает дополнительные вычислительные трудности. Чтобы их избежать, рекомендуется

аппроксимировать не непосредственно функцию  $\lambda(\mathbf{x})$ , а например,  $\ln \lambda(\mathbf{x})$ . В этом случае на аппроксимирующий полином не накладываются дополнительных ограничений, так как логарифм функции эффективности может принимать любое значение, заключенное между  $-\infty$  и  $+\infty$ .

II. Рассмотрим следующую стратегию эксперимента.

1. Составляется план  $\varepsilon(N_0)$ , который позволял бы однозначно определить оценки функций  $\lambda(\mathbf{x}, \omega)$  и  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$ . В каждой точке плана  $\mathbf{x}_i$  ( $i=1, 2, \dots, n \geq \max(k, m)$ ) должно проводиться по несколько измерений  $r_i$  ( $\sum_{i=1}^n r_i = N_0$ ),

для того чтобы определить оценку дисперсии  $d_i$  измеряемой величины  $y_i$ . Оценка дисперсии вычисляется по формуле

$$\hat{d}_i = \frac{\sum_{r=1}^{r_i} (y_{ir} - y_i)^2}{(r_i - 1) r_i}, \quad y_i = r_i^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} y_{ir}.$$

В качестве оценок параметров  $\omega$  можно использовать величины  $\hat{\omega}(N_0)$ , соответствующие

$$\min_{\omega} \sum_{i=1}^n [\hat{d}_i^{-1} - \lambda(\mathbf{x}_i, \omega)]^2. \quad (4.5.1)$$

Можно проверить, что оценки  $\hat{\omega}$  при довольно слабых ограничениях являются состоятельными (ср. с § 1.4). За предварительные оценки параметров  $\theta$  выбираются величины  $\hat{\theta}(N_0)$ , соответствующие

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \eta(\mathbf{x}_i, \theta)]^2,$$

где  $\omega_i = \hat{d}_i^{-1} r_i$ . При не слишком малых  $r_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) оценки  $\hat{\theta}(N_0)$  будут близки по своим характеристикам к наилучшим линейным (квазилинейным) оценкам. Вычисление  $\hat{\theta}(N_0)$  может производиться по формулам §§ 1.3, 1.4 с заменой в них  $\omega_i$  на  $\hat{d}_i^{-1}$ . Дисперсионная матрица оценок  $\hat{\theta}(N_0)$  определяется по приближенной формуле

$$D(\hat{\theta}(N_0)) \simeq \left[ \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \right]^{-1},$$

где

$$f_{\alpha}(x) = \left. \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_{\alpha}} \right|_{\theta = \hat{\theta}(N_0)}$$

Степень приближения определяется точностью оценок  $d_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) и (для случая нелинейной зависимости поверхности отклика от параметров) близостью  $\hat{\theta}(N_0)$  к истинным значениям  $\theta_{\text{ист}}$  (см. § 1.4).

2. После того как найдены предварительные оценки функции эффективности эксперимента  $\hat{\lambda}_0(x) = \lambda(x, \omega(N_0))$ , из уравнения (4.4.2) или (4.4.3) (в зависимости от выбранного критерия оптимальности) отыскивается точка  $x_0$ . При этом в указанных уравнениях необходимо заменить  $\lambda(x)$  на  $\hat{\lambda}(x)$ . В точке  $x_0$  проводят  $r_0$  измерений.

3. Находят величины  $\hat{d}_1, y_1$ , вычисляют оценки  $\hat{\lambda}_1(x) = \lambda(x, \omega(N_0 + r_0))$  и  $\hat{\theta}(N_0 + r_0)$ .

4. Из уравнения (4.4.2) или (4.4.3) при  $\lambda(x) = \hat{\lambda}_1(x)$  определяют точку  $x_1$ , проводят в ней  $r_1$  измерений и т. д.

Процедуры, определяемые пунктами 2—4, продолжают до тех пор, пока экспериментатор не достигнет нужной точности определения параметров в смысле выбранного им критерия.

Так как  $\hat{\omega}$  и  $\hat{\theta}$  являются состоятельными оценками, то, повторяя рассуждения, проведенные в предыдущем параграфе, нетрудно убедиться в асимптотической оптимальности предложенной стратегии эксперимента.

III. Проведение в каждой точке  $x_s$  по несколько измерений необходимо для определения величины  $\hat{d}_s$ . Размещение в одной точке слишком большого числа измерений отрицательно сказывается на оптимальных свойствах последовательного планирования (см. доказательства теорем из § 4.2 и 4.3). Поэтому при выборе количества измерений в каждой точке  $x_s$  полезно руководствоваться тем, что оптимальные свойства рассматриваемых в настоящей главе методов последовательного планирования сохраняются при  $r_s \ll N$ . Как только функция  $\lambda(x)$  будет определена достаточно точно, например, начиная с некоторого  $\tilde{s}$  выполняется неравенство

$$\max_{x \in X} |\hat{\lambda}_s(x) - \hat{\lambda}_{s-1}(x)| \leq \delta,$$

где  $\delta$  — наперед заданная «точность», в каждой точке  $\mathbf{x}$ , можно проводить по одному измерению. При этом веса, необходимые для построения оценок, следует положить равными  $\omega_i = \hat{\lambda}_s(\mathbf{x}_i)$ . Иногда функция эффективности  $\lambda(\mathbf{x})$  зависит от тех же неизвестных параметров, что и поверхность отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$ . В этих случаях необходимость поиска минимума (4.5.1) отпадает; в остальном процедура планирования остается прежней.

## § 4.6. Планирование при наличии ошибок в определении контролируемых переменных

Предположим, что координаты точек  $\mathbf{x}$ , в которых проводятся измерения, задаются с некоторыми ошибками (подробнее см. раздел I из § 1.6). Дисперсионная матрица оценок  $\hat{\theta}$ , построенных по методу, предложенному в § 1.6, равна

$$\mathbf{D}(\hat{\theta}) \simeq \left[ \sum_{i=1}^n \omega_i(\hat{\theta}) \varphi(\hat{\theta}, \mathbf{x}_i) \varphi^T(\hat{\theta}, \mathbf{x}_i) \right]^{-1},$$

где веса  $\omega_i$  и  $\varphi(\hat{\theta}, \mathbf{x}_i)$  определены так же, как и в § 1.6.

Если в качестве критерия оптимальности эксперимента избран критерий, опирающийся на элементы матрицы  $\mathbf{D}(\theta_{\text{ист}})$ , то в рассматриваемом случае при статическом планировании возможно построение лишь локально оптимальных планов, так как элементы дисперсионной матрицы оценок параметров зависят от истинных значений искомых параметров. Последовательное планирование экспериментов при наличии ошибок в определении координат точек измерения может осуществляться по следующей стратегии.

1. Строится невырожденный план  $\mathcal{E}(N_0)$ , по которому согласно методу, предложенному в § 1.6, определяются оценки  $\hat{\theta}(N_0)$ .

2. Находится точка  $\mathbf{x}_0$ , являющаяся решением уравнения (4.4.2) или (4.4.3) при

$$\lambda(\mathbf{x}) = [\tilde{\lambda}^{-1}(\mathbf{x}) + (\nabla_1^2(\hat{\theta}(N_0), \mathbf{x}) d_2(\mathbf{x}))^{-1}], \quad (4.6.1)$$

где  $\tilde{\lambda}(\mathbf{x})$  — функция эффективности эксперимента при отсутствии ошибок по контролируемым переменным ( $\tilde{\lambda}(\mathbf{x}_i) = \sigma_i^{-2}$ ). Матрица  $\mathbf{D}(N_0)$  определяется из (4.6.1).

3. В точке  $\mathbf{x}_0$  проводится измерение (или несколько измерений). Вычисляются оценки  $\hat{\theta} (N_0 + 1)$ .

4. Действия п. 2 повторяются при оценках  $\hat{\theta} (N_0 + 1)$ , затем в точке  $\mathbf{x}_1$  проводят следующее измерение и т. д. до тех пор, пока точность определения неизвестных параметров (в смысле выбранного критерия сравнения результатов эксперимента) не достигнет заданного значения.

Так как оценки  $\hat{\theta}$ , получаемые по методу, предложенному в § 1.6, — состоятельные, то повторяя рассуждения § 4.4, нетрудно убедиться в асимптотической оптимальности планирования эксперимента.

Отметим, что при последовательном планировании измерения будут размещены, в основном, в тех областях, где влияние ошибок в определении контролируемых переменных мало. Действительно, влияние ошибок по  $\mathbf{x}$  в основном определяется значением первых производных  $\nabla_1(\theta, \mathbf{x})$ . Но из (4.6.1) и (4.4.2) или (4.4.3) следует, что измерения будут размещаться там, где значения  $(\nabla^2(\theta, \mathbf{x}) d_2(\mathbf{x}))$  не очень велики (влияние ошибок по  $\mathbf{x}$  незначительно).

## § 4.7. Построение оптимальных планов при изменении во времени экспериментальных условий

I. Как уже отмечалось выше в § 4.1, в силу ряда причин в долговременных экспериментах функция эффективности эксперимента может меняться во времени. В этом случае оптимальный план должен определять не только координаты точек, в которых необходимо проводить измерения, но и когда в данной точке плана нужно провести измерение.

Если проведение функции эффективности  $\lambda(\mathbf{x}, t)$  во времени известно априори, то построение точных (т. е. учитывающих дискретность затрат, см. гл. 3) статических оптимальных планов принципиально возможно, хотя и является сложной вычислительной задачей.

При линейной параметризации для решения подобных задач удобно использовать метод построения точных планов, применяемый §§ 3.2 и 3.3. Если в течение каждого измерения  $\lambda(\mathbf{x}, t)$  не меняется, а измерения проводятся в заданные моменты времени

$t_i (i=1, 2, \dots, N)$ , то итерационные процедуры, аналогичные рассмотренным в §§ 3.2 и 3.3, строятся следующим образом.

1. Пусть имеется план  $\mathcal{E}_0(N)$  со спектром  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \dots, \mathbf{x}_N$ . Для каждого  $i$ -го измерения, проводимого в момент  $t_i$ , составляется величина  $\Delta_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}, t_i)$ , явный вид которой выписан в зависимости от критерия оптимальности либо в § 3.2, либо в § 3.3. В формулах, приведенных в указанных параграфах, следует заменить  $\lambda(\mathbf{x}_i)$ ,  $\lambda(\mathbf{x})$  на  $\lambda(\mathbf{x}_i, t_i)$  и  $\lambda(\mathbf{x}, t)$ .

2. Вычисляется

$$\max_i \max_x \Delta_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}, t_i) \quad (i=1, 2, \dots, N).$$

3. Пусть максимум достигается при  $\mathbf{x}=\mathbf{x}^0$  и  $i=j_0$ . Составляется план  $\mathcal{E}_1(N)$ , который имеет спектр  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{j_0-1}, \mathbf{x}_{j_0+1}, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{x}^0$ . Для этого плана находится дисперсионная матрица  $\mathbf{D}(\mathcal{E}_1(N))$ .

4. Операции 1—3 повторяются с планом  $\mathcal{E}_1(N)$ , затем с планом  $\mathcal{E}_2(N)$  и т. д. до тех пор, пока не будет выполняться неравенство

$$\max_i \max_x \Delta_s(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}, t_i) < \delta,$$

где  $\delta$  — наперед заданная точность.

Легко проверить, что предложенная процедура сойдется к плану лучшему, чем первоначальный, но который может оказаться неоптимальным. В связи с этим рекомендуется просчитывать процедуру 1—4 несколькими начальными приближениями.

II. Пусть

$$\lambda(\mathbf{x}, t) = \lambda(\mathbf{x}) l(t), \quad 0 \leq t \leq t_0, \quad (4.7.1)$$

и пусть непрерывный нормированный план

$$\mathbf{e}^* = \left\{ \begin{array}{l} x_1, x_2, \dots, x_n \\ p_1, p_2, \dots, p_n \end{array} \right\} \quad (4.7.2)$$

является оптимальным ( $D$ - или линейно оптимальным) при функции эффективности эксперимента, равной  $\lambda(\mathbf{x})$ .

Рассмотрим непрерывный план  $\mathcal{E}^*(t)$ , в котором распределение затрат в факторном пространстве и во

времени осуществляется следующим образом:

$$\mathcal{E}^*(t) = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1, & \mathbf{x}_2, & \dots, & \mathbf{x}_n \\ p_1(t) = p_1 l(t), & p_2(t) = p_2 l(t), & \dots, & p_n(t) = p_n l(t) \end{array} \right\} \quad (4.7.3)$$

**Теорема 4.7.1.** Пусть план  $\varepsilon^*$  при постоянной функции эффективности эксперимента  $D$ - или линейно оптимально, тогда план  $\mathcal{E}^*(t)$  будет  $D$ - или линейно оптимально при функции эффективности эксперимента, определяемой (4.3.1).

*Доказательство.* Проведем доказательство для  $D$ -критерия сравнения экспериментов. Для остальных критериев (усеченный  $D$ -критерий, линейные критерии) доказательство проводится идентичным образом.

Информационная матрица для плана  $\mathcal{E}^*(t)$  имеет вид

$$\mathbf{M}(\mathcal{E}^*(t_0)) = \int_0^{t_0} \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) l(\tau) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) d\tau$$

или

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathcal{E}^*(t_0)) &= \int_0^{t_0} l(\tau) d\tau \sum_{i=1}^n p_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) = \\ &= \mathbf{M}(\varepsilon^*) \int_0^{t_0} l(\tau) d\tau = \mathbf{M}(\varepsilon^*) T. \end{aligned} \quad (4.7.4)$$

С другой стороны, для любого другого плана информационная матрица имеет вид

$$\mathbf{M}(\mathcal{E}(t_0)) = \int_0^{t_0} l(\tau) \int_X p(\mathbf{x}, \tau) \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\mathbf{x} d\tau, \quad (4.7.5)$$

где  $p(\mathbf{x}, t)$  — нормированное распределение затрат при плане  $\mathcal{E}(t)$  в момент  $t$ . Разделив (4.7.4) на

$$\int_0^{t_0} l(\tau) d\tau = T,$$

мы можем трактовать матрицу

$$\mathbf{M}(\varepsilon) = \mathbf{M}(\mathcal{E}(t_0)) T^{-1}$$

как линейную комбинацию информационных матриц

$$\mathbf{M}(\varepsilon(\tau)) = \int_X p(\mathbf{x}, \tau) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

соответствующих планам с распределением затрат  $p(\mathbf{x}, \tau)$ , и постоянной во времени функции эффективности  $\lambda(\mathbf{x})$ , а план

$$\varepsilon = T^{-1} \mathcal{G}(t_0)$$

как линейную комбинацию этих планов. Но любая комбинация планов при постоянной во времени функции эффективности дает план  $\varepsilon$ , у которого

$$|\mathbf{M}(\varepsilon)| \leq |\mathbf{M}(\varepsilon^*)|. \quad (4.7.6)$$

Так как (см. (4.7.4) и (4.7.5))

$$|\mathbf{M}(\mathcal{G}^*(t_0))| = T^m |\mathbf{M}(\varepsilon^*)| \quad (4.7.7)$$

и

$$|\mathbf{M}(\mathcal{G}(t_0))| = T^m |\mathbf{M}(\varepsilon)|, \quad (4.7.8)$$

то из (4.7.6), (4.7.7) и (4.7.8) следует, что

$$|\mathbf{M}(\mathcal{G}(t_0))| \leq |\mathbf{M}(\mathcal{G}^*(t_0))|,$$

что и требовалось доказать.

Впервые оптимальность планов типа (4.7.3) была отмечена в [57] для  $D$ -оптимальных планов.

Из теоремы 4.7.1 следует, что для  $D$ - и линейных критериев сравнения экспериментов непрерывный план  $\mathcal{G}^*(t)$ , построенный на основе непрерывного нормированного плана (соответственно  $D$ - или линейно оптимального), является оптимальным. Аналогичные результаты можно получить и для локально оптимальных планов.

Если число измерений  $N$ , отведенных на некоторый эксперимент, велико, а  $l(t)$  меняется не очень быстро во времени, то, чередуя измерения в точках  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  с частотами, пропорциональными  $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n$ , мы получим план, близкий к оптимальному.

III. Непосредственно из доказательства теоремы 4.2.1 (или 4.3.1) следует, что последовательное планирование при постоянной во времени функции эффективности эксперимента и при больших  $N$  осуществляет распределение измерений в точках (точнее, вблизи точек)  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  с частотами  $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n$ . Очевидно, что



если  $l(t)$  мало изменится за время  $\tau$ , в течение которого частоты проведения измерений в точках  $x_1, x_2, \dots, x_n$  будут достаточно хорошо аппроксимировать величины  $p_1, p_2, \dots, p_n$ , то последовательное планирование будет оптимальным. Для хорошей аппроксимации величин  $p_1, p_2, \dots, p_n$  должно выполняться требование

$$\Delta t \ll \tau, \quad (4.7.9)$$

где  $\Delta t$  — время, необходимое на проведение одного измерения.

Представление функции эффективности в виде (4.7.1) в большинстве случаев хорошо описывает реальную

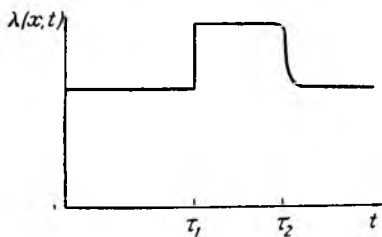


Рис. 23. Изменяющаяся во времени функция эффективности.

Момент  $\tau_1$  может соответствовать, например, смене аппаратуры, момент  $\tau_2$  — увеличению внешних помех.

экспериментальную обстановку. Действительно, функция эффективности, как правило, изменяется либо вследствие усовершенствования или естественного старения измерительной аппаратуры, либо вследствие изменения количества примесей в веществах, участвующих в исследуемых реакциях. Могут быть и другие причины изменения во времени

функции эффективности, которые, как и указанные выше, удовлетворяют обычно естественному требованию одинакового ухудшения или одинакового улучшения экспериментальных условий во всей области  $X$ , где возможно проведение измерений.

Следует также отметить, что функция  $l(t)$  очень часто имеет вид, представленный на рис. 23. Точки, где  $l(t)$  испытывает скачок, соответствуют, например, замене измерительных приборов на более совершенные. Маловероятно, чтобы в течение одного эксперимента аппаратура менялась очень часто. Поэтому условие (4.7.9) является довольно слабым ограничением.

Предположим, что функция  $\lambda(x, t)$  меняется во времени редкими скачками, аналогичными представленным на рис. 23. Величина скачка может меняться при изменении  $x$ . Моменты скачков  $\tau_j$  (а иногда и существование таких скачков) обычно не могут быть предсказаны априори.

В подобной ситуации оптимальной стратегией является следующая. В интервале от 0 до  $\tau_1$  экспериментатор ведет измерения по плану, оптимальному для  $\lambda(\mathbf{x}, t \leq \tau)$ .

После реализации указанного плана дисперсионная матрица оценок неизвестных параметров станет равной  $\mathbf{D}(\tau_1)$ . С момента  $\tau_1$  до момента  $\tau_2$  измерения ведутся по плану, оптимальному для  $\lambda(\mathbf{x}, \tau_1 \leq t \leq \tau_2)$ , и при начальном условии  $\mathbf{D}(\tau_1)$ . Далее строится оптимальный план для  $\lambda(\mathbf{x}, \tau_2 \leq t \leq \tau_3)$  и при начальном условии  $\mathbf{D}(\tau_2)$  и т. д. Пусть интервалы между скачками достаточно велики. Тогда, проводя рассуждения, аналогичные рассуждениям п. III § 4.4, нетрудно убедиться, что используя на каждом интервале развитые выше методы последовательного планирования, экспериментатор будет получать

$$\mathbf{D}_n(\hat{\theta}, \tau_j) \simeq \mathbf{D}(\mathcal{G}^*(\tau_j)).$$

Индекс «п» указывает на то, что данная величина получена при реализации последовательного плана.

## ГЛАВА 5

# ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В СЛУЧАЕ ОДНОВРЕМЕННОГО ИЗМЕРЕНИЯ НЕСКОЛЬКИХ ВЕЛИЧИН

### § 5.1. Основные свойства информационной матрицы

1. Обобщим результаты глав 2—4 на случай, когда возможно одновременное измерение в одной и той же точке факторного пространства нескольких (в общем случае коррелированных между собой) величин  $y^T = \|y_1, y_2, \dots, y_e\|$  [60].

Пусть вид функций

$$\eta^T(x, \theta) = \|\eta_1(x, \theta), \eta_2(x, \theta), \dots, \eta_e(x, \theta)\|$$

известен с точностью до параметров. Пусть также известна дисперсионная матрица величин  $y$  в каждой точке  $x$ :

$$D(y/x) = \omega^{-1}(x).$$

Матрицу  $\omega(x)$  будем называть весовой матрицей. Наряду с весовой матрицей  $\omega(x)$  нам будет удобно пользоваться матрицей эффективности эксперимента:

$$r\lambda(x) = \omega(x),$$

где  $r$  — число измерений, проведенных в точке  $x$ .

В § 1.7 было показано, что после  $n$  измерений  $y_1, y_2, \dots, y_n$  наилучшими линейными оценками для параметров  $\theta$  в случае линейной параметризации поверхностей  $\eta(x, \theta)$  являются величины

$$\hat{\theta} = M^{-1} Y, \quad (5.1.1)$$

Их дисперсионная матрица обратна информационной матрице

$$D(\hat{\theta}) = M^{-1}. \quad (5.1.2)$$

Матрицы  $M$  и  $Y$  определены в § 1.7.

Наилучшие квазилинейные оценки и их точность определяются соответственно по формулам (5.1.1) и (5.1.2) с заменой в них (см. § 1.7)

$$f_{j\alpha}(\mathbf{x}) \quad \text{на} \quad \left. \frac{\partial \eta_j(\mathbf{x}, \theta)}{\partial \theta_\alpha} \right|_{\theta = \theta_{\text{ист}}},$$

где  $j=1, 2, \dots, l$  и  $\alpha=1, 2, \dots, m$ .

II. Так же как и раньше, будем обозначать нормированный непрерывный план через  $\varepsilon$ , а ненормированный — через  $\mathcal{E}(N)$ . Исследуем свойства информационной матрицы  $M(\varepsilon)$ .

**Теорема 5.1.1.** Матрица  $M(\varepsilon)$  обладает следующими свойствами:

1. Для любого плана  $\varepsilon$  матрица  $M(\varepsilon)$  — положительно полуопределенная;

2.  $|M(\varepsilon)| = 0$  для любого плана  $\varepsilon$ , содержащего менее чем  $m/l$  точек;

3. множество матриц  $M(\varepsilon)$ , соответствующих произвольным планам  $\varepsilon$ , определенным на  $X$ , является выпуклым и замкнутым;

4. для любого плана  $\varepsilon_1$  с заданной матрицей  $M(\varepsilon_1)$  всегда найдется план  $\varepsilon_2$ , спектр которого содержит не более чем  $\frac{m(m+1)}{2} + 1$  точек и информационная матрица  $M(\varepsilon_2)$  которого совпадает с информационной матрицей первого плана.

Доказательство. 1. Матрицы  $F(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_i) F^T(\mathbf{x}_i)$  — положительно полуопределенные (определение матрицы  $F(\mathbf{x})$  см. в § 1.7), так как

$$l^T F(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_i) F^T(\mathbf{x}_i) l = \mathbf{q}_i^T \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_i) \mathbf{q}_i \leq 0,$$

где  $l$  — вектор  $m \times 1$ ,  $\mathbf{q}_i = F^T(\mathbf{x}_i) l$  — вектор  $l \times 1$  и матрица  $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_i)$  — положительно определенная в силу определения. Следовательно, матрица  $M(\varepsilon)$ , являющаяся суммой этих матриц, — положительно полуопределенная.

2. Матрица  $M(\varepsilon)$  — сумма  $n$  матриц, каждая из которых имеет ранг не более  $l$ . Если  $n < \frac{m}{l}$ , то ранг  $M(\varepsilon)$  меньше  $m$  и  $|M(\varepsilon)| = 0$ .

3. Пусть  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  — два произвольных нормированных плана, заданных на  $X$ . Легко убедиться из (1.7.10), что матрица

$$M(\epsilon) = \alpha M(\epsilon_1) + (1 - \alpha) M(\epsilon_2)$$

соответствует плану  $\epsilon = \alpha \epsilon_1 + (1 - \alpha) \epsilon_2$ , т.е. принадлежит рассматриваемому множеству. Отсюда и из определения выпуклого множества следует выпуклость множества матриц  $M(\epsilon)$ . Замкнутость этого множества следует из замкнутости  $X$  и непрерывности функций

$$f_{j\alpha}(x) \quad (j=1, 2, \dots, k; \alpha=1, 2, \dots, m).$$

4. Справедливость пункта 4 доказываемой теоремы непосредственно вытекает из теоремы Каратеодори, которая здесь справедлива в силу того, что множество всех информационных матриц данной регрессионной задачи  $M(\epsilon)$  является выпуклой оболочкой множества информационных матриц, соответствующих одноточечным планам (см. § 2.1).

Доказанная теорема позволяет использовать без каких-либо изменений многие результаты, полученные для случая единственной поверхности отклика. Например, остаются справедливыми теоремы 2.2.3 — 2.2.5.

## § 5.2. $D$ -оптимальные планы

1. Так как точность оценок (5.1.1) характеризуется только дисперсионной матрицей, определяемой (5.1.2), то естественно обратиться к тем же критериям сравнения экспериментов, что и в одномерном (в пространстве результатов измерений) случае, которые подробно рассмотрены в §§ 1.8 — 1.10.

Рассмотрим свойства и методы построения  $D$ -оптимальных планов.

**Лемма 5.2.1.** *Для любого плана  $\epsilon$*

$$\sum_{i=1}^n p_i \text{Sp} \lambda(x_i) d(x_i, \epsilon) = m, \quad (5.2.1)$$

где  $d(x, \epsilon)$  — дисперсионная матрица оценок  $\hat{\eta}(x, \theta)$  и суммирование ведется по всему спектру плана  $\epsilon$ .

Доказательство. Согласно (1.7.2), перепишем (5.2.1) в виде:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \rho_i \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{d}(\mathbf{x}_i, \varepsilon) &= \\ &= \sum_{i=1}^n \rho_i \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{F}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon) \mathbf{F}(\mathbf{x}_i). \end{aligned}$$

Учитывая, что  $\operatorname{Sp} \mathbf{A} \mathbf{B} = \operatorname{Sp} \mathbf{B} \mathbf{A}$ , получим

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \rho_i \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{d}(\mathbf{x}_i, \varepsilon) &= \\ &= \sum_{i=1}^n \operatorname{Sp} \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon) \mathbf{F}(\mathbf{x}_i) \rho_i \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{F}^T(\mathbf{x}_i) = \\ &= \sum_{i=1}^n \operatorname{Sp} \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon) \mathbf{M}(\varepsilon) = \operatorname{Sp} \mathbf{I}_m = m, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Докажем теперь теорему, аналогичную теореме эквивалентности для одномерного случая (см. теорему 2.2.1).

**Теорема 5.2.1.** *Следующие утверждения:*

1. план  $\varepsilon^*$  максимизирует  $|\mathbf{M}(\varepsilon)|$  (минимизирует  $|\mathbf{D}(\varepsilon)|$ );
2. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $\max_{\mathbf{x} \in X} \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon)$ ;
3.  $\max_{\mathbf{x} \in X} \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon) = m$

— эквивалентны между собой. Информационные матрицы всех планов, удовлетворяющих условиям 1—3, совпадают между собой. Любая линейная комбинация этих планов также удовлетворяет 1—3.

Доказательство. 1. Покажем, что из 1 следует 2. Пусть план  $\varepsilon^*$  максимизирует  $|\mathbf{M}(\varepsilon)|$ . Рассмотрим информационную матрицу, соответствующую линейной комбинации  $\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha) \varepsilon^* + \alpha \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  — произвольный план. Согласно теореме 5.1.1 такая матрица существует и равна матрице

$$\mathbf{M}(\tilde{\varepsilon}) = (1 - \alpha) \mathbf{M}(\varepsilon^*) + \alpha \mathbf{M}(\varepsilon).$$

Согласно определению плана  $\tilde{\varepsilon}$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=0} = \operatorname{Sp} \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*) \mathbf{M}(\varepsilon) - m.$$

Пусть план  $\varepsilon$  сосредоточен в единственной точке  $x$ , тогда

$$\begin{aligned} \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*) \mathbf{M}(\varepsilon) &= \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*) \mathbf{F}(x) \lambda(x) \mathbf{F}^T(x) = \\ &= \text{Sp } \lambda(x) \mathbf{F}^T(x) \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*) \mathbf{F}(x) = \text{Sp } \lambda(x) \mathbf{d}(x, \varepsilon). \end{aligned}$$

В силу вогнутости функции  $\ln |\mathbf{M}(\varepsilon)|$  и определения плана  $\varepsilon^*$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon)| \Big|_{\alpha=0} = \text{Sp } \lambda(x) \mathbf{d}(x, \varepsilon) - m \leq 0.$$

С другой стороны, из леммы 5.2.1 следует, что для любого плана

$$\max_{x \in X} \text{Sp } \lambda(x) \mathbf{d}(x, \varepsilon) \geq m.$$

Сравнивая последние два неравенства, легко убедиться в справедливости доказываемого утверждения, причем

$$\min_{\varepsilon} \max_{x \in X} \text{Sp } \lambda(x) \mathbf{d}(x, \varepsilon) = \max_{x \in X} \text{Sp } \lambda(x) \mathbf{d}(x, \varepsilon^*) = m. \quad (5.2.2)$$

2. Покажем, что из 2 следует 1.

Пусть минимаксный план  $\varepsilon^*$  не  $D$ -оптимален, тогда в силу вогнутости функции  $\ln |\mathbf{M}(\varepsilon)|$  найдется такой план  $\varepsilon$ , что

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon)| \Big|_{\alpha=0} = \text{Sp } \mathbf{M}^{-1}(\varepsilon^*) \mathbf{M}(\varepsilon) - m > 0.$$

В качестве плана  $\varepsilon$  можно выбрать, например,  $D$ -оптимальный план.

Согласно теореме 5.1.1 для любого плана  $\varepsilon$  можно найти план со спектром, состоящим не более чем из  $n = \frac{m(m+1)}{2} + 1$  точек, и такой же информационной матрицей. Поэтому, не ограничивая общности, можно считать, что план  $\varepsilon$  состоит из  $n$  точек. В этом случае

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon)| \Big|_{\alpha=0} = \sum_{i=1}^n p_i \text{Sp } \lambda(x_i) \mathbf{d}(x_i, \varepsilon) - m > 0, \quad (5.2.3)$$

суммирование ведется по точкам спектра плана  $\varepsilon$ . Но из (5.2.2) следует, что

$$\text{Sp } \lambda(x_i) \mathbf{d}(x_i, \varepsilon^*) \leq m, \quad i=1, 2, \dots, n$$

или

$$\sum_{i=1}^n p_i \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{d}(\mathbf{x}_i, \varepsilon^*) - m \leq \sum_{i=1}^n p_i m - m = 0.$$

Полученное противоречие (ср. с (5.2.3)) доказывает наше утверждение.

3. Эквивалентность утверждений 1 и 3, 2 и 3 непосредственно следует из (5.2.2) и эквивалентности 1 и 2.

4. Доказательство заключительной части теоремы приводится совершенно аналогично доказательству соответствующей части теоремы 2.2.2.

*Следствие.* В точках  $D$ -оптимального плана  $\operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}) \times \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon^*)$  достигает своего максимального значения  $m$ .

Предположим противное:

$$\operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon^*) < m,$$

где  $\mathbf{x}$  — одна из точек спектра плана  $\varepsilon^*$ . Тогда в силу п. 3 доказанной теоремы

$$\sum_{i=1}^n p_i \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{d}(\mathbf{x}_i, \varepsilon^*) < \sum_{i=1}^n p_i m.$$

Но по лемме 5.2.1

$$\sum_{i=1}^n p_i \operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{d}(\mathbf{x}_i, \varepsilon^*) = m.$$

Полученное противоречие доказывает наше утверждение.

Доказанная теорема и ее следствие дают простой способ проверки  $D$ -оптимальности плана. Для этого достаточно проверить, что величина  $\operatorname{Sp} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon)$  в точках плана равна  $m$ , а в остальных точках он превышает  $m$ .

**II.** Явное построение  $D$ -оптимальных планов оказывается возможным лишь в простейших случаях. В настоящем пункте предлагается итерационный метод построения  $D$ -оптимальных планов, который позволяет свести экстремальную задачу размерности  $(k+1)n$ , где  $n$  заключено в пределах  $mk^{-1} + \frac{m(m+1)}{2}$ , к последовательности экстремальных задач той же размерности, что и факторное пространство.

Рассмотрим следующую итерационную процедуру.

1. Имеется некоторый невырожденный план  $\varepsilon_0$  с информационной матрицей  $\mathbf{M}(\varepsilon_0)$ .



2. Отыскивается точка  $\mathbf{x}_0$ , соответствующая

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \text{Sp } \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon_0).$$

3. Строится план

$$\varepsilon_1 = (1 - \alpha_0) \varepsilon_0 + \alpha_0 \varepsilon(\mathbf{x}_0).$$

4. Отыскивается матрица  $\mathbf{M}(\varepsilon_1)$  и обратная ей дисперсионная матрица  $\mathbf{D}(\varepsilon_1)$ .

После этого операции 2—4 повторяются с планом  $\varepsilon_1$ , затем с  $\varepsilon_2$  и т. д. до тех пор, пока не будет выполняться какое-либо из неравенств:

$$\text{Sp } \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon_s) - m \leq \delta_1,$$

$$\frac{|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})| - |\mathbf{M}(\varepsilon_s)|}{|\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})|} \leq \delta_2,$$

где  $\delta_1$  и  $\delta_2$  — некоторые наперед заданные малые положительные числа (точность).

Шаг  $\alpha_s$  выбирается по одному из правил:

а)  $\alpha_s$  является ближайшим к нулю корнем уравнения

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{M}(\varepsilon_s)| = 0;$$

б) последовательность  $\alpha_s$  удовлетворяет условиям

$$\sum_{\alpha=1}^{\infty} \alpha_s = \infty, \quad \lim_{s \rightarrow \infty} \alpha_s = 0;$$

в)  $\alpha_s$  делится на  $\gamma > 1$ , как только

$$|\mathbf{M}(\varepsilon_s)| > |\mathbf{M}(\varepsilon_{s+1})|.$$

При вычислении матрицы  $\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})$  и поиске решения для случаев, когда количество одновременно измеряемых величин  $l$  значительно меньше числа неизвестных параметров  $m$ , полезно использовать следующие формулы:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\varepsilon_{s+1}) = & (1 - \alpha_s)^{-1} \left\{ \mathbf{I}_m - \frac{\alpha_s}{1 - \alpha_s} \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{F}(\mathbf{x}_s) [\mathbf{I}_l + \right. \\ & \left. + \frac{\alpha_s}{1 - \alpha_s} \lambda(\mathbf{x}_s) \mathbf{F}^T(\mathbf{x}_s) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{F}(\mathbf{x}_s)]^{-1} \lambda(\mathbf{x}_s) \mathbf{F}(\mathbf{x}_s) \right\} \mathbf{D}(\varepsilon_s); \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

$$\begin{aligned} |\mathbf{D}(\varepsilon_{s+1})| = & (1 - \alpha_s)^{-m} |\mathbf{I}_l + \\ & + \frac{\alpha_s}{1 - \alpha_s} \lambda(\mathbf{x}_s) \mathbf{F}^T(\mathbf{x}_s) \mathbf{D}(\varepsilon_s) \mathbf{F}(\mathbf{x}_s)|^{-1} \cdot |\mathbf{D}(\varepsilon_s)|. \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

Формула (5.2.4) сводит операцию обращения матрицы размером  $m \times m$  к операции обращения матрицы размером  $l \times l$ , формула (5.2.5) сводит вычисление определителя порядка  $m$  к вычислению определителя порядка  $l$ .

**Теорема 5.2.2.** *Итерационный процесс 1—4 сходится, причем*

$$\lim_{s \rightarrow \infty} |\mathbf{M}(\epsilon_s)| = |\mathbf{M}(\epsilon^*)|,$$

где  $\epsilon^*$  —  $D$ -оптимальный план.

**Доказательство.** Доказательство приведем для  $\alpha$ , выбираемых согласно способу (а). Обобщение доказательства на остальные случаи читатель без труда может провести самостоятельно.

Согласно теореме 5.2.1

$$\text{Sp } \lambda(\mathbf{x}_s) \mathbf{d}(\mathbf{x}_s, \epsilon_s) > m,$$

если план  $\epsilon_s$  отличен от  $D$ -оптимального. Из определения  $\epsilon_{s+1}$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} |\mathbf{M}(\epsilon_{s+1})| \Big|_{\alpha=0} = \text{Sp } \lambda(\mathbf{x}_s) \mathbf{d}(\mathbf{x}_s, \epsilon_s) - m > 0.$$

Если  $\alpha_s$  выбрано, как указывалось в начале доказательства теоремы, то из предыдущего неравенства следует, что

$$|\mathbf{M}(\epsilon_s)| \leq |\mathbf{M}(\epsilon_{s+1})|.$$

Монотонно неубывающая последовательность  $\{|\mathbf{M}(\epsilon_s)|\}$  ограничена, так как  $|\mathbf{M}(\epsilon^*)| > |\mathbf{M}(\epsilon)|$  для любого плана  $\epsilon$ , следовательно, она сходится к некоторому пределу  $|\mathbf{M}(\tilde{\epsilon})|$ .

Покажем, что  $|\mathbf{M}(\epsilon^*)| = |\mathbf{M}(\tilde{\epsilon})|$ . Отсюда в силу теоремы 5.2.1 будет вытекать также, что  $\mathbf{M}(\tilde{\epsilon}) = \mathbf{M}(\epsilon^*)$ .

Предположим противное:  $|\mathbf{M}(\epsilon^*)| \neq |\mathbf{M}(\tilde{\epsilon})|$ . Тогда (см. теорему 5.2.1)

$$\lim_{s \rightarrow \infty} [\text{Sp } \lambda(\mathbf{x}_s) \mathbf{d}(\mathbf{x}_s, \epsilon_s) - m] = \Delta > 0$$

или согласно определению  $\alpha_s$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} [|\mathbf{M}(\epsilon_{s+1})| - |\mathbf{M}(\epsilon_s)|] = \delta[\Delta] > 0,$$

что противоречит условию сходимости последовательности  $\{|\mathbf{M}(\epsilon_s)|\}$ . Таким образом,

$$\lim_{s \rightarrow \infty} |\mathbf{M}(\epsilon_s)| = |\mathbf{M}(\epsilon^*)|.$$

**Пример 1.** Пусть при каждом  $x$  возможно измерение двух некоррелированных величин  $y_1$  и  $y_2$ :

$$\begin{aligned}\eta_1(\mathbf{x}, \theta) &= \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2, \\ \eta_2(\mathbf{x}, \theta) &= \theta_4 x + \theta_5 x^3 + \theta_6 x^4 \quad (0 \leq x \leq 1),\end{aligned}\quad (5.2.6)$$

и пусть ошибки при измерении обеих величин равны между собой и не зависят от  $x$ :

$$\lambda(\mathbf{x}) = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

В качестве начального приближения был выбран план

$$\varepsilon_0 = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = 0; \quad x_2 = 0,2; \quad x_3 = 0,4; \quad x_4 = 0,6; \quad x_5 = 0,8; \quad x_6 = 1,0 \\ \rho_i = \frac{1}{6} \quad (i = 1, \dots, 6) \end{array} \right\}.$$

После двадцати итераций был получен план  $\varepsilon_{20}$ :

$$\varepsilon_{20} = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = 0; \quad x_2 = 0,38; \quad x_3 = 0,76; \quad x_4 = 1,0 \\ \rho_1 = 0,16; \quad \rho_2 = 0,28; \quad \rho_3 = 0,23; \quad \rho_4 = 0,33 \end{array} \right\}.$$

В плане  $\varepsilon_{20}$  отброшены точки, где  $\rho_i < 0,01$ . Для этого плана

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \text{Sp } \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon_{20}) = 6,01.$$

Заметим, что для точного  $D$ -оптимального плана

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \text{Sp } \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon^*) = 6.$$

Интересно сравнить характеристики плана  $\varepsilon_{20}$  и обычно используемых равномерных планов, например, плана  $\varepsilon_0$ . Для указанного равномерного плана (рис. 24):

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \text{Sp } \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, \varepsilon) = 39.$$

В (5.2.6) величины  $y_1$  и  $y_2$  зависят от различных параметров. Рассмотрим случай, когда  $y_1$  и  $y_2$  зависят от одних и тех же параметров:

$$\begin{aligned}\eta_1(\mathbf{x}, \theta) &= \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2, \\ \eta_2(\mathbf{x}, \theta) &= \theta_1 x + \theta_2 x^3 + \theta_3 x^4, \quad (0 \leq x \leq 1)\end{aligned}\quad (5.2.7)$$

Соответствующий  $D$ -оптимальный план, рассчитанный по предложенной итерационной процедуре, равен (рис. 25):

$$\varepsilon = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = 0; \quad x_2 = 0,54; \quad x_3 = 1,0 \\ \rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \frac{1}{3} \end{array} \right\}.$$

III. Результаты разделов I—II можно обобщить на случай нелинейной параметризации. При этом следует

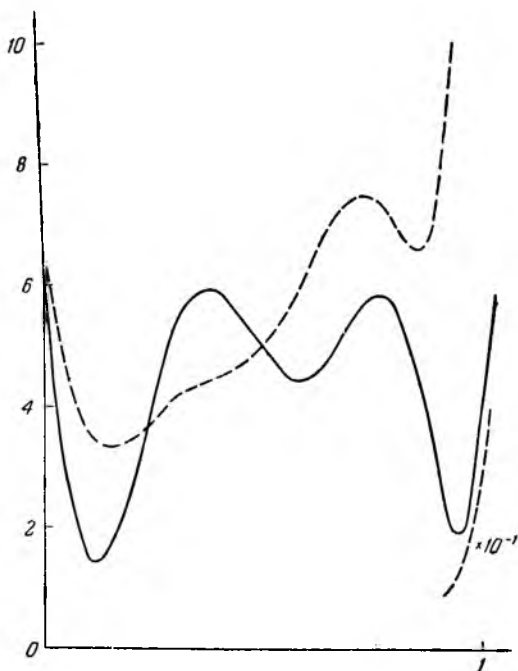


Рис. 24. Регрессионная задача (5.2.6).

Сумма дисперсий  $d_j(x)$  для плана  $\varepsilon_{20}$  нанесена сплошной линией. Пунктирной линией нанесена та же величина для равномерного плана.

рассматривать локально  $D$ -оптимальные планы (ср. с § 2.8). Изменения, необходимые при использовании формул, приведенных в этих пунктах, читателю нетрудно проделать самостоятельно, опираясь, например, на соответствующие выкладки рассматриваемого ниже примера.

**Пример 2.** Рассмотрим химическую реакцию типа  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Пусть все реакции первого порядка [58], тогда скорость убывания вещества А прямо пропорциональна его концентрации с константой пропорциональности, равной  $\theta_1$ ; скорость образования С прямо пропорциональна концентрации В с константой пропорциональности  $\theta_2$ ; скорость образования В пропорциональна концентрации А

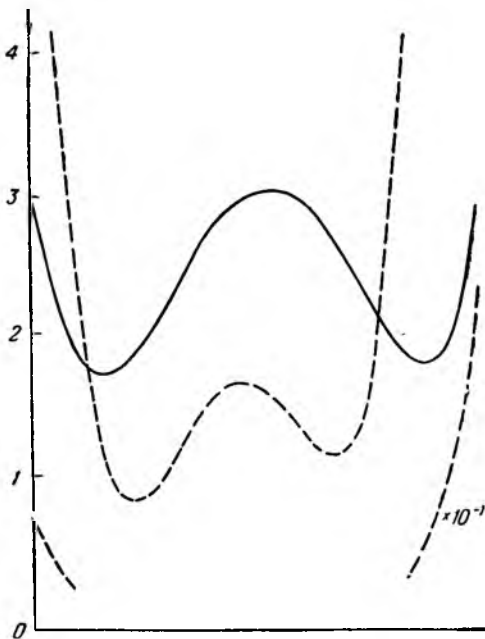


Рис. 25. Регрессионная задача (5.2.7).

Сумма дисперсий  $d_j(x)$  для приближенного  $D$ -оптимального плана нанесена сплошной линией. Пунктирной линией нанесена та же величина для равномерного плана.

с константой пропорциональности  $\theta_1$  и скорость убывания В пропорциональна концентрации В с константой пропорциональности  $\theta_2$ . Можно показать, что реакция описывается следующими тремя поверхностями отклика:

$$\begin{aligned} \eta_1(x, \theta) &= e^{-\theta_1 x}, \\ \eta_2(x, \theta) &= (e^{-\theta_1 x} - e^{-\theta_2 x}) \theta_1 / (\theta_2 - \theta_1), \\ \eta_3(x, \theta) &= 1 + (-\theta_2 e^{-\theta_1 x} + \theta_1 e^{-\theta_2 x}) / (\theta_2 - \theta_1), \end{aligned}$$

где  $\eta_1, \eta_2, \eta_3$  означают средние концентрации веществ А, В и С соответственно.

Будем предполагать, что возможно одновременное измерение величин  $y_1$  и  $y_2$  ( $l=2$ ) и что измерения, проводимые в различных точках факторного пространства, независимы между собой.

Пусть из каких-либо соображений известно, что истинные значения параметров  $\theta_1, \theta_2$  находятся вблизи  $\theta_{1(0)}=0,7$  и  $\theta_{2(0)}=0,2$  и что дисперсионная матрица измерений  $y_1(x)$  и  $y_2(x)$  постоянна в области действия и равна

$$d = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{vmatrix}$$

или

$$\lambda(x) = \begin{vmatrix} 1,333 & -0,333 \\ -0,333 & 0,333 \end{vmatrix}, \quad 0 \leq x \leq 10.$$

Найдем функции

$$f_{k\alpha} = \frac{\partial \eta_k(x, \theta)}{\partial \theta_\alpha}, \quad k=1,2, \alpha=1,2.$$

Производя дифференцирование, получим:

$$f_{11}(x) = -xe^{-\theta_1 x}; \quad f_{12}(x) = 0;$$

$$f_{2\alpha}(x) = (\theta_2 - \theta_1)^{-2} \{ \theta_\beta (e^{-\theta_\alpha x} - e^{-\theta_\beta x}) + \theta_1 (\theta_\alpha - \theta_\beta) x e^{-\theta_\alpha x} \};$$

$$\alpha, \beta = 1, 2, \quad \alpha \neq \beta.$$

Элементы информационной матрицы имеют вид

$$M_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^n p_i \sum_{k,l=1}^2 \lambda_{kl} f_{k\alpha}(x) f_{k\beta}(x).$$

Локально оптимальный план, рассчитанный по итерационной процедуре раздела III данного параграфа, имеет следующие характеристики:

$$\varepsilon^*(\theta_0) = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = 1,75; \quad x_2 = 4,80 \\ p_1 = 0,8; \quad p_2 = 0,2 \end{array} \right\};$$

$$|D(\varepsilon^*(\theta_0))| = 1,29.$$

План, полученный непосредственной минимизацией  $|D(\theta_0)|$  в предположении  $p_1 = p_2 = 0,5$  (см. [61]), имеет

заметно большее значение определителя:

$$|\mathbf{D}(\theta_0, \rho_1 = \rho_2)| = 1,67.$$

При этом

$$\varepsilon^*(\theta_0, \rho_1 = \rho_2) = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = 1,4; \quad x_2 = 6,8 \\ \rho_1 = 0,5; \quad \rho_2 = 0,5 \end{array} \right\}.$$

**IV.** Обобщение результатов, полученных для одномерного  $y$ , можно провести и для усеченного  $D$ -критерия. Производная  $\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{D}_{ll}| \Big|_{\alpha=0}$ , которая играет основную роль при формулировке теоремы, аналогичной теореме 2.7.1, легко вычисляется по формуле (2.7.2) и равна

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |\mathbf{D}_{ll}| \Big|_{\alpha=0} = l - \text{Sp } \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, l, \varepsilon), \quad (5.2.8)$$

где  $l$  — число параметров, представляющих интерес для экспериментатора, и

$$\mathbf{d}(\mathbf{x}, l, \varepsilon) = \mathbf{F}^T(\mathbf{x}) \left\| \begin{array}{cc} \mathbf{D}_{ll} & \mathbf{D}_{lk} \\ \mathbf{D}_{kl} & \mathbf{D}_{kk} - \mathbf{M}_{kk}^{-1} \end{array} \right\| \mathbf{F}(\mathbf{x}).$$

Опираясь на (5.2.8) и повторяя рассуждения, аналогичные проведенным в разделах I—III, нетрудно убедиться, что все результаты § 2.7 остаются справедливыми, если заменить величину  $\lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, l, \varepsilon)$  на  $\text{Sp } \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{d}(\mathbf{x}, l, \varepsilon)$ .

### § 5.3. Линейно оптимальные планы

**I.** Методы обобщения свойств и способов построения линейно оптимальных планов, полученных для одномерного  $y$ , на случай, когда возможно одновременное измерение нескольких поверхностей отклика, во многом совпадают с методами, примененными в предыдущем параграфе. Поэтому ниже некоторые доказательства и ряд промежуточных выкладок либо опускаются, либо приводятся в сокращенном виде.

Доказательство основной теоремы о свойствах линейно оптимальных планов при одновременном измерении нескольких поверхностей отклика опирается на следующие утверждения.

**Лемма 5.3.1.** Для любого плана  $\varepsilon$

$$\sum_{i=1}^n \rho_i \varphi(\mathbf{x}_i, \varepsilon) = L[\mathbf{D}(\varepsilon)],$$

где  $D(\varepsilon)$  — дисперсионная матрица оценок  $\hat{\theta}$  для плана  $\varepsilon$  и

$$\varphi(\mathbf{x}, \varepsilon) = L[D(\varepsilon) F(\mathbf{x}) \lambda(\mathbf{x}) F^T(\mathbf{x}) D(\varepsilon)].$$

Доказательство. Из (2.9.2) и (2.9.3) и определения информационной матрицы следует

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n p_i L[D(\varepsilon) F(\mathbf{x}_i) \lambda(\mathbf{x}_i) F^T(\mathbf{x}_i) D(\varepsilon)] &= \\ = L\left[D(\varepsilon) \left(\sum_{i=1}^n p_i F(\mathbf{x}_i) \lambda(\mathbf{x}_i) F^T(\mathbf{x}_i)\right) D(\varepsilon)\right] &= \\ = L[D(\varepsilon) M(\varepsilon) D(\varepsilon)] = L[D(\varepsilon)]. \end{aligned}$$

**Лемма 5.3.2.** Пусть  $\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha)\varepsilon + \alpha\varepsilon(\mathbf{x})$ , где план  $\varepsilon(\mathbf{x})$  сосредоточен в единственной точке  $\mathbf{x}$ . Тогда

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} L[D(\tilde{\varepsilon})] \Big|_{\alpha=0} = L[D(\varepsilon)] - \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon).$$

Доказательство. Из леммы 2.9.3 и определения функционала  $L$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} L[D(\tilde{\varepsilon})] \Big|_{\alpha=0} &= -L\{D(\varepsilon)[M(\varepsilon(\mathbf{x})) - M(\varepsilon)]D(\varepsilon)\} = \\ &= L[D(\varepsilon)] - L[D(\varepsilon)M(\varepsilon(\mathbf{x}))D(\varepsilon)] = L[D(\varepsilon)] - \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon), \end{aligned}$$

что и доказывает лемму.

Пусть  $L$  удовлетворяет (2.9.2) — (2.9.4), тогда, опираясь на доказанные леммы и почти дословно повторяя доказательство теоремы 2.9.2 (ср. также с § 5.2), нетрудно убедиться в справедливости следующей теоремы.

**Теорема 5.3.1.** Следующие утверждения:

1. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $L[D(\varepsilon)]$ ;
2. план  $\varepsilon^*$  минимизирует  $\max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon)$ ;

$$3. \max_{\mathbf{x} \in X} \varphi(\mathbf{x}, \varepsilon^*) = L[D(\varepsilon^*)]$$

— эквивалентны между собой.

Любая линейная комбинация планов, удовлетворяющих требованиям 1 — 3, также удовлетворяет этим требованиям.

Если оптимальные планы невырождены и

$$L(A) > 0,$$



где  $A$  — любая положительно определенная матрица, то имеет место усиленный вариант теоремы 5.3.1 (ср. с § 2.9).

**Теорема 5.3.1\*.** *Следующие утверждения:*

1. план  $\epsilon^*$  минимизирует  $L[D(\epsilon)]$ ;
2. план  $\epsilon^*$  минимизирует  $\max_{x \in X} \varphi(x, \epsilon)$ ;
3.  $\max_{x \in X} \varphi(x, \epsilon^*) = L[D(\epsilon^*)]$

— эквивалентны между собой.

*Информационные матрицы всех планов, удовлетворяющих 1—3, совпадают между собой. Любая линейная комбинация планов, удовлетворяющих требованиям 1—3, также удовлетворяет этим требованиям.*

**II.** В качестве численного метода построения линейно оптимальных планов можно использовать итерационную процедуру, аналогичную процедуре 1—4 предыдущего параграфа.

1. Имеется невырожденный план  $\epsilon_0$  с дисперсионной матрицей оценок неизвестных параметров  $D(\epsilon_0)$ .

2. Отыскивается точка  $x_0$ , где достигается  $\max_{x \in X} \varphi(x, \epsilon_0)$ .

3. Строится план  $\epsilon_1 = (1 - \alpha_0)\epsilon_0 + \alpha_0\epsilon(x_0)$ .

4. Отыскивается матрица  $M(\epsilon_1)$ .

После этого операция 2—4 повторяются с планом  $\epsilon_1$ , затем с  $\epsilon_2$  и т. д. до тех пор, пока не будет выполняться неравенство

$$\frac{L[\epsilon_s] - L[\epsilon_{s+1}]}{L[\epsilon_{s+1}]} \leq \delta.$$

Шаг  $\alpha_s$  выбирается либо из соображений максимального уменьшения  $L[\epsilon_s]$  при заданном  $x_s$ , либо последовательность  $\{\alpha_s\}$  выбираются так же, как это указано в § 5.2. Можно показать, что (ср. с § 5.2) итерационный процесс сойдется:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} L[\epsilon_s] = L(\bar{\epsilon}).$$

Если план  $\bar{\epsilon}$  невырожден, то

$$L(\bar{\epsilon}) = \min_{\epsilon} L(\epsilon).$$

В остальных случаях

$$L(\epsilon_0) > L(\bar{\epsilon}) \geq \min_{\epsilon} L(\epsilon).$$

Значения  $\varphi(x, \epsilon)$  для различных критериев приведены в табл. 8. В тех случаях, когда число измеряемых

$L [D(\varepsilon)]$	$\varphi(x, \varepsilon)$
$\text{Sp } D(\varepsilon)$	$\text{Sp } \lambda(x) F^T(x) D^2(\varepsilon) F(x)$
$\text{Sp } d(x_0, \varepsilon)$	$\text{Sp } d(x, x_0, \varepsilon) \lambda(x) d(x, x_0, \varepsilon),$ где $d(x, x_0, \varepsilon) = F^T(x) D(\varepsilon) F(x)$
$\int_X \text{Sp } d(x, \varepsilon) dx$	$\text{Sp } \lambda(x) F^T(x) D(\varepsilon) \overline{M} D(\varepsilon) F(x),$ где $\overline{M} = \int_Z F(x) F^T(x) dx$
$D(\hat{\theta}) = D(\Gamma \hat{\theta}),$ где $\Gamma = \ l_1, l_2, \dots, l_m\ $	$q(x) \lambda(x) q^T(x),$ где $q(x) = \Gamma^T D(\varepsilon) F(x)$
$E[(\theta - \hat{\theta})^T A (\theta - \hat{\theta})] =$ $= \text{Sp } A D(\varepsilon),$ $A = C C^T$	$\text{Sp } \lambda(x) F^T(x) D(\varepsilon) A D(\varepsilon) F(x)$

величин  $l < m$ , где  $m$  — число неизвестных параметров, удобно пользоваться для вычисления матрицы  $D(\varepsilon_{s+1})$  ее представлением (5.2.4).

## § 5.4. Последовательное планирование

Результаты двух предыдущих параграфов позволяют без труда обобщить методы последовательного планирования, развитые в гл. 4, на случай одновременного измерения нескольких поверхностей отклика. Для этого во всех выкладках достаточно заменить  $\lambda(x) d(x, N)$  на  $\text{Sp } \lambda(x) d(x, N)$ ,  $\lambda(x) L [D(N) f(x) f^T(x) D(N)]$  на  $L [D(N) F(x) \lambda(x) F^T(x) D(N)]$ . Конкретные формулировки обобщенных лемм и теорем могут быть легко составлены читателем самостоятельно по аналогии с §§ 5.2 и 5.3.

При проведении расчетов, необходимых для последовательного планирования, весьма полезными (при  $l < m$ )

являются следующие формулы:

$$\mathbf{D}(N + \Delta N, \mathbf{x}) = \{\mathbf{I}_m - \Delta N \mathbf{D}(N) \mathbf{F}(\mathbf{x}) [\mathbf{I}_l + \Delta N \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{F}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N) \mathbf{F}(\mathbf{x})]^{-1} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{F}^T(\mathbf{x})\} \mathbf{D}(N) \quad (5.4.1)$$

и

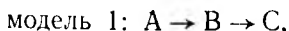
$$|\mathbf{D}(N + \Delta N, \mathbf{x})| = \frac{|\mathbf{D}(N)|}{|\mathbf{I}_l + \Delta N \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{F}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N) \mathbf{F}(\mathbf{x})|}. \quad (5.4.2)$$

Доказательство формулы (5.4.1) опирается на лемму 2.6.1, а доказательство формулы (5.4.2) на лемму 2.5.1. Ход рассуждений тот же, что и для случая единственной поверхности отклика.

## ДИСКРИМИНИРУЮЩИЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

## § 6.1. Постановка задачи

1. На определенном этапе работы экспериментатор нередко сталкивается с тем, что существующим данным, экспериментальным или полученным из теоретических соображений, удовлетворяют две или более математические модели. Прежде чем перейти к дальнейшим исследованиям, например, уточнению некоторых параметров, необходимо поставить такой эксперимент, который позволил бы дискриминировать модели. Планирование подобных экспериментов заключается в поиске таких точек, в которых сравниваемые модели были бы поставлены в критические условия или, иными словами, нужно отыскать точки, результаты измерений в которых не были бы инвариантны относительно замены одной проверяемой математической модели на другую. Поясним это на примере. Рассмотрим химическую реакцию, в которой вещество  $A$  используется для получения продукта  $B$ . Предположим, что экспериментатор знает, что реакция может быть одного из двух видов:



Типичные кривые, показывающие зависимость концентрации продукта как функции времени, показаны на рис. 26. Ясно, что для того чтобы выявить, какая из моделей верна, совершенно бессмысленно производить измерение в области  $t \leq 10$  мин.

Наибольшую информацию о том, какая из моделей верна, могут дать измерения при больших временах.

Однако измерения при слишком больших временах экономически невыгодны, поэтому необходим поиск некоторого компромиссного решения. В данном случае, по-видимому, следует проводить в области  $t \sim 100$  мин.

Рассмотренный пример является сравнительно простым. На практике отыскание областей, наиболее выгодных с точки зрения различения конкурирующих моделей, как правило, оказывается сложной задачей и требует применения специального математического аппарата,

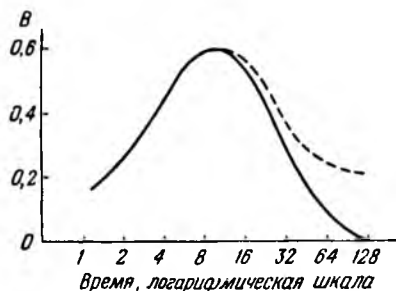


Рис. 26. Концентрация продукта В как функция времени для механизма реакции  $A \rightarrow B \rightarrow C$  (сплошная линия) и механизма  $A \rightarrow B \rightleftharpoons C$  (пунктир) [62].

Резкой границы между этими случаями нет, и лишь сам экспериментатор, учитывая реальную обстановку, решает, какого типа предпринять эксперимент.

II. С точки зрения математической статистики рассматриваемая в данной главе проблема формулируется следующим образом.

Измеряется некоторая величина  $y$ . Результаты измерений являются случайными величинами, которые удовлетворяют перечисленным ниже требованиям.

1. В каждой точке  $x$  факторного пространства  $X$  случайная величина  $y$  распределена с условной плотностью

$$p_j(y/x) = p_j(y/\eta_j(x, \theta_j)), \quad j = 1, 2, \dots, v.$$

Условная плотность распределения и функции  $\eta(x, \theta_j)$  предполагаются известными. Наборы параметров  $\theta_j$  в общем случае могут быть неизвестны.

2. Среднее значение результатов измерений равно

$$E(y/x) = \eta_j(x, \theta_j).$$

3. Для большинства излагаемых ниже методов планирования экспериментов будет необходимо знание функции эффективности эксперимента

$$\lambda_j(x) = D_j^{-1}(y/x) = \left\{ \int_Y [y - \eta_j(x, \theta_j)]^2 p_j(y/x) dx \right\}^{-1},$$

где  $Y$  — область допустимых значений для  $y$ .

4. Если это не оговорено особо, то результаты измерений предполагаются независимыми.

Совокупность требований 1—4 при заданном  $j$  мы будем называть  $H_j$ -гипотезой.

Рассмотрим некоторые понятия, лежащие в основе построения критериев испытания гипотез, сформулированных в виде 1—4.

Пусть совокупность конкурирующих гипотез  $H_1, H_2, \dots, H_v$  заведомо включает в себя истинную гипотезу (т. е. ту, которая соответствует реально происходящему процессу). Предположим, что в эксперименте  $\mathcal{E}$  в точках  $x_1, x_2, \dots, x_n$  были получены результаты  $y_1, y_2, \dots, y_n$  (некоторые точки  $x_i$  могут совпадать между собой).

Процесс поиска истинной гипотезы должен опираться на некоторое решающее правило  $\delta$ , согласно которому множество всех возможных выборок  $y^T = \|y_1, y_2, \dots, y_n\|$  (см. § 1.2) заданного объема разбирается на  $v$  непересекающихся областей  $R_{Nj}$  ( $j=1, 2, \dots, v$ ). Если выборка принадлежит области  $R_{Nj}$ , то принимается гипотеза  $H_j$ . Иногда наряду с множествами  $R_{Nj}$  ( $j=1, 2, \dots, v$ ) вводится так называемая зона безразличия  $R_{N0}$ . Если выборка  $y$  принадлежит  $R_{N0}$ , ни одна из гипотез  $H_j$  не принимается и измерения следует продолжать. Область  $\bar{R}_{Nj}$ , составленная из областей  $R_{N1}, \dots, R_{N(j-1)}, R_{N(j+1)}, \dots, R_{Nv}$ , называется критической по отношению к гипотезе  $H_j$  ( $\bar{R}_{Nj} = \bigcup_{k \neq j} R_{Nk}$ ).

Результатам каждого эксперимента можно сопоставить потери  $Q(\delta)$ , которые складываются из затрат на проведение измерений и возможного штрафа в случае принятия неверного решения. Ввиду того что величины  $y$  — случайные, то, вообще говоря, при заданном правиле разбиения  $\delta$  для выборок заданного объема мы будем от эксперимента к эксперименту получать различные значения потерь.

Естественно потребовать, чтобы разбиение на области  $R_{N_0}, R_{N_1}, \dots, R_{N_v}$  производилось так, чтобы минимизировалось среднее по  $y$  значение потерь:

$$\mathcal{R}(\delta) = E_y [Q(\delta)].$$

Так как функция распределения  $\Psi(y)$  зависит от вида истинной гипотезы, то и средние потери являются функцией  $H_{\text{ист}}$ .

В общем случае не удастся найти правило  $\delta$ , которое минимизировало бы  $\mathcal{R}(\delta)$  вне зависимости от значения  $H_{\text{ист}}$  ( $\delta$  называется правилом с равномерно наименьшим риском [63]). Поэтому обычно стремятся либо найти правило с равномерно наименьшим риском для некоторого узкого класса гипотез, либо найти правило, минимизирующее бейесовский риск.

Под бейесовским риском мы понимаем величину

$$r[p_0(H), \delta] = E_H [\mathcal{R}(\delta)],$$

где оператор  $E_H$  означает усреднение по множеству гипотез  $H$  с априорной плотностью распределения  $p(H, 0)$ . При отсутствии априорной информации относительно проверяемых гипотез можно минимизировать максимальный риск:

$$\max_H \mathcal{R}(\delta).$$

В дальнейшем вне зависимости от критерия оптимальности, использованного при выборе оптимального правила, мы будем обозначать последнее через  $\delta^*$ , а риск, который  $\delta^*$  минимизирует, через  $r(\delta^*)$ .

Нетрудно видеть, что при гипотезах  $H_j$  ( $j=1, 2, \dots, v$ ), сформулированных в виде 1—4, функция  $r(\delta)$  зависит не только от правила  $\delta$  построения областей  $R_{N_0}, R_{N_1}, \dots, R_{N_v}$ , но и от положения точек  $x_1, x_2, \dots, x_n$  в факторном пространстве (от плана  $\mathcal{E}(N)$ ,  $N$ —общее число измерений, проведенных в указанных точках). Поэтому имеет смысл говорить о планировании экспериментов по поиску истинной гипотезы, т. е. о поиске планов  $\mathcal{E}^*(N)$ , которые минимизировали бы  $r(\delta^*, \mathcal{E}(N))$ .

III. Если совокупность гипотез  $H_j$  ( $j=1, 2, \dots, v$ ) может не содержать истинную гипотезу, то выводы типа: «Мы принимаем гипотезу  $H_j$ »—оказываются невозможными. Экспериментатор может сделать вывод лишь о том,

что результаты измерений не противоречат гипотезам  $H_{j_1}, H_{j_2}, \dots, H_{j_k}$  ( $k \leq v$ ), или противоположный вывод — результаты измерений противоречат гипотезам  $H_{j_1}, H_{j_2}, \dots, H_{j_k}$ , и эти гипотезы следует отбросить. В данном случае утверждение о том, что гипотезы  $H_1, \dots, H_{j-1}, H_{j+1}, \dots, H_v$  неверны, в отличие от предыдущего, не эквивалентно утверждению о том, что верна гипотеза  $H_j$ . Очевидно, что для рассматриваемого случая имеет смысл говорить только о критических областях  $\bar{R}_{Nj}$  ( $j=1, 2, \dots, v$ ), которые, вообще говоря, могут пересекаться между собой, и области безразличия  $R_{N0}$ .

Указанные замечания следует учесть при построении функции потерь  $Q(\delta)$ , где правило  $\delta$  указывает способ построения областей  $\bar{R}_{Nj}$ .

**IV.** Резюмируя материал разделов II и III, перечислим основные проблемы, с которыми экспериментатор сталкивается при испытании гипотез.

1. Выбор совокупности конкурирующих гипотез. Наиболее сильные результаты удастся получить, если удастся отыскать систему конкурирующих гипотез, заведомо включающую в себя истинную гипотезу.

Очевидно, что планирование будет тем эффективней, чем меньше объем совокупности конкурирующих гипотез.

2. Построение функции потерь  $Q(\delta)$ . Функция  $Q(\delta)$  обычно ищется как некоторое компромиссное решение, удовлетворяющее двум в большинстве случаев трудно совместимым требованиям: функция должна иметь простой вид и в то же время должна достаточно хорошо описывать реальные потери, сопутствующие данному эксперименту  $\mathcal{E}$  и решающему правилу  $\delta$  ( $\mathcal{E}$ ).

3. Анализ априорных сведений для построения вероятностей  $p(H_j, 0)$ .

4. Выбор оптимального решающего правила при заданной функции  $r(\delta)$ .

5. Оптимальное размещение затрат в области действия  $X$  (планирование эксперимента).

Решение проблем, указанных в пунктах 1 и 3, во многом ложится на плечи экспериментатора как квалифицированного специалиста в той области науки, которой соответствует проводимое исследование. Только такой специалист в состоянии наиболее полно извлечь



сведения, заключенные в теоретических исследованиях и в аналогичных экспериментальных исследованиях, и затем представить их в терминах не слишком большого числа гипотез  $H_j$  и их априорных вероятностей  $p(H_j, 0)$ .

При выборе подходящей функции потерь обычно ориентируются на те классы функций  $Q(\delta)$ , для которых решена проблема выбора оптимального решающего правила  $\delta^*$ .

Наиболее сложными с математической точки зрения являются проблемы, изложенные в пунктах 4 и 5.

Задаче выбора оптимального решающего правила посвящена довольно обширная литература (см., например, [63]—[65]). Значительно меньше внимания уделялось в литературе планированию экспериментов по испытанию гипотез.

Данная глава в основном посвящена построению математического аппарата планирования подобных экспериментов. При этом в большинстве случаев решающее правило будет предполагаться заданным. Подробную информацию о свойствах используемых решающих правил можно получить в указанных выше монографиях.

Чтобы подчеркнуть, что речь идет об испытании гипотез специального вида (см. раздел II), в данной книге вместо термина «испытание гипотез» будет употребляться термин «дискриминация (математических) моделей (процесса)» или «поиск наилучшей математической модели (процесса)». Последние два термина широко распространены в работах по планированию экспериментов рассматриваемого типа.

## § 6.2. Критерии, опирающиеся на меры, зависящие от разности сумм взвешенных квадратичных отклонений

1. Предположим теперь, что результаты измерений — независимые, нормально распределенные случайные величины

$$p(y/\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)) = (2\pi)^{-1/2} \sigma^{-1}(\mathbf{x}) e^{-\frac{1}{2} \left[ \frac{y - \eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)}{\sigma(\mathbf{x})} \right]^2}.$$

Здесь и в дальнейшем мы будем иметь дело только с нормальным законом распределения.

Хотя на практике результаты измерений лишь в редких случаях подчинены точному нормальному закону распределения, имеется ряд аргументов в пользу выделения нормального закона из остальных законов распределения.

1. На особую роль нормального распределения указывает центральная предельная теорема [13], [14].

Так как ошибки измерений в большинстве практических случаев являются суперпозицией большого числа малых независимых ошибок, обусловленных различными причинами, то в силу центральной предельной теоремы ошибки измерений будут распределены по закону, близкому к нормальному (подробно см., например, гл. 3 из [17]).

Применяя центральную предельную теорему, в частности, к результатам измерений, сгруппированных в одной точке  $x_i$  факторного пространства, можно убедиться

также в том, что их среднее арифметическое  $y_i = r_i^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} y_{ir}$  имеет при достаточно большом  $r_i$  распределение, близкое к нормальному.

Проводя группированные измерения и опираясь затем на  $y_i$  как результаты, мы можем применять любые методы, развитые в предположении нормальности закона распределения результатов наблюдений. При этом в некоторых случаях часть информации «теряется», т. е. статистики, опирающиеся на  $y_i$ , и  $r_i^{-1}\sigma_i^2$ , могут оказаться недостаточными. В большинстве практических случаев этими потерями можно пренебречь.

Так как для построения наилучших линейных оценок требуются лишь величины  $y_i$  и их дисперсии  $r_i^{-1}\sigma_i^2$  (см. следствие 6 теоремы 1.3.2), то нетрудно убедиться, что и наилучшие линейные оценки имеют в этом случае нормальный закон распределения. Опираясь на центральную предельную теорему, можно также проверить, что наилучшие линейные оценки имеют закон распределения, близкий к нормальному и при негруппированных измерениях, если общее число измерений достаточно велико ( $N \rightarrow \infty$ ).

2. Вид функции (6.2.1) прост и эта функция хорошо изучена. Подробно изучены и затабулированы распределения вероятностей для широкого класса величин,

являющихся функциями нормально распределенных случайных величин.

3. Нормальное распределение хорошо описывает асимптотики многих распределений, например, пуассоновского,  $\chi^2$ -распределения и т. д. (см., например, [67]).

II. Пусть имеются две конкурирующие модели  $H_1$  и  $H_2$ , сформулированные согласно разделу II предыдущего параграфа. Рассмотрим следующее решающее правило.

После  $N$  измерений

1) принимается модель  $H_1$ , если

$$S_2(N) - S_1(N) > 0, \quad (6.2.1)$$

где

$$S_j(N) = \sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta_j(\mathbf{x}_i, \hat{\theta}_j)]^2; \quad j=1, 2; \quad (6.2.2)$$

$\hat{\theta}_j$  — наилучшие линейные (квазилинейные) оценки в предположении верности соответствующей модели,  $N$  — суммарное число измерений, проведенных в точках  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ ;

2) принимается модель  $H_2$ , если

$$S_2(N) - S_1(N) < 0. \quad (6.2.3)$$

Если в некоторых точках  $\mathbf{x}_i$  проведено по несколько измерений  $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ir}$ , то вместо полных сумм

$$\sum_{i=1}^n \sum_{r=1}^{r_i} w_{ir} [y_{ir} - \eta_j(\mathbf{x}_i, \hat{\theta}_j)]^2$$

удобнее в (6.2.1) и (6.2.3) использовать величины

$$\sum_{r=1}^{r_i} w_i [y_i - \eta_j(\mathbf{x}_i, \hat{\theta}_j)]^2,$$

где

$$w_i = \sum_{r=1}^{r_i} w_{ir} \quad \text{и} \quad y_i = \sum_{r=1}^{r_i} w_{ir} y_{ir}.$$

При такой замене значение разности, стоящей в левой части неравенства (6.2.1) или (6.2.3), не изменится. В этом легко убедиться непосредственной проверкой. Поэтому в дальнейшем, если это не оговорено особо, под  $w_i$  и  $y_i$

будут подразумеваться соответственно суммарный вес и среднее результатов наблюдений, проведенных в точке  $x_i$ .

Предположим, что принимается  $k$ -я модель, в то время как верна  $j$ -я модель. Тогда потери будут равны

$$Q_{kj} = cN + \gamma_{kj}, \quad (6.2.4)$$

где  $c$  — стоимость из  $N$  измерений,  $\gamma_{kj}$  — штраф за принятие неверной модели.

Пусть число измерений  $N$  фиксировано и задано априори. Тогда байесовский риск при указанном решающем правиле и потерях (6.2.4) равен

$$r(N) = cN + \sum_{j=1}^2 p(H_j, 0) \gamma_{kj} P[S_j(N) - S_k(N) \geq 0 / H_j]; \quad j \neq k. \quad (6.2.5)$$

Здесь

$$P[S_j(N) - S_k(N) > 0 / H_j] \quad (6.2.6)$$

— вероятность того, что разница  $S_j(N) - S_k(N)$  больше нуля, если верна  $j$ -я модель. Если плотность распределения  $p_j(y/\eta_j(x, \theta_j))$  известна, то соответствующие вероятности можно в принципе вычислить для каждого из планов  $\mathcal{G}(N)$ . Однако уже для сравнительно простых поверхностей отклика приходится сталкиваться с серьезными вычислительными затруднениями, которые делают построение оптимального плана практически невозможным.

Выходом из данного положения может служить замена функции  $r(N)$  на некоторую другую функцию  $\tilde{r}(N)$ , близкую к  $r(N)$  в интересующей экспериментатора области и в то же время не требующую громоздких вычислений. Наиболее простые и наглядные результаты получаются в тех случаях, когда вероятности (6.2.6) удается аппроксимировать некоторыми функциями

$$\Phi_{jk} \{E_j[S_j(N) - S_k(N)]\} \quad (j=1, 2; k=1, 2; j \neq k),$$

где  $E_j$  — оператор усреднения по результатам измерений в предположении вероятности  $j$ -й гипотезы. При этом байесовский риск будет приближенно определяться функцией

$$\tilde{r}(N) = cN + \sum_{j=1}^2 p(H_j, 0) \gamma_{kj} \Phi_{jk} \{E_j[S_j(N) - S_k(N)]\}. \quad (6.2.7)$$

Приближение (6.2.7) обычно оказывается достаточно хорошим при больших  $E_j[S_j(N) - S_k(N)]$ .

Планирование дискриминирующего эксперимента в предположении близости  $r(N)$  и  $r(N)$  состоит в поиске плана  $\varepsilon^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; p_1, p_2, \dots, p_n)$ , минимизирующего величину

$$l(N) = \sum_{j=1}^2 p(H_j, 0) \gamma_{kj} \Phi_{jk} \{E_j[S_j(N) - S_k(N)]\}. \quad (6.2.8)$$

К необходимости поиска плана, минимизирующего величины типа (6.2.8), можно также прийти, если в качестве меры различия между регрессионными кривыми использовать разницу

$$z = S_j(N) - S_k(N)$$

или некоторые достаточно гладкие функции  $\Phi_{jk}(z)$  от этой величины.

Действительно, пусть центральные моменты  $d_l(z)$  ( $l \geq 2$ ) конечны и производные  $\Phi_{jk}^{(l)}(z)$ , начиная со второй, малы в областях  $\pm d_l$  ( $l \geq 2$ ), тогда

$$E[\Phi_{jk}(z)] = \Phi_{jk}[E(z)] + \Phi_{jk}'[E(z)] E[z - E(z)] + \\ + \frac{1}{2} \Phi_{jk}''[E(z)] E[z - E(z)]^2 + \dots \simeq \Phi_{jk}[E(z)], \quad (6.2.9)$$

и мы приходим к (6.2.8).

III. Пусть после  $N$  измерений, проведенных в точках  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ , в точке  $\mathbf{x}$  проводится измерение с весом  $\omega(\mathbf{x}) = \Delta N \lambda(\mathbf{x})$ . Выясним, как ведет себя при этом величина  $S(N + \Delta N)$ .

Здесь и далее (главы 6, 7) мы будем предполагать, что зависимость от неизвестных параметров линейная:  $\eta(\mathbf{x}, \theta) = \theta^T \mathbf{f}(\mathbf{x})$ . Обобщение на квазилинейный случай будет очевидным.

**Лемма 6.2.1.** Если в точке  $\mathbf{x}$  проведено измерение с весом  $\omega = \lambda(\mathbf{x}) \Delta N$ , то

$$d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, N + \Delta N) = \\ = d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, N) - \frac{\omega d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}, N) d(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}, N)}{1 + \omega d(\mathbf{x}, N)}, \quad (6.2.10)$$

где  $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, N)$  — ковариация между оценками поверхности отклика в точках  $\mathbf{x}_i$  и  $\mathbf{x}_j$  после  $N$  измерений.

Доказательство. Умножив обе части равенства (4.2.4) слева на  $f^r(x_1)$  и справа на  $f(x_2)$ , получим

$$f^r(x_1) D(N + \Delta N) f(x_2) = f^r(x_1) D(N) f(x_2) - \frac{\omega f^r(x_1) D(N) f(x) f^r(x) D(N) f(x_2)}{1 + \omega d(x, N)}.$$

Учитывая, что  $d(x_i, x_j, N) = f^r(x_i) D(N) f(x_j)$  (см. § 1.3), нетрудно убедиться в справедливости доказываемой леммы.

**Лемма 6.2.2.** Если в точке  $x$  проведено  $\Delta N$  измерений с суммарным весом  $\omega = \lambda(x) \Delta N$  и результатами  $y_1, y_2, \dots, y_n$ , то

$$\hat{\eta}(\tilde{x}, N + \Delta N) = \hat{\eta}(\tilde{x}, N) + \frac{\omega d(\tilde{x}, x, N) [y - \eta(x, N)]}{1 + \omega d(x, N)}. \quad (6.2.11)$$

где  $y = \Delta N^{-1} \sum_{r=1}^{\Delta N} y_r$ ;  $\hat{\eta}(x, N)$  — наилучшая линейная оценка поверхности отклика после  $N$  измерений, остальные обозначения те же, что и в предыдущей лемме\*).

Доказательство. Согласно (1.3.8)

$$\hat{\theta}(N + \Delta N) = D(N + \Delta N) Y(N + \Delta N), \quad (6.2.12)$$

где  $D(N + \Delta N)$  определяется формулой (4.2.4), а

$$Y(N + \Delta N) = \sum_{i=1}^n y_i \omega_i f(x_i) + \omega y f(x).$$

Умножая слева обе части (6.2.12) на  $f^r(\tilde{x})$  и проведя несложные вычисления, получим

$$\begin{aligned} \hat{\eta}(\tilde{x}, N + \Delta N) &= f^r(\tilde{x}) \left[ I_m - \frac{\omega D(N) f(x) f^r(x)}{1 + \omega d(x, N)} \right] \times \\ &\quad \times D(N) \left[ \sum_{i=1}^n y_i \omega_i f(x_i) + \omega y f(x) \right] = \\ &= f^r(\tilde{x}) \hat{\theta}(N + \Delta N) - \frac{\omega f^r(x) D(N) f(x) [y - \eta(x, \hat{\theta}(N + \Delta N))]^2}{1 + \omega d(x, N)}. \end{aligned}$$

Используя обозначения, выведенные выше, последнее выражение можно переписать в виде (6.2.11).

\*) В дальнейшем мы для краткости будем называть величину  $y_i$  результатом наблюдения в точке  $x_i$ .

**Лемма 6.2.3.** В предположениях леммы 6.2.2 сумму взвешенных квадратичных отклонений после  $N + \Delta N$  измерений можно представить в виде

$$S(N + \Delta N) = S(N) + \frac{[y - \hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]^2}{s(\mathbf{x}, N)}, \quad (6.2.13)$$

где  $s(\mathbf{x}, N) = \omega^{-1} + d(\mathbf{x}, N)$ .

Доказательство. Согласно определению

$$S(N + \Delta N) = \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \hat{\eta}(\mathbf{x}_i, N + \Delta N)]^2 + \omega [y - \hat{\eta}(\mathbf{x}, N + \Delta N)]^2.$$

Используя лемму 6.2.2, преобразуем данное равенство к виду

$$\begin{aligned} S(N + \Delta N) = S(N) + \sum_{i=1}^n \omega_i \Delta^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) - \\ - 2 \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \hat{\eta}(\mathbf{x}_i, N)] \Delta(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + \\ + \omega [y - \hat{\eta}(\mathbf{x}, N) - \Delta(\mathbf{x}, \mathbf{x})]^2, \end{aligned} \quad (6.2.14)$$

где

$$\Delta(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \frac{d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}, N) [y - \hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]}{s(\mathbf{x}, N)}. \quad (6.2.15)$$

Выражение (6.2.14) можно упростить, если учесть, что

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \omega_i d^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}, N) = \\ = \sum_{i=1}^n \omega_i \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \\ = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}(N) \mathbf{M}(N) \mathbf{D}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x}) = d(\mathbf{x}, N). \end{aligned}$$

Аналогичными выкладками нетрудно проверить справедливость еще двух соотношений:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \omega_i y_i d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}, N) = \hat{\eta}(\mathbf{x}, N), \\ \sum_{i=1}^n \omega_i \hat{\eta}(\mathbf{x}_i, N) d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}, N) = \dot{\eta}(\mathbf{x}, N). \end{aligned}$$

Подставив данные тождества в (6.2.14), после несложных преобразований получим (6.2.13).

IV. Обратимся к подсчету величин типа (6.2.8) при заданном плане эксперимента.

Для этого необходимо знать апостериорные распределения параметров  $\theta$  и поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  в заданной точке  $\mathbf{x}$ . Если какие-либо предварительные сведения о параметрах  $\theta$  отсутствуют, то естественно предположить, что априори все значения равновероятны, т. е.  $p(\theta, 0) \sim \text{const}$  [58]. Здесь  $p(\theta, 0)$  — априорная плотность распределения.

**Лемма 6.2.4.** Пусть в точках  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$  проведены измерения с результатами  $\mathbf{y}^T = \|y_1, y_2, \dots, y_n\|$  и пусть  $p_0(\theta) \sim \text{const}$ , тогда условная плотность распределения искомых параметров равна

$$p(\theta, N) = (2\pi)^{-m/2} |\mathbf{D}(N)|^{-1/2} e^{-1/2 (\hat{\theta}(N) - \theta)^T \mathbf{D}(N) (\hat{\theta}(N) - \theta)}, \quad (6.2.16)$$

а условная плотность распределения значения  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  поверхности отклика в заданной точке факторного пространства равна

$$p(\eta(\mathbf{x}, \theta), N) = [2\pi d(\mathbf{x}, N)]^{-1/2} e^{-\frac{[\eta(\mathbf{x}, \theta) - \hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]^2}{d(\mathbf{x}, N)}}, \quad (6.2.17)$$

где  $\hat{\theta}(N)$  — наилучшие линейные оценки для искомых параметров,  $\mathbf{D}(N)$  — их дисперсионная матрица.

Доказательство. 1. Согласно формуле Бейеса

$$p(\theta, N) = \frac{p(\mathbf{y}/\theta) p(\theta, 0)}{\int p(\mathbf{y}/\theta) p(\theta, 0) d\theta}, \quad (6.2.18)$$

где  $p(\mathbf{y}/\theta)$  — условная плотность распределения результатов наблюдений при заданном  $\theta$ . Так как  $p(\theta, 0) \sim \text{const}$ , то

$$p(\theta, N) \sim p(\mathbf{y}/\theta).$$

Отсюда и из нормальности закона распределения результатов наблюдений:

$$p(\theta, N) \sim \prod_{i=1}^n \prod_{r=1}^{r_i} p(y_i/\eta(\mathbf{x}_i, \theta)) \sim e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i [y_i - f^i(\mathbf{x}_i)\theta]^2}$$



Показатель экспоненты можно преобразовать к виду (ср. с (1.5.4))

$$\sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta]^2 = \sum_{i=1}^n \omega_i [y_i - \hat{\eta}(\mathbf{x}_i, N)]^2 + \\ + (\hat{\theta}(N + \Delta N) - \theta)^T \mathbf{D}^{-1}(N) (\hat{\theta}(N + \Delta N) - \theta).$$

Объединяя две последние формулы и используя известный факт о том, что

$$\int e^{-\frac{1}{2}(\hat{\theta} - \theta)^T \mathbf{D}^{-1}(\hat{\theta} - \theta)} d\theta = (2\pi)^{m/2} |\mathbf{D}|^{1/2},$$

получим (6.2.16).

2. Так как функция  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  является линейной комбинацией параметров  $\theta$ , апостериорное распределение которых подчиняется нормальному закону, то для определения апостериорного распределения достаточно знать его среднее и дисперсию. Из (6.2.16):

$$E[\eta(\mathbf{x}, \theta)] = \hat{\eta}(\mathbf{x}, N) \quad \text{и} \quad D[\eta(\mathbf{x}, \theta)] = d(\mathbf{x}, N).$$

Отсюда легко убедиться в справедливости (6.2.17).

Результаты леммы 6.2.4 дают возможность производить подсчет величин типа (6.2.7) при заданных планах экспериментов.

Если априорное распределение отлично от равномерного, то подсчет апостериорных распределений, вообще говоря, затрудняется. Однако, если априорное распределение нормально, указанные распределения определяются по очень схожим с (6.2.16) и (6.2.17) формулам.

Пусть  $\hat{\theta}(0)$  и  $\mathbf{D}(0)$  — параметры априорного распределения, подчиненного нормальному закону. Повторяя рассуждения, аналогичные приведенным при доказательстве леммы 6.2.4, легко убедиться, что апостериорные распределения будут подсчитываться по формулам (6.2.16) и (6.2.17) с заменой в них (ср. с теоремой 4.4.1) матрицы  $\mathbf{D}(N)$  на матрицу

$$\tilde{\mathbf{D}}(N) = [\mathbf{D}^{-1}(0) + \mathbf{D}^{-1}(N)]^{-1}, \quad (6.2.19)$$

вектора  $\hat{\theta}(N)$  — на вектор

$$\hat{\theta}(N) = \tilde{\mathbf{D}}(N) [\mathbf{D}^{-1}(0) \hat{\theta}(0) + \mathbf{D}^{-1}(N) \hat{\theta}(N)], \quad (6.2.20)$$

дисперсии  $d(\mathbf{x}, N)$  — на  $\bar{d}(\mathbf{x}, N) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{D}}(N) \mathbf{f}(\mathbf{x})$  и  $\bar{\eta}(\mathbf{x}, N)$  на  $\bar{\eta}(\mathbf{x}, N) = \bar{\theta}^T(N) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ .

В тех случаях, когда априорное распределение отличается от нормального, формулы (6.2.19) и (6.2.20) совместно с (6.2.16) и (6.2.17) могут использоваться как приближенные. С ростом количества измерений роль априорных сведений уменьшается и при достаточно больших  $N$  или сильно размытом априорном распределении ( $D_{\alpha\beta}^i(N) \gg D_{\alpha\beta}^i(0)$ ;  $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, m$ ) равенства (6.2.19) и (6.2.20) можно заменить на приближенные

$$\bar{\mathbf{D}}(N) \simeq \mathbf{D}(N) \text{ и } \hat{\theta}(N) \simeq \hat{\theta}(N),$$

а формулы (6.2.16) и (6.2.17) рассматривать как приближенные.

Рассмотрим планы, сосредоточенные в одной точке.

**Теорема 6.2.1** [55]. *Если в точке  $\mathbf{x}$  проводится  $\Delta N$  измерений с суммарным весом  $\omega = \lambda(\mathbf{x}) \Delta N$ , то*

$$E_j [S_j(N + \Delta N) - S_k(N + \Delta N)] = S_j(N) - S_k(N) - \frac{[\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)]^2 + d_j(\mathbf{x}, N) - d_k(\mathbf{x}, N)}{s_k(\mathbf{x}, N)}, \quad (6.2.21)$$

где оператор  $E_j$  означает усреднение по результатам измерений в точке  $\mathbf{x}$  в предположении, что справедлива  $j$ -я модель ( $j = 1, 2$ ;  $k \neq j$ ), остальные обозначения те же, что и в предыдущем разделе.

**Доказательство.** Найдем апостериорное распределение результатов наблюдений в заданной точке факторного пространства в предположении верности  $j$ -й модели. Из (6.2.1) и леммы 6.2.4:

$$p(y/\mathbf{x}, N) = \int p(y/\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)) p(\theta_j, N) d\theta_j = [2\pi(\sigma^2(\mathbf{x}) + d_j(\mathbf{x}, N))]^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} \frac{[y - \eta_j(\mathbf{x}, N)]^2}{\sigma^2(\mathbf{x}) + d_j(\mathbf{x}, N)}}, \quad (6.2.22)$$

где  $\sigma^2(\mathbf{x}) = \lambda^{-1}(\mathbf{x})$ .

Если в точке  $\mathbf{x}$  проводится несколько измерений  $y_1, y_2, \dots, y_{\Delta N}$ , то среднее значение результатов  $y = \Delta N^{-1} \sum_{r=1}^{\Delta N} y_r$  будет распределено по закону 6.2.22 с заменой  $\sigma^2(\mathbf{x}) = \lambda^{-1}(\mathbf{x})$  на  $\sigma^2(\mathbf{x}) = [\lambda(\mathbf{x}) \Delta N]^{-1}$ .

Из леммы 6.2.3

$$\begin{aligned} S_j(N + \Delta N) - S_k(N + \Delta N) &= \\ &= S_j(N) - S_k(N) - \frac{[y - \hat{\eta}_k(x, N)]^2}{s_k(x, N)} + \frac{[y - \hat{\eta}_j(x, N)]^2}{s_j(x, N)}. \end{aligned} \quad (6.2.23)$$

Взяв среднее от обеих частей (6.2.23), получим с учетом (6.2.22)

$$\begin{aligned} E_j[S_j(N + \Delta N) - S_k(N + \Delta N)] &= \\ &= S_j(N) - S_k(N) - \frac{s_j(x, N) + [\hat{\eta}_j(x, N) - \hat{\eta}_k(x, N)]^2}{s_k(x, N)} + 1 = \\ &= S_j(N) - S_k(N) - \frac{[\hat{\eta}_j(x, N) - \hat{\eta}_k(x, N)]^2 + d_j(x, N) - d_k(x, N)}{s_k(x, N)}, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Из доказанной теоремы следует, что если ограничиться множеством одноточечных планов, то оптимальный план  $\mathcal{G}^*(\Delta N)$  состоит из  $\Delta N$  измерений, проведенных в точке, соответствующей

$$\begin{aligned} \min_{x \in X} \sum_{j=1}^2 p(H_j, N) \gamma_{kj} \times \\ \times \Phi_{jk} \{E_j[S_j(N + \Delta N) - S_k(N + \Delta N)]\}, \end{aligned} \quad (6.2.24)$$

где среднее значение разности  $S_j(N + \Delta N) - S_k(N + \Delta N)$  определяется формулой (6.2.21).

В некоторых случаях цель проводимых экспериментов не определена в таком виде, который позволил бы найти связь между потерями от неправильного принятия первой модели и потерями от неправильного принятия второй модели. В подобной ситуации измерения следует проводить в точке, соответствующей

$$\max_{x \in X} \min_{\substack{k=1, 2 \\ k \neq j}} E_k[S_j(N + \Delta N) - S_k(N + \Delta N)]. \quad (6.2.25)$$

Очевидно, что построение плана  $\mathcal{G}^*(\Delta N)$  возможно, если проведен затравочный эксперимент по некоторому плану  $\mathcal{G}(N_0)$ , невырожденному относительно регрессионных кривых  $\eta_1(x, \theta_1)$  и  $\eta_2(x, \theta_2)$ , т. е. спектр которого должен состоять, по крайней мере, из  $m = \max(m_1, m_2)$  точек, где  $m_1$  и  $m_2$  — соответственно размерность векторов  $\theta_1$  и  $\theta_2$ .

Из (6.2.24) следует, что каждая  $N$ -я точка  $x_N$  выбирается так, чтобы в результате  $N$ -го измерения при заданном выше виде  $\eta_1(x, \theta_1)$  и  $\eta_2(x, \theta_2)$  средние возможные потери за счет принятия неверной гипотезы  $l(N)$  (см. 6.2.8)) уменьшались как можно быстрее.

V. Положение точки  $x_N$  меняется в зависимости от величины  $N$ . Это объясняется тем фактом, что скорость уменьшения величины  $l(N, x)$  при измерении в одной точке факторного пространства падает при росте  $\Delta N$ . Непосредственным дифференцированием  $l(N, x)$  легко проверить, что

$$\frac{\partial}{\partial \Delta N} |l(N, x)| = O(\Delta N^{-2}), \quad (6.2.26)$$

где  $\Delta N$  — число измерений, проведенных в точке  $x$ . В (6.2.26) предполагалось, что функции  $\Phi_{jk}(z)$  близки в исследуемой окрестности  $z$  к линейным. В противном случае зависимость производной  $\frac{\partial}{\partial \Delta N} |l(N, x)|$  от  $\Delta N$  изменится по сравнению с (6.2.26), но характерный выход  $l(N, x)$  на асимптотику сохранится.

Проследим подробнее причины передвижения точки  $x_N$  в факторном пространстве при росте  $N$ . Будем предполагать, что выполняются следующие неравенства:

$$|d_j(x, \tilde{x}, N)| \ll [\lambda(x) \lambda(\tilde{x})]^{-1/2} \quad (6.2.27)$$

и

$$\begin{aligned} & |d_j(x, \tilde{x}, N)| \ll \\ & \ll |\hat{\eta}_j(x, N) - \hat{\eta}_k(x, N)| \cdot |\hat{\eta}_j(\tilde{x}, N) - \hat{\eta}_k(\tilde{x}, N)|, \end{aligned} \quad (6.2.28)$$

где  $j=1, 2, \dots, j \neq k$ .

Неравенства (6.2.27) и (6.2.28) обычно имеют место при  $N \gg m_j$  ( $m_j$  — число неизвестных параметров при  $H_j$ -гипотезе). Например, для непрерывного  $D$ -оптимального плана  $\mathcal{G}_j^*(N)$  согласно теореме 2.2.1

$$\max_{x \in X} \lambda(x) d_j(x, N) = m_j N^{-1}$$

и, следовательно,

$$d_j(x, N) \leq \lambda^{-1}(x) m_j N^{-1}. \quad (6.2.29)$$

Из (6.2.29) и неравенства

$$\left| \frac{d(x, \tilde{x}, N)}{\sqrt{d(x, N) d(\tilde{x}, N)}} \right| \leq 1,$$

следующего из определения ковариации  $d(x, \tilde{x}, N)$ , вытекает, что

$$|d_j(x, \tilde{x}, N)| \leq m_j N^{-1} [\lambda(x) \lambda(\tilde{x})]^{-1/2}.$$

Для произвольного невырожденного плана  $\mathcal{G}(N)$ , отличного от  $D$ -оптимального, последнее неравенство переходит в более слабое условие

$$|d_j(x, \tilde{x}, N)| \leq d_j(\varepsilon_N) N^{-1} [\lambda(x) \lambda(\tilde{x})]^{-1/2}, \quad (6.2.30)$$

где  $d_j(\varepsilon_N) = \max_{x \in X} \lambda(x) d_j(x, \varepsilon_N)$  и  $\varepsilon_N$  — нормированный план, соответствующий  $\mathcal{G}(N)$ . Обычно  $d_j(x, \varepsilon_N)$  одного порядка с  $m_j$ .

Таким образом, для выполнения неравенства (6.2.27) достаточно, чтобы  $m_j N^{-1} \leq 1$  ( $j=1, 2$ ). Неравенство (6.2.28) для областей, где  $\hat{\eta}_j(x, N)$  и  $\hat{\eta}_k(x, N)$  заметно отличаются друг от друга, является следствием первого неравенства.

Пусть в точке  $x_N$  проведено измерение с весом  $\omega(x_N)$ . Тогда из лемм 6.2.1 и 6.2.2 получим ( $j=1, 2$ ):

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_j(x, N+1) &= \\ &= \hat{\eta}_j(x, N) + \frac{\omega(x_N) d_j(x, x_N, N) [y - \hat{\eta}_j(x, N)]}{1 + \omega(x_N) d_j(x, N)}, \end{aligned}$$

$$d_j(x, x_N, N+1) = d_j(x, x_N, N) - \frac{\omega(x_N) d_j^2(x, x_N, N)}{1 + \omega(x_N) d_j(x_N, N)}$$

или, сохраняя члены первого порядка малости,

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_j(x, N+1) - \hat{\eta}_k(x, N+1) &= \hat{\eta}_j(x, N) - \hat{\eta}_k(x, N) - \\ &- \omega(x_N) \{ d_k(x, x_N, N) [y - \hat{\eta}_k(x_N, N)] - \\ &- d_j(x, x_N, N) [y - \hat{\eta}_j(x_N, N)] \}, \quad (6.2.31) \end{aligned}$$

$$d_j(x, x_N, N+1) = d_j(x, x_N, N) [1 + \omega(x_N) d_j(x, x_N, N)].$$

Из (6.2.31) следует (рис. 27), что кривые  $\hat{\eta}_1(x)$  и  $\hat{\eta}_2(x)$

имеют тенденцию к сближению в точке  $\mathbf{x}_N$  и, в зависимости от знака  $d_j(\mathbf{x}, \mathbf{x}_N, N)$ ,  $j=1, 2$ , к сближению или удалению в иных точках факторного пространства.

Чтобы убедиться в этом, достаточно подействовать оператором усреднения на обе части (6.2.31). Тогда в предположении верности  $j$ -й модели

$$E[\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N+1) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N+1)] = \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N) - \omega(\mathbf{x}_N) d_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_N, N) [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}_N, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}_N, N)].$$

Так как  $d_k(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_N, N) = d_k(\mathbf{x}_N, N) > 0$ , то:

$$|E_j[\hat{\eta}_j(\mathbf{x}_N, N+1) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}_N, N+1)]| < | \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N) |.$$

В остальных точках знак поправки определяется знаком ковариации  $d_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_N, N)$  (см. рис. 27).

Сближение в среднем кривых  $\hat{\eta}_1(\mathbf{x}_N)$  и  $\hat{\eta}_2(\mathbf{x}_N)$  вызывает ухудшение условий накопления в точке  $\mathbf{x}_N$  сведений, необходимых для дискриминации моделей.

В связи с этим становится очевидным, что при больших  $\Delta N$  одноточечные планы  $\mathcal{G}^*(\Delta N)$  становятся менее выгодными, чем планы, состоящие из нескольких точек.

**VI.** Построение оптимальных дискриминирующих статических планов, спектры которых состоят из нескольких точек, является крайне громоздкой вычислительной задачей. К тому же способы дискриминации гипотез, опирающиеся на выборки фиксированного размера, уже при заданном плане эксперимента требуют для достижения заданной точности в среднем значительно больше измерений, чем последовательные критерии [63], [67].

Поэтому естественно обратиться к последовательным способам дискриминации гипотез и к последовательному планированию дискриминирующих экспериментов. Кроме того, как мы увидим позже, последовательное планирование просто с вычислительной точки зрения. Оно позволяет использовать сведения, приобретаемые в ходе эксперимента.

Здесь будет уместно провести аналогию с планированием экспериментов по определению оценок неизвестных параметров при нелинейной параметризации.

Как было показано в гл. 2, в этом случае возможно построение локально оптимальных планов  $\mathcal{E}^*(N, \theta_{\text{ист}})$ , характеристики которых существенно зависят от истинных значений иско- мых параметров, ко- торые, естественно, до опыта неизвестны. В связи с этим ока- зывается возможным лишь последователь- ное построение (см. гл. 3) локально опти- мальных планов. Суть этого планиро- вания состоит в том, что общее число изме- рений, отведенных на весь эксперимент, разбивается на не- большие части, кото- рые затем проводятся в точках, наиболее оптимальных с точки зрения приобретен- ных к данному мо- менту знаний (или более строго — точка факторного простран- ства, в которой сле- дует провести последующую группу изме- рений, определяется значениями  $\hat{\theta}(N)$  и  $D(N)$ ).

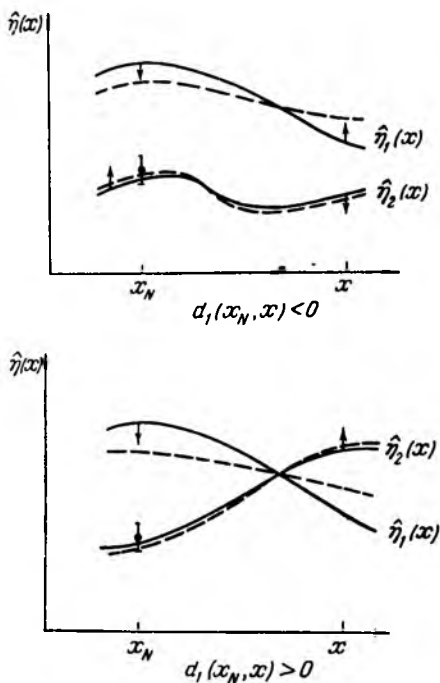


Рис. 27. Изменение оценок регрессионных кривых при проведении дополнительного измерения.

Результат измерения нанесен точкой; половина длины отрезка, центром которого является указанная точка, равна ошибке измерения. Сплошная линия соответствует оценкам кривых  $\hat{\eta}_j(x)$  до проведения дополнительного измерения пунктирная — оценка кривых  $\hat{\eta}_j(x)$  после проведения дополнительного измерения.

При этом размещение измерений в факторном пространстве становится тем ближе к локально оптимальному, чем ближе оценка  $\hat{\theta}(N)$  к истинному значению параметров  $\theta_{\text{ист}}$ . Весьма схожая картина наблюдается и при дискриминации гипотез.

Пусть для примера истинной моделью является первая модель —  $\eta_1(x, \theta_1)$  и истинные значения параметров

есть  $\theta_{\text{ист}}$ . В этом случае локально оптимальным планом является план, максимизирующий разницу

$$\Delta = S_2(N, \theta_{\text{ист}}) - S_1(N, \theta_{\text{ист}}),$$

или некоторую монотонно возрастающую функцию от  $\Delta$  (ср. с разделом II данного параграфа).

Так как истинная модель и истинные значения соответствующих ей искомым параметров неизвестны, то мы приходим к необходимости поступить так же, как и при единственной модели. Общее число возможных измерений разбивается на небольшие части. После осуществления данной группы измерений проводится анализ полученных экспериментальных данных. Опираясь на полученные сведения, мы находим оптимальное (с точки зрения уже имеющихся результатов) размещение следующего измерения или группы измерений и т. д. Обращаясь к несколько более вольной терминологии, идею последовательного планирования в данном случае можно сформулировать следующим образом:

... разведка природы — планирование —

разведка природы — планирование ... ,

причем с каждым новым этапом разведка природы становится все более целеустремленной.

Предположим теперь, что гипотезы проверяются по последовательному критерию, который определяется следующим решающим правилом.

1. Принимается первая модель, если

$$\Phi [S_1(N) - S_2(N)] \leq A.$$

2. Принимается вторая модель, если

$$\Phi [S_1(N) - S_2(N)] \geq B.$$

3. Измерения продолжаются, если

$$A < \Phi [S_1(N) - S_2(N)] < B.$$

Последовательные критерии, как уже упоминалось выше, при подходящем выборе функции  $\Phi(z)$  позволяют значительно сократить среднее число измерений, необходимых для достижения заданной точности дискриминации гипотез.



При предложенном решающем правиле можно рекомендовать следующую стратегию.

1. После  $N$ -го измерения подсчитываются величины  $d_j(\mathbf{x}, N)$ ,  $\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)$  ( $j=1, 2$ ).

2. Согласно (6.2.24) или (6.2.25) отыскивается точка  $\mathbf{x}_N$ .

3. Проводится измерение в точке  $\mathbf{x}_N$ .

4. Повторяются операции 2, 3 с заменой индекса  $N$  на  $N+1$  и т. д. до тех пор, пока не будут исчерпаны все средства, отведенные на эксперимент, или возможные потери  $l(N)$  не окажутся меньше заданного уровня.

При подсчете величин  $d_j(\mathbf{x}, N)$ ,  $\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)$  ( $j=1, 2$ ) после каждого дополнительного измерения удобно пользоваться результатами лемм 6.2.1 и 6.2.2. Последовательная процедура указывает ту точку, измерения в которой будут в данный момент (после  $N$ -го измерения) наиболее полезными с точки зрения дискриминации моделей (при решающем правиле, опирающемся на значение разности  $S_2(N) - S_1(N)$ ). Очевидно, что при этом среднее число измерений, необходимых для дискриминации гипотез, существенно сократится по сравнению с непланируемым экспериментом.

Отметим, что при достаточно больших  $N$  в силу неравенства (6.2.29) или неравенства, приведенного в пояснениях к (6.2.30),

$$\begin{aligned} E_j[S_j(N + \Delta N) - S_k(N + \Delta N)] &\simeq \\ &\simeq E_k[S_k(N + \Delta N) - S_j(N + \Delta N)] \simeq \\ &\simeq \frac{[\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)]^2}{\lambda(\mathbf{x}) \Delta N}. \end{aligned} \quad (6.2.32)$$

Поэтому при симметричных по индексам  $j$  и  $k$  величинах  $\gamma_{kj}$  и  $\Phi_{jk}$  положение точки  $\mathbf{x}_N$  не будет зависеть от вида функции  $\Phi_{jk}$  (если она монотонна) и значения штрафов  $\gamma_{kj}$ .

VII. В заключение отметим, что из способа построения наилучшей линейной оценки (см. § 1.3) и определения решающего правила следует, что дискриминация математических моделей возможна с любой заданной наперед точностью (потери за счет принятия неверной модели могут быть сделаны сколь угодно малыми), если только для области  $X$ , где возможны измерения, и истинной

модели  $H_j$  найдется распределение затрат  $\xi_j(x)$  (см. § 1.10,  $\int_X d\xi(x) = 1$ ), удовлетворяющее требованию ( $k \neq j$ ):

$$\int_X \lambda(x) [\hat{\theta}_{j\text{ист}}^\top f_j(x) - \hat{\theta}_{k\text{ист}}^\top f_k(x)]^2 d\xi_j(x) > 0. \quad (6.2.33)$$

Величины  $\hat{\theta}_{k\text{ист}}$  определяются как

$$\hat{\theta}_{k\text{ист}} = M_k^{-1} Y_k,$$

где

$$M_k^{-1} = \int_X \lambda(x) f_k(x) f_k^\top(x) d\xi_j(x),$$

$$Y_k = \int_X \lambda(x) \eta_{j\text{ист}}(x) f_k(x) d\xi_j(x).$$

Неравенство (6.2.33) говорит о том, что мы можем в результате некоторого эксперимента убедиться в справедливости  $j$ -й модели, если только истинная поверхность отклика не аппроксимируется сколь угодно точно (в смысле метрики (6.2.33)) поверхностью

$$\hat{\eta}_k(x, \theta_k) = \hat{\theta}_{k\text{ист}}^\top f_k(x) \quad (k \neq j).$$

**Пример 1.** Пусть некоторый процесс может быть описан одной из двух моделей

$$\eta(x, \theta) = \begin{cases} \theta_{11} + \theta_{12} x + \theta_{13} x^2 + \theta_{14} x^3, \\ \theta_{21} + \theta_{22} x + \theta_{23} x^2, \end{cases}$$

где  $\theta_1$  и  $\theta_2$  — неизвестные параметры,  $\lambda(x) \equiv 1$ ,  $-1 \leq x \leq 1$ . Был проведен следующий моделированный эксперимент.

За истинную модель была выбрана первая модель ( $\eta_{\text{ист}}(x) = 1 + x + x^2 + 2x^3$ ). Результаты «наблюдений» предполагались распределенными по нормальному закону с дисперсией 0,04. «Эксперимент» проводился на основе стратегии, предложенной в разделе VI. Каждая  $N$ -я точка выбиралась согласно (6.2.25). «Затравочный» эксперимент состоял из четырех измерений, проведенных в точках  $x_1 = -1$ ,  $x_2 = -1/3$ ,  $x_3 = 1/3$ ,  $x_4 = 1$ . На рис. 28а представлены положения точек  $x_N$ . Из рисунка видно, что последовательный план при  $N \rightarrow \infty$  сходится к плану (имеется

в виду нормированный план)

$$\bar{\varepsilon} = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1, \quad x_2 = -\frac{1}{2}, \quad x_3 = \frac{1}{2}, \quad x_4 = 1 \\ p_1 = \frac{1}{6}, \quad p_2 = \frac{1}{3}, \quad p_3 = \frac{1}{3}, \quad p_4 = \frac{1}{6} \end{array} \right\}.$$

На рис. 286 представлены (нанесены кружками) значения нормированной разницы  $\Delta(N) = N^{-1} [S_2(N) - S_1(N)]$ . Нетрудно видеть, что при достаточно больших  $N$  разность  $S_2(N) - S_1(N)$  колеблется около величины  $0,25N$ . В то

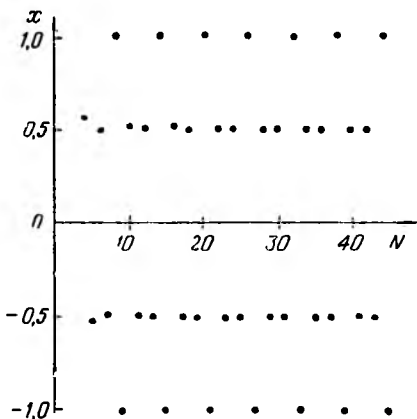


Рис. 28а. Положение оптимальных точек в зависимости от номера опыта (пример 1).

же время моделированный эксперимент для равномерного плана

$$\varepsilon = \left\{ \begin{array}{l} x_1 = -1, \quad x_2 = -\frac{1}{3}, \quad x_3 = \frac{1}{3}, \quad x_4 = 1 \\ p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = \frac{1}{4} \end{array} \right\};$$

эта разность колеблется около величины  $0,15N$ .

На рис. 286 точками нанесены значения нормированной разницы  $\Delta N = N^{-1} [S_2(N) - S_1(N)]$ , полученные при проведении «эксперимента» по последовательной стратегии, но при дисперсии  $0,0001$ . Указанная величина сходится к тому же пределу, что и в первом случае. Последовательный план при этом сходится также к плану  $\bar{\varepsilon}$ .

В работе [68] показано, что планы, строящиеся согласно стратегии 1 – 4 п. VI, сходятся к планам, максимизирующим величину (6.2.33).

Для предложенных моделей было проведено численное исследование того, как меняются предельные планы с изменением  $\theta_{\text{ист}}$ . Оказалось, что предельные планы

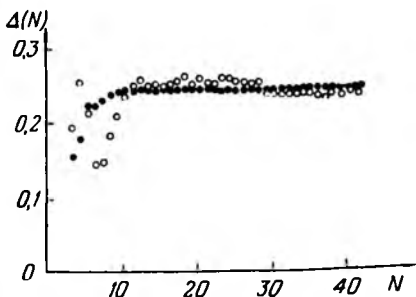


Рис. 28б. Значения  $\Delta N$  при  $\theta_{14} = 2$ .

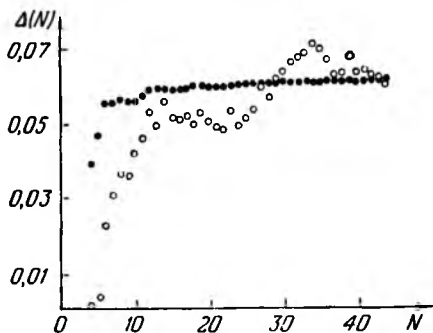


Рис. 28в. То же, что и на предыдущем рисунке, но при  $\theta_{14} = 1$ .

одни и те же для любых  $\theta_{\text{ист}}$ . В зависимости от  $\theta_{14}$  меняется лишь предел, к которому стремится величина  $N^{-1} [S_2(N) - S_1(N)]$ . Очевидно, что с уменьшением  $\theta_{14}$  она уменьшается. На рис. 28в нанесены значения этой величины при дисперсиях 0,04 (кружки) и 0,0001 (точки). Предельное значение равно 0,06.

Интересно отметить, что план  $\epsilon$  совпадает с планом, минимизирующим дисперсию оценки коэффициента при  $x^3$  для полиномиальной регрессии третьего порядка.

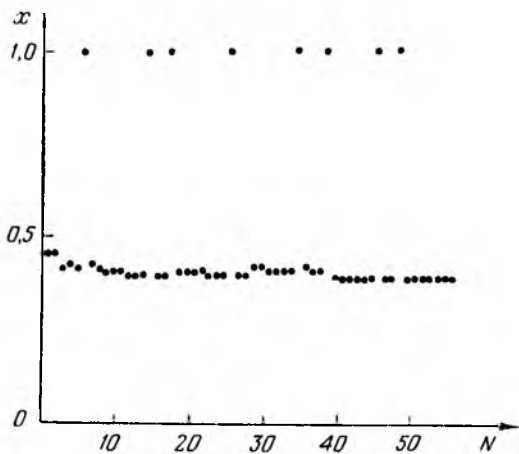


Рис. 29а. Положение оптимальных точек в зависимости от номера опыта (пример 2).

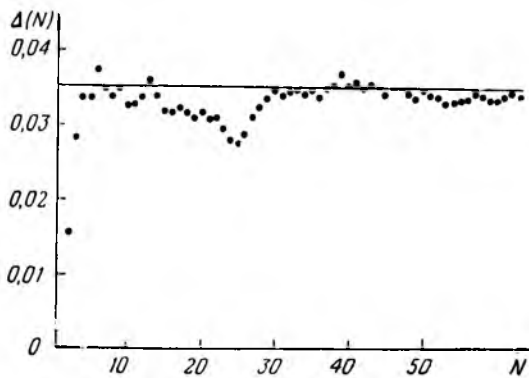


Рис. 29б.

**Пример 2.** Результаты данного параграфа можно применять и в случае нелинейной параметризации моделей. Для этого во всех формулах следует положить

$$f_{j\alpha} = \frac{\partial \eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)}{\partial \theta_{j\alpha}} \Big|_{\theta_j = \hat{\theta}_j} \quad (6.2.34)$$

Рассмотрим для примера две конкурирующих модели, одна из которых нелинейна по параметру:

$$\eta(\mathbf{x}, \theta) = \begin{cases} e^{\theta_1 x} - 1, \\ \theta_2 x^2 \end{cases} \quad \lambda(\mathbf{x}) \equiv 1, \quad 0 \leq x \leq 1.$$

Моделированный эксперимент проводился в предположении, что

$$\eta_{\text{ист}}(\mathbf{x}) = e^x - 1.$$

Результаты измерений предполагались распределенными по нормальному закону с дисперсией 0,01.

На рис. 29а представлены точки, в которых «проводились» измерения и положение которых определялось на основе стратегии 1—4 раздела VI с учетом (6.2.34). На рис. 29б представлена зависимость  $N^{-1}[S_2(N) - S_1(N)]$ . Ее предельное ( $N \rightarrow \infty$ ) значение — 0,35. Для равномерного плана ( $d\xi(\mathbf{x}) = \text{const} \cdot d\mathbf{x}$ ) это предельное значение равно 0,19.

### § 6.3. Метод отношения вероятностей

Выберем в качестве меры, оценивающей точность результатов дискриминирующего эксперимента, модуль логарифма обобщенного отношения правдоподобия, которое имеет вид

$$\frac{L_1(N)}{L_2(N)} = \frac{\int p_1(y_1/\eta_1(\mathbf{x}, \theta_1)) p_1(y_2/\eta_1(\mathbf{x}, \theta_1)) \dots p_1(y_n/\eta_1(\mathbf{x}, \theta_1)) d\theta_1}{\int p_2(y_1/\eta_2(\mathbf{x}, \theta_2)) p_2(y_2/\eta_2(\mathbf{x}, \theta_2)) \dots p_2(y_n/\eta_2(\mathbf{x}, \theta_2)) d\theta_2} \quad (6.3.1)$$

Так же, как и выше, мы будем предполагать, что  $\eta_j(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_j^T(\mathbf{x}) \theta_j$  ( $j=1, 2$ ). Обобщение на случай нелинейной параметризации проводится методом квазилинеаризации и может быть проделано читателем самостоятельно.

**Лемма 6.3.1.** В предположении нормальности условных распределений  $p_j(y/\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j))$  обобщенная функция

правдоподобия равна

$$L_j(N) = (2\pi)^{\frac{1}{2}(m_j - N)} \prod_{i=1}^N \omega_i^{1/2} |\mathbf{D}_j(N)|^{1/2} e^{-1/2 S_j(N)}, \quad (6.3.2)$$

где  $m_j$  — число неизвестных параметров при  $j$ -й гипотезе,

$$\omega_i = \sigma_i^{-2}, \quad S_j(N) = \sum_{i=1}^N \omega_i [y_i - \mathbf{f}_j^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta}_j(N)]^2, \quad \mathbf{D}_j(N) = \mathbf{M}_j^{-1}(N)$$

— дисперсионная матрица наилучших линейных оценок  $\hat{\theta}_j(N)$ .

Доказательство. Для краткости индекс  $j$  в доказательстве будет опускаться. Из определения  $L(N)$  следует:

$$L(N) = \int (2\pi)^{-1/2N} \prod_{i=1}^N \omega_i^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \omega_i [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta}(N)]^2} d\theta. \quad (6.3.3)$$

Как показано при доказательстве леммы 6.2.4,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \omega_i (y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \theta)^2 &= \\ &= \sum_{i=1}^N \omega_i [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta}(N)]^2 + \\ &+ (\hat{\theta}(N) - \theta)^T \mathbf{D}^{-1}(N) (\hat{\theta}(N) - \theta). \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

Подставив (6.3.4) в (6.3.3) и интегрируя по  $\theta$ , получим (6.3.2).

Из леммы 6.3.1 следует, что

$$\frac{L_1(N)}{L_2(N)} = (2\pi)^{\frac{1}{2}(m_1 - m_2)} \frac{|\mathbf{D}_1(N)|^{1/2}}{|\mathbf{D}_2(N)|^{1/2}} e^{\frac{1}{2} [S_2(N) - S_1(N)]} \quad (6.3.5)$$

Отметим, что обобщенное отношение правдоподобия не изменит своего значения, если результаты измерений  $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ir}$ , сгруппированных в одной точке, объединить и заменить  $r_i$  слагаемых, входящих в  $S_i(N)$ , на одно  $\omega_i [y_i - \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \hat{\theta}(N)]^2$ , где

$$y_i = r_i^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} y_{ir}, \quad \omega_i = r_i \sigma_{ir}^{-2} = r_i \lambda(\mathbf{x}_i).$$

По предположению,  $|\ln [L_1(N)/L_2(N)]|$  является мерой точности дискриминирующего эксперимента, поэтому экспериментатор должен стремиться разместить свои измерения в факторном пространстве так, чтобы добиться наибольшего роста  $|\ln [L_1(N)/L_2(N)]|$  как функции  $N$ .

Пусть было проведено  $N$  измерений и экспериментатор должен выбрать точку  $x_N$ , где прирост  $\Delta |\ln [L_1(N)/L_2(N)]|$  будет максимальным. Нетрудно видеть, что этот прирост зависит не только от значения координат точки, где будет проведено измерение, но и от результата измерения  $y$ . Поэтому, если верна  $j$ -я гипотеза, следует максимизировать среднее по  $y$  значению прироста [69]:

$$E_j \left[ \ln \frac{L_j(N+1)}{L_k(N+1)} - \ln \frac{L_j(N)}{L_k(N)} \right] \quad (j=1, 2; j \neq k). \quad (6.3.6)$$

Так как априори неизвестно, какая из гипотез верна, то необходимо (6.3.6) усреднить по вероятности  $P(H_j, N)$  каждой из гипотез  $H_j$  и максимизировать выражение

$$\gamma(x, N) = \sum_{j=1}^2 P(H_j, N) E_j \left[ \ln \frac{L_j(N+1)}{L_k(N+1)} - \ln \frac{L_j(N)}{L_k(N)} \right], \quad k \neq j. \quad (6.3.7)$$

**Теорема 6.3.1.** *Средний прирост логарифма отношения правдоподобия после проведения измерения в точке  $x$  в предположении верности  $j$ -й гипотезы равен*

$$E_j \left[ \ln \frac{L_j(N+1)}{L_k(N+1)} - \ln \frac{L_j(N)}{L_k(N)} \right] = \frac{1}{2} \ln \frac{s_k(x, N)}{s_j(x, N)} + \frac{1}{2} \frac{[\hat{\eta}_j(x, N) - \hat{\eta}_k(x, N)]^2 + d_j(x, N) - d_k(x, N)}{s_k(x, N)}. \quad (6.3.8)$$

*Доказательство.* Из (6.3.5):

$$\ln \frac{L_j(N+1)}{L_k(N+1)} - \ln \frac{L_j(N)}{L_k(N)} = \frac{1}{2} \frac{|\mathbf{D}_j(N+1)| \cdot |\mathbf{D}_k(N)|}{|\mathbf{D}_k(N+1)| \cdot |\mathbf{D}_j(N)|} + \frac{1}{2} [S_k(N+1) - S_j(N+1) - S_k(N) + S_j(N)]. \quad (6.3.9)$$

Первое слагаемое от  $y$  не зависит и равно (см. лемму 4.2.2)

$$\frac{1}{2} \ln \frac{|\mathbf{D}_j(N+1)| \cdot |\mathbf{D}_k(N)|}{|\mathbf{D}_j(N)| \cdot |\mathbf{D}_k(N+1)|} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \lambda(x) d_k(x, N)}{1 + \lambda(x) d_j(x, N)}. \quad (6.3.10)$$



Второе слагаемое согласно теореме 6.2.1 равно

$$\frac{[\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)]^2 + d_j(\mathbf{x}, N) - d_k(\mathbf{x}, N)}{s_k(\mathbf{x}, N)}. \quad (6.3.11)$$

Объединяя (6.3.9), (6.3.10) и (6.3.11), получим (6.3.8).

В тех случаях, когда в точке  $\mathbf{x}$  предусматривается проведение не одного, а  $r$  измерений, в формулу (6.3.8) вместо функции эффективности  $\lambda(\mathbf{x})$  должно входить произведение  $r\lambda(\mathbf{x})$  (ср. с пояснениями к (6.3.5)).

Опираясь на (6.3.7) и теорему 6.3.1, можно рекомендовать следующую стратегию последовательного планирования.

1. После  $N$ -го измерения подсчитываются величины  $\hat{\theta}(N)$ ,  $\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)$ ,  $d_j(\mathbf{x}, N)$ ,  $L_j(N)$  ( $j=1, 2$ ).

2. Отыскивается точка  $\mathbf{x}_N$ , соответствующая

$$\max_{\mathbf{x} \in X} \sum_{j=1}^2 P(H_j, N) E_j \left[ \ln \frac{L_j(N+1)}{L_k(N+1)} - \ln \frac{L_j(N)}{L_k(N)} \right]. \quad (6.3.12)$$

Заметим, что  $P(H_j, N) \sim L_j(N)$ .

3. В точке  $\mathbf{x}_N$  проводится измерение.

4. Затем операции 1—3 повторяются с заменой индекса  $N$  на  $N+1$  и т. д. до тех пор, пока не будут исчерпаны все средства (в этом случае принимается  $j$ -гипотеза, если  $L_j/L_k > 1$ ) или  $|\ln [L_1(N)/L_2(N)]|$  не пересечет заданной границы.

Очевидно, что процедуре 1—4 должен предшествовать «затравочный» эксперимент, проведенный по плану, невырожденному относительно регрессионных кривых.

Пусть число измерений, отведенных на эксперимент, не задано и выбор гипотезы производится по решающему правилу:

1) принимается гипотеза  $H_1$ , если

$$\ln [L_1(N)/L_2(N)] \geq A; \quad (6.3.13)$$

2) принимается гипотеза  $H_2$ , если

$$\ln [L_1(N)/L_2(N)] \leq B; \quad (6.3.14)$$

3) измерения продолжаются, если

$$B < \ln [L_1(N)/L_2(N)] < A. \quad (6.3.15)$$

Тогда предложенный метод планирования максимизирует вероятность окончания процесса дискриминации гипотез после  $(N + 1)$ -го измерения (при заданных  $\hat{\theta}_j(N)$ ,  $d_j(\mathbf{x}, N)$ ,  $L_j(N)$ ).

Если стоимость измерения  $c$  мала, то  $A$  и  $B$  рекомендуется выбрать равными соответственно  $\ln c^{-1}$  и  $\ln c$ .

При этом (см. [70]) решающее правило  $\delta_c$ , определяемое (6.3.13)—(6.3.15), будет асимптотически оптимальным для любого заданного плана эксперимента  $e$ , т. е.

$$\lim_{c \rightarrow 0} \frac{r(\delta_c)}{r(\delta^*)} = 1, \quad (6.3.16)$$

где  $r(\delta)$  — байесовский риск при решающем правиле  $\delta$ ,  $\delta^*$  — оптимальное решающее правило, минимизирующее байесовский риск.

В тех случаях, когда нецелесообразно (например, из экономических соображений) проводить обработку после каждого отдельного измерения, последовательную процедуру можно видоизменить, размещая в точках  $\mathbf{x}_N$  по нескольку измерений, заменяя при этом в (6.3.12)  $\lambda(\mathbf{x})$  на  $\Delta N \lambda(\mathbf{x})$ .

**Пример.** В результате обработки экспериментальных данных для некоторой величины (деполяризация  $D_{np}$  при нейтрон-протонном рассеянии при энергии 660 Мэв [56]) были предсказаны две возможных зависимости от  $x$ :  $\hat{\eta}_1(x)$  с коридором ошибок  $d_1^{1/2}(x)$  и  $\hat{\eta}_2(x)$  с коридором ошибок  $d_2^{1/2}(x)$ , причем  $S_1[0] \simeq S_2(0)$  и  $|D_1(0)| = |D_2(0)|$ . Кривые  $\hat{\eta}_1(x)$  и  $\hat{\eta}_2(x)$  представлены на рис. 30а, пунктирные линии соответствуют коридорам ошибок  $d_1^{1/2}(x)$  и  $d_2^{1/2}(x)$ . Физический смысл величины  $\eta(x)$  и техника ее измерения изложены в [55].

Там же вычислена эффективность опыта по измерению величины  $\eta(x)$ . Результаты представлены на рис. 30б.

Характерной особенностью экспериментов по рассеянию элементарных частиц является большее число отсчетов измерений в единицу времени (для данного эксперимента это число  $\sim 10^3 \text{ сек}^{-1}$ ). Поэтому вместо числа измерений  $N$  удобнее иметь дело со временем  $T$ , затрачиваемым на измерения, и функцию эффективности выражать в соответствующих единицах.

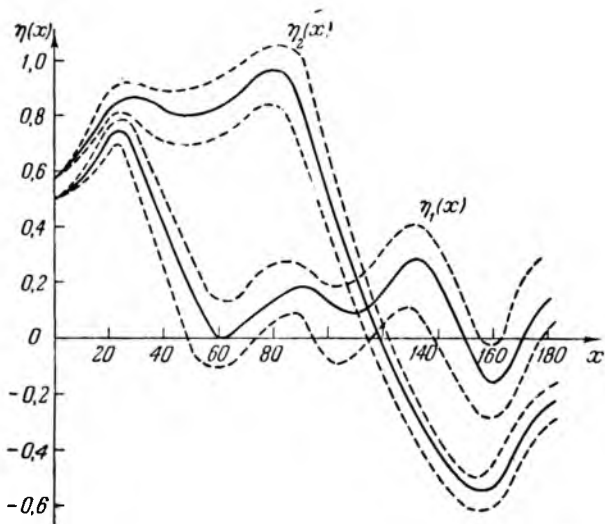


Рис. 30а. Предсказанные значения для величины  $D_{\text{пр}}(x) = \eta(x)$ .

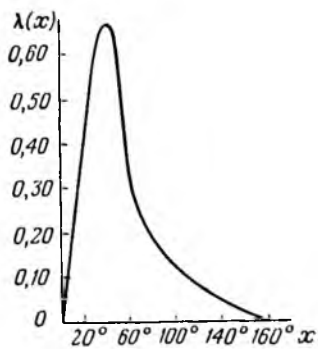


Рис. 30б. Эффективность опыта по измерению  $D_{\text{пр}}$ .

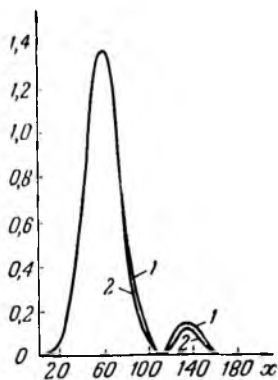


Рис. 30в. Зависимости  $E_1 \ln L_1/L_2$  (кривая 1) и  $E_2 \ln L_1/L_2$  (кривая 2) для  $T = 10$  час.

Если в анализ включить уже усредненные результаты

$$y_i = r_i^{-1} \sum_{r=1}^{r_i} y_{ir},$$

то при указанных условиях закон распределения  $y$  будет близок к нормальному и использование развитого в данном параграфе метода правомерным.

Пусть необходимо спланировать такой эксперимент по измерению величины, который бы позволил за заданное время наиболее эффективно (в смысле (6.3.1)) определить, какому из двух указанных выше множеств принадлежит истинная кривая.

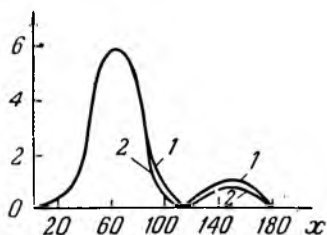


Рис. 30г. Зависимости  $E_1 \ln L_1/L_2$  (кривая 1) и  $E_2 \ln L_1/L_2$  (кривая 2) для  $T=100$  час.

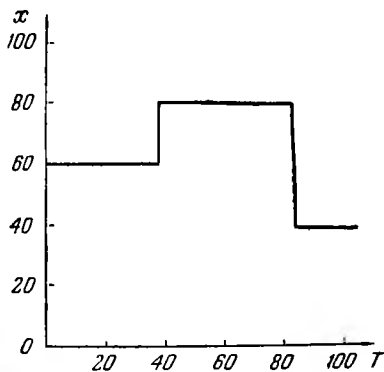


Рис. 30д. Оптимальное положение измерительного прибора как функция времени.

Предположим, что за время  $T$ , отведенное непосредственно на измерения, переставлять приборы, с помощью которых производится измерение величины  $\eta(x)$ , невыгодно (например, время перестановки и юстировки приборов одного порядка с  $T$ ). В этом случае планирование проводится по формуле (6.3.12) при  $w(x) = \lambda(x) T$ .

На рис. 30в и 30г представлены результаты планирования эксперимента по измерению  $\eta(x)$  при  $T=10$  час. и  $T=100$  час.

Было проведено также планирование, которое предполагало возможность перемещения измерительной аппаратуры, но исключало промежуточную обработку данных.

Так как величины  $d_1(x)$  и  $d_2(x)$  малы (см. рис. 30а), то, повторяя рассуждения раздела V § 6.2, можно сформулировать правило определения времени прекращения измерений в точке  $x_N$  и перехода к измерениям в точку

$x_{N+1}$  и т. д. Опираясь на (6.3.7), нетрудно видеть, что измерения в точке должны прекращаться, как только найдется такая точка  $x_{N+1}$ , что

$$\left. \frac{\partial \gamma(x_N, t)}{\partial t} \right|_{t=t_1} \leq \left. \frac{\partial \gamma(x_{N+1}, t)}{\partial t} \right|_{t=t_1} \quad (6.3.17)$$

Результаты, полученные на основании (6.3.17) для  $T=100$  час., представлены на рис. 30д. В результате эксперимента прирост величины  $\gamma(x, T)$  будет равен 7,2, т. е. в 1,2 раза больше (см. рис. 30г), чем в случае неподвижного прибора (это соответствует тому, что отношение вероятностей будет в  $\sim 3$  раза больше, чем для неподвижного прибора).

Для сравнения эффективности предложенного метода планирования с обычным интуитивным подходом равномерное размещение усилий во всей области, где измерения практически возможны по формуле (6.3.5) было подсчитано  $E \ln L_1/L_2$  для случая, когда измерения проводились в точках  $20^\circ, 40^\circ, \dots, 160^\circ$  в каждой в течение времени  $t_1 = 1,25$  часа  $\left( \sum_{i=1}^8 t_i = 10 \text{ час} \right)$ .

Расчеты показали, что в результате подобного измерения  $E \ln L_1/L_2 = 0,33$ . Это соответствует тому, что отношение вероятностей будет примерно в 2,7 раза меньше (см. рис. 30г), чем в результате эксперимента, спланированного по (6.3.12). Заметим, что значение  $E \ln L_1/L_2 = 0,33$  при размещении усилий согласно (6.3.12) достигается за 2,5 часа.

#### § 6.4. Дискриминация моделей на основе энтропийной меры информации

Понятие энтропии как меры упорядоченности системы применяется во многих областях науки. В физике эта мера является основой для разумной формулировки многих физических законов. Общеизвестно успешное использование энтропийной меры информации в теории связи.

Если система может находиться в  $\nu$  состояниях в каждом с вероятностью  $P_j$  ( $j=1, 2, \dots, \nu$ ), то энтропия

данной системы равна

$$I = - \sum_{j=1}^v P_j \ln P_j. \quad (6.4.1)$$

В физических приложениях энтропия есть мера неупорядоченности физической системы. Легко проверить, что энтропия максимальна при  $P_1 = P_2 = \dots = P_v = v^{-1}$ ,



Рис. 31а. Все четыре состояния системы равновероятны ( $I \simeq 1,38$ ).

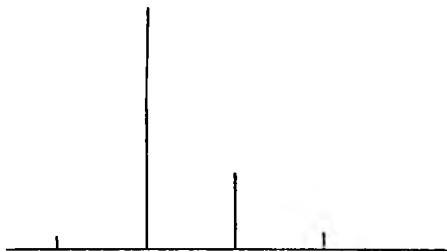


Рис. 31б. Доминирует второе состояние системы ( $I \simeq 0,51$ ).

т. е. когда все состояния равновероятны (нет упорядоченности). С ростом вероятности нахождения системы в одном (или нескольких) из состояний энтропия убывает. Иллюстрацией к этому могут служить значения энтропии, подсчитанные для различных распределений вероятности, представленных на рис. 31а и 31б.

Обратимся к задаче дискриминации гипотез. Пусть имеется система из  $v$  гипотез и априорная вероятность  $j$ -й гипотезы равна  $P(H_j, 0)$ .

Предположим, что проведен эксперимент  $\mathcal{E}$  и по его результатам вычислены апостериорные вероятности

$P(H_j, N)$  Рассмотрим величину

$$\Delta I(\mathcal{E}) = - \sum_{j=1}^v P(H_j, 0) \ln P(H_j, 0) + \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \ln P(H_j, N). \quad (6.4.2)$$

Очевидно, что  $\Delta I(\mathcal{E})$  можно трактовать как прирост информации о системе конкурирующих гипотез. В дальнейшем величину  $\Delta I(\mathcal{E})$  мы будем называть энтропийной мерой информации (или просто информацией), приобретенной в эксперименте  $\mathcal{E}$ .

Если точность эксперимента (и соответственно возможные потери) характеризуется энтропийной мерой информации, то естественно потребовать, чтобы план эксперимента  $\mathcal{E}$  был выбран так, чтобы прирост информации был максимален.

Вычислим прирост информации для случая экспериментов по поиску наилучшей математической модели.

Пусть измерения проведены в точках факторного пространства  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ , тогда по формуле Байеса получим

$$P(H_j, N) = \frac{P(H_j, 0) L_j(N)}{\sum_{k=1}^v P(H_k, 0) L_k(N)}, \quad (6.4.3)$$

где

$$L_j(N) = \int p_j(y_1/\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)) p_j(y_2/\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)) \dots \dots p_j(y_N/\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)) p(\theta_j, 0) d\theta_j, \quad (6.4.4)$$

$p(\theta_j, 0)$  — априорная плотность распределения для параметров  $\theta_j$ .

Из (6.4.2) и (6.4.3) следует, что прирост информации зависит не только от значения координат точек, где производятся измерения, но и от результатов измерений.

Поэтому в дальнейшем имеет смысл рассматривать среднее по результатам измерения значение  $\Delta I$ , которое мы обозначим через  $\Delta J(\mathcal{E})$ , и считать оптимальным тот план, который минимизирует средний прирост информации  $\Delta J(\mathcal{E})$ .

Рассмотрим планы, сосредоточенные в одной точке  $\mathbf{x}$ . Предположим, что результаты наблюдений независимые

и являются нормально распределенными случайными величинами и что после  $N$  измерений вероятность каждой из гипотез равна  $P(H_j, N)$  ( $j=1, 2, \dots, v$ ). По определению

$$\Delta J(\mathbf{x}, N) = \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \times \\ \times \int p_j(y/\mathbf{x}, N) \left\{ \sum_{k=1}^v P(H_k, N+1) \ln P(H_k, N+1) - \right. \\ \left. - \sum_{k=1}^v P(H_k, N) \ln P(H_k, N) \right\} dy, \quad (6.4.5)$$

где

$$P(H_j, N+1) = \frac{P(H_j, N) p_j(y/\mathbf{x}, N)}{\sum_{k=1}^v P(H_k, N) p_k(y/\mathbf{x}, N)} \quad (6.4.6)$$

и (см. (6.2.22))

$$p_k(y/\mathbf{x}, N) = (2\pi s_k(\mathbf{x}, N))^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} \frac{[y - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)]^2}{s_k(\mathbf{x}, N)}}.$$

После несложных преобразований (6.4.5) можно привести к виду

$$\Delta J(\mathbf{x}, N) = \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \times \\ \times \int p_j(y/\mathbf{x}, N) \ln \frac{p_j(y/\mathbf{x}, N)}{\sum_{k=1}^v P(H_k, N) p_k(y/\mathbf{x}, N)} dy. \quad (6.4.7)$$

В тех случаях, когда в точке  $\mathbf{x}$  проводится  $\Delta N$  измерений, формулы (6.4.5) — (6.4.7) сохраняют свой вид, если под  $y$  подразумевать среднее арифметическое от результатов наблюдений в указанной точке  $\Delta N^{-1} \sum_{r=1}^{\Delta N} y_r$

и положить

$$s(\mathbf{x}, N) = \lambda^{-1}(\mathbf{x}) \Delta N^{-1} + d(\mathbf{x}, N).$$

Обратим внимание на то, что выражение для вероятности  $j$ -й гипотезы после  $(N+1)$ -го измерения (6.4.6)



можно представить также в виде

$$P(H_j, N) = \frac{P(H_j, 0) L_j(N+1)}{\sum_{k=1}^v P(H_k, 0) L_k(N+1)}. \quad (6.4.8)$$

В идентичности выражений (6.4.6) и (6.4.8) можно убедиться непосредственными вычислениями, опираясь на явный вид функции  $p_k(y/x, N)$ .

Точное вычисление среднего прироста информации  $\Delta J(\mathbf{x}, N)$  представляет достаточно сложную задачу, так как несобственные интегралы, входящие во второе слагаемое правой части (6.4.7), не берутся в явном виде.

Возможны два пути: либо численное интегрирование необходимых выражений, либо замена точной формулы (6.4.7) на некоторое разумное в данной экспериментальной ситуации приближение.

Численное интегрирование несобственных интегралов является трудоемкой задачей и вряд ли удобно, а очень часто и невозможно для экспериментатора, тем более что, как будет видно из дальнейшего изложения, удастся построить приближение, удовлетворительное в большинстве реализуемых на практике случаев [71].

**Теорема 6.4.1.** *Средний прирост информации для плана, сосредоточенного в единственной точке факторного пространства  $\mathbf{x}$ , равен*

$$\Delta J(\mathbf{x}, N) = \frac{1}{2} D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)] \omega + O[\omega^{3/2}], \quad (6.4.9)$$

где  $\omega = \lambda(\mathbf{x}) \Delta N$  и

$$\begin{aligned} D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)] = & \\ = \sum_{j, k, l=1}^v P(H_j, N) P(H_k, N) P(H_l, N) [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - & \\ - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)] \cdot [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_l(\mathbf{x}, N)]. & \end{aligned}$$

**Доказательство.** Будем рассматривать произведение  $\lambda(\mathbf{x}) \Delta N$  как некоторую непрерывную переменную  $\omega$ . Легко проверить, что функция

$$\ln \Sigma(\omega) = \ln \sum_{k=1}^v P(H_k, N) \frac{p_k(y/x, N)}{p_j(y/x, N)}$$

непрерывна по  $\omega$  и все ее производные конечны в любой ограниченной области  $0 \leq \omega \leq \bar{\omega}$ .

Разложим  $\ln \Sigma(\omega)$  в ряд Тейлора в точке  $\omega=0$  и ограничимся его первыми тремя членами:

$$\ln \Sigma(\omega) = \\ = \ln \Sigma(0) + \frac{\dot{\Sigma}(0)}{\Sigma(0)} \omega + \frac{\ddot{\Sigma}(0) \Sigma(0) - \dot{\Sigma}^2(0)}{2 \Sigma^2(0)} \omega^2 + R(y, N), \quad (6.4.10)$$

где точка означает дифференцирование по  $\omega$ . Наша цель вычислить интеграл (6.4.7), опираясь на представление (6.4.10), и оценить при этом вклад остаточного члена

$$R(N) = \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \int \rho_j(y/\mathbf{x}, N) R(y, N) dy.$$

Дифференцируя  $\ln \Sigma(\omega)$ , получим при  $\omega=0$

$$\Sigma(0) = 1,$$

$$\dot{\Sigma}(0) = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^v P(H_k, N) [2y - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N) - \\ - \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)] \cdot [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)],$$

$$\ddot{\Sigma}(0) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^v P(H_k, N) [2y - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N) - \\ - \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)]^2 \cdot [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)]^2.$$

Отсюда путем несложных, но довольно длинных вычислений, нетрудно найти, что

$$\sum_{j=1}^v P(H_j, N) \int \rho_j(y/\mathbf{x}, N) [\ln \Sigma(0) + \\ + \frac{\dot{\Sigma}(0)}{\Sigma(0)} \omega + \frac{\ddot{\Sigma}(0) \Sigma(0) - \dot{\Sigma}^2(0)}{2 \Sigma^2(0)} \omega^2] dy = \\ = -\frac{\omega}{2} \sum_{j, k, l=1}^v P(H_j, N) P(H_k, N) P(H_l, N) \times \\ \times [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)] \cdot [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \hat{\eta}_l(\mathbf{x}, N)]. \quad (6.4.11)$$

Представляя остаточный член  $R(y, N)$  в форме

$$R(y, N) = \frac{\omega^{(n+1)}}{(n+1)!} \cdot \frac{d^{(n+1)}}{d\omega^{(n+1)}} \ln \Sigma(\xi\omega), \quad 0 \leq \xi \leq 1,$$

непосредственным интегрированием можно показать, что при  $\omega \rightarrow 0$

$$\int R(y, N) p_j(y/\mathbf{x}, N) dy = O(\omega^{q/2}). \quad (6.4.12)$$

При выводе (6.4.11) и (6.4.12) использовалось, что

$$\int p_j(y/\mathbf{x}, N) [y - \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)]^q dy = \begin{cases} 0, & \text{если } q \text{ — нечетное,} \\ (q-1)! s_j^{q/2}(\mathbf{x}, N), & \text{если} \\ & q \text{ — четное.} \end{cases} \quad (6.4.13)$$

Из (6.4.7), (6.4.11) и (6.4.12) непосредственно следует (6.4.9).

Более подробное исследование по сравнению с (6.4.12) остаточного члена показывает, что

$$\frac{1}{2} D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)] \omega \gg R(N)$$

при выполнении условий

$$\omega^{-1} \gg d_j(\mathbf{x}, N) \quad (j = 1, 2, \dots, v) \quad (6.4.14)$$

и

$$\omega^{-1} \gg D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]. \quad (6.4.15)$$

Неравенство (6.4.14) обычно имеет место при достаточно больших  $N$ , так как (ср. с § 6.2)

$$\max_{\mathbf{x} \in X} d_j(\mathbf{x}, N) = O\left\{\frac{m_j}{N\lambda(\mathbf{x})}\right\}.$$

Выполнение неравенства (6.4.15) необходимо проверять специально для каждого набора функций  $\eta_j(\mathbf{x})$  ( $j = 1, 2, \dots, v$ ).

Величина  $D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]$  имеет наглядный физический смысл. Действительно, приведенное в теореме 6.4.1 выражение для  $D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]$  можно переписать в виде

$$D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)] = \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \{\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - E[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]\}^2, \quad (6.4.16)$$

где

$$E[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)] = \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N).$$

Если величину  $E[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]$  трактовать как среднее значение оценок поверхности отклика  $\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)$  в точке  $\mathbf{x}$ , то  $D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]$  можно трактовать как дисперсию этих поверхностей в указанной точке.

Таким образом, средний прирост информации при выполнении (6.4.14) и (6.4.15) пропорционален разбросу (дисперсии) поверхности отклика.

Любопытно отметить, что при последовательном уточнении неизвестных параметров уменьшение определителя дисперсионной матрицы оценок параметров пропорционально дисперсии  $d(\mathbf{x}, N)$ . Ниже будет показано (см. гл. 7), что это совпадение не случайно и имеет глубокий смысл.

Опираясь на теорему 6.4.1, можно осуществлять последовательное планирование экспериментов по процедурам, аналогичным предложенным в §§ 6.2 и 6.3. Для этого каждое последующее измерение необходимо размещать там, где достигается

$$\max_{\mathbf{x} \in X} D[\hat{\eta}(\mathbf{x}, N)]. \quad (6.4.17)$$

**Пример.** Рассмотрим четыре конкурирующих модели:

$$\begin{aligned} \eta_1(\mathbf{x}, \theta) &= \exp[-x_1 \cdot \exp(\theta_1 - \theta_2 x_2)], \\ \eta_2(\mathbf{x}, \theta) &= [1 + x_1 \cdot \exp(\theta_1 - \theta_2 x_2)]^{-1}, \\ \eta_3(\mathbf{x}, \theta) &= [1 + 2x_1 \cdot \exp(\theta_1 - \theta_2 x_2)]^{-\frac{1}{2}}, \\ \eta_4(\mathbf{x}, \theta) &= [1 + 3x_1 \cdot \exp(\theta_1 - \theta_2 x_2)]^{-\frac{1}{3}}. \end{aligned}$$

Вид моделей и сопутствующие им числовые данные заимствованы из [72].

Область возможных измерений определяется неравенствами

$$0 \leq x_1 \leq 150, \quad x_2 = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{525}\right), \quad 450 \leq T \leq 600.$$

Для этих моделей по последовательному плану, определяемому (6.4.17), был проведен моделированный экспери-

мент. За истинную модель была принята вторая модель при  $\theta_1 = -3,53$  и  $\theta_2 = 5000$ . Ошибка измерений предполагалась равной  $\sigma = 0,05$ .

Так как параметризация — нелинейная, то после каждого измерения оценки  $\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, \theta)$  и их дисперсии  $d_j(\mathbf{x}, N)$  отыскивались и непосредственно подставлялись в (6.4.10). Уже после шести измерений результаты с большой достоверностью говорят о том, что вторая модель является истинной (подробнее см. табл. 9).

Таблица 9

$N$	$x_1$	$T$	$y$	$P(H_1, N)$	$P(H_2, N)$	$P(H_3, N)$	$P(H_4, N)$
1	25	575	0,396	} Затравочный эксперимент			
2	25	475	0,723				
3	125	475	0,422				
4	125	575	0,130	0,001	0,390	0,612	0,002
5	4,24	600	0,705	$0,26 \cdot 10^{-3}$	0,51	0,487	$0,28 \cdot 10^{-2}$
6	67,6	600	0,143	$1,0 \cdot 10^{-5}$	0,875	0,125	$\sim 10^{-5}$
7	76,4	600	0,073	$\sim 10^{-5}$	0,997	0,003	$\sim 10^{-8}$
8	76,3	600	0,118	$\sim 10^{-6}$	0,9996	$0,4 \cdot 10^{-3}$	$\sim 10^{-11}$
9	9,24	573	0,595	$\sim 10^{-10}$	0,9999	$0,78 \cdot 10^{-4}$	$\sim 10^{-13}$
10	150	450	0,487	$\sim 10^{-10}$	0,9999	$0,45 \cdot 10^{-4}$	$\sim 10^{-14}$

## ГЛАВА 7

### ОБОБЩЕННЫЕ КРИТЕРИИ ОПТИМАЛЬНОСТИ

#### 7.1. Эксперименты, минимизирующие обобщенные потери

I. Методы, обсуждавшиеся в предыдущих главах, применимы в случаях либо когда оцениваются неизвестные параметры, либо когда производится дискриминация моделей.

Соответствующие планы экспериментов позволяют эффективно извлекать информацию либо только о неизвестных параметрах, либо только об исследуемых моделях. Чередование различных планов согласно схеме, рассмотренной во введении, производится экспериментатором из полуинтуитивных соображений и опирается, в основном, на теоретические положения данного раздела науки и результаты аналогичных исследований.

Если вид исследуемых зависимостей не сложен и имеется возможность наглядного истолкования результатов, подобная практика обычно приводит к хорошим результатам.

При усложнении вида конкурирующих моделей или теоретического истолкования результатов экспериментатор может оказаться в положении, когда его интуиция будет бессильна.

В этом случае естественно обратиться к таким критериям оптимальности экспериментов, которые позволили бы объединить проблемы поиска истинной модели и определения оценок неизвестных параметров.

Имеется два возможных пути создания таких критериев. Первый — это обращение к критериям, опирающимся на меру, являющуюся композицией используемых

ранее мер потерь при дискриминирующих экспериментах (см. гл. 6) и потерь при определении или уточнении неизвестных оценок параметров (см. гл. 1). Второй — обращение к новой мере точности (которая в свою очередь определяет потери) результатов эксперимента, одновременно учитывающей сведения и по дискриминации моделей, и по определению оценок искомых параметров.

II. Обратимся к первому типу обращенных критериев. Второй будет рассмотрен в следующем параграфе.

Пусть потери в случае неправильного решения характеризуются величиной

$$\mathcal{R} = W_1 D + W_2 \mathcal{L}, \quad (7.1.1)$$

где  $W_1$  и  $W_2$  — некоторые весовые множители,  $D$  — потери в случае неправильного решения при дискриминации моделей и  $\mathcal{L}$  — потери за счет недостаточно точного определения оценок неизвестных параметров.

Представление потерь  $\mathcal{R}$  в виде (7.1.1) является компромиссом между двумя чаще всего противоречивыми требованиями. А именно:  $\mathcal{R}$  как функция  $D$  и  $\mathcal{L}$  должна иметь простой вид и должна достаточно хорошо описывать реальные ситуации.

В качестве мер  $D$  и  $\mathcal{L}$  в зависимости от нужд экспериментатора могут быть взяты любые меры точности, рассмотренные в предыдущих главах.

Весовые множители должны в процессе измерений, вообще говоря, изменяться. Действительно, если полученные результаты говорят о том, что вероятность одной из моделей близка к единице, то соотношение весовых множителей должно быть таково, чтобы

$$W_1 D \ll W_2 \mathcal{L}. \quad (7.1.2)$$

Если же из полученных результатов следует, что вероятности всех (или части) моделей близки к друг другу, то должно иметь место обратное неравенство:

$$W_1 D \gg W_2 \mathcal{L}. \quad (7.1.3)$$

В качестве одной из возможных реализаций (7.1.1) можно, например, выбрать функцию, определяемую весовыми множителями [72]:

$$W_1 = \left\{ \frac{v |1 - P(N)|}{v - 1} \right\}^\lambda, \quad (7.1.4)$$

$$W_2 = 1 - W_1,$$

где  $P(N) = \max_i P(H_j, N)$ ,  $P(H_j, N)$  — вероятность  $j$ -й гипотезы после  $N$  измерений ( $j=1, 2, \dots, v$ ),  $\lambda$  — константа, заключенная между 0 и  $\infty$ .

Весовые множители (7.1.4) обладают указанными выше свойствами. Когда ни одной из гипотез нельзя отдать предпочтение, т. е.  $P(H_j, N) = v^{-1}$ ,  $W_1$  равно единице и  $W_2$  — нулю, и задача сводится к задаче дискриминации гипотез. С другой стороны, когда одна из гипотез заведомо верна ( $P(H_j, N) = 1$ ), задача сводится к задаче по поиску оценок параметров.

Для промежуточных случаев  $W$  монотонно убывает при росте  $P(N)$ , как показано на рис. 32. Скорость убывания определяется значением  $\lambda$ , которое выбирается экспериментатором. Для любого фиксированного значения  $P(N)$  весовая функция  $W_1$  уменьшается с ростом  $\lambda$ . Поэтому, увеличивая  $\lambda$ , можно уменьшить роль проблемы дискриминации моделей и увеличить роль проблемы поиска оценок параметров.

Последовательная процедура планирования экспериментов аналогична по своей природе последовательным процедурам, исследованным в главах 4 и 6, будет заключаться в следующем.

На каждом  $N$ -м этапе отыскивается точка  $x_N$ , соответствующая максимальному среднему уменьшению величины

$$\max_{x \in X} [\mathcal{R}(N) - \mathcal{R}(N+1)].$$

Последующее измерение (или группа измерений) должно размещаться в точке  $x_N$ . Затем производится обработка данных и все операции повторяются вновь и т. д.

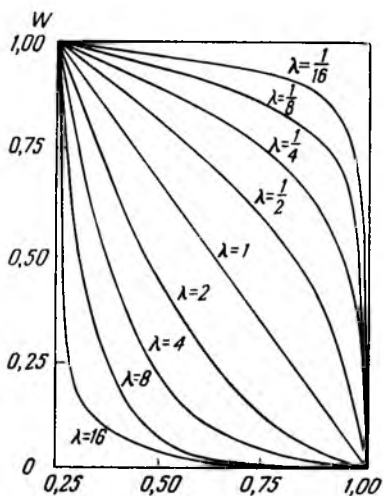


Рис. 32. Поведение весовой функции при различных  $\lambda$  [72].



Выбор весовых множителей (7.1.4) предусматривает, чтобы потери  $D$  и  $\mathcal{L}$  были выражены в одних и тех же единицах (например, денежных).

## § 7.2. Информационный подход к общей проблеме поиска истинной математической модели

1. Развитые выше методы планирования экспериментов существенно опираются на возможность описания результатов через оценки неизвестных параметров  $\hat{\theta}$  и их дисперсионную матрицу  $D(\hat{\theta})$ .

Преимущества подобного описания результатов эксперимента были изложены в гл. 1. К сожалению, при нелинейной параметризации представление результатов в терминах  $\hat{\theta}$

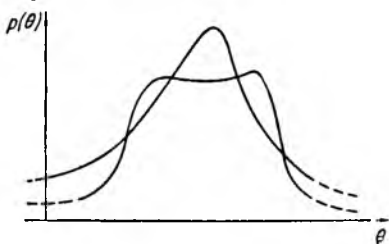


Рис. 33. Апостериорные функции плотности распределения для различных экспериментов.

и  $D(\hat{\theta})$  не всегда возможно. Обычно это происходит, когда число измерений невелико (объем выборки  $y$  мал и неравенство (1.4.8) не выполняется) или когда сумма взвешенных квадратичных отклонений  $\sum_{i=1}^n w_i [y_i - \eta(x_i, \hat{\theta})]^2$

имеет несколько близких по своим значениям локальных минимумов (см. пояснения к (1.4.3)).

В этих случаях для описания результатов естественно обратиться к апостериорной функции распределения в пространстве параметров  $p(\theta, N)$ . Для ее построения необходимо полностью знать условную плотность распределения результатов измерений  $p(y/\eta(x, \theta))$ . Напомним, что для построения наилучшей линейной оценки достаточно знать лишь первый и второй моменты функции  $p(y/\eta(x, \theta))$ . Таким образом, описание результатов эксперимента с помощью  $p(\theta, N)$  требует большей априорной информации, нежели описание этих же результатов с помощью аппарата наилучших линейных оценок.

Так как  $p(\theta, N)$  в общем случае есть поверхность в многомерном пространстве, то сравнение результатов различных экспериментов непосредственно по виду  $p(\theta, N)$

сильно затруднено с наглядной точки зрения. Но даже в тех случаях, когда поверхность  $p(\theta, N)$  определена в пространстве малой размерности, приходится сталкиваться с ситуациями, где трудно отдать предпочтение тому или другому эксперименту, опираясь на вид  $p(\theta, N)$ . Один из таких случаев представлен на рис. 33. Поэтому так же как и ранее при сравнении результатов экспериментов каждой матрице  $\mathbf{D}(\hat{\theta})$  ставилась в соответствие некоторая скалярная величина, так и теперь каждой поверхности  $p(\theta, N)$  необходимо сопоставить скалярную величину. Очевидно, что указанная величина должна удовлетворять ряду естественных требований, например, расти с увеличением объема экспериментальных данных.

Пусть проведен эксперимент  $\mathcal{E}$  с результатами наблюдений  $\mathbf{y}^T = \|y_1, y_2, \dots, y_N\|$ . Выберем в качестве меры приобретенных знаний о параметрах  $\theta$  величину

$$\Delta I[\mathcal{E}, p(\theta, 0)] = \int p(\theta, N) \ln p(\theta, N) d\theta - \int p(\theta, 0) \ln p(\theta, 0) d\theta, \quad (7.2.1)$$

где  $p(\theta, N)$  — апостериорная плотность распределения параметров.

В тех случаях, когда имеется несколько математических моделей изучаемого процесса и нас интересует как выбор наилучшей из них, так и уточнение неизвестных параметров, вместо (7.2.1) следует рассматривать величину

$$\Delta I[\mathcal{E}, p(\theta_j, 0)] = \sum_{j=1}^v \int p(\theta_j, N) \ln p(\theta_j, N) d\theta_j - \sum_{j=1}^v \int p(\theta_j, 0) \ln p(\theta_j, 0) d\theta_j, \quad (7.2.2)$$

где  $p(\theta_j, 0)$  — априорная плотность вероятности для  $\theta_j$ ,

$$\sum_{j=1}^v \int p(\theta_j, 0) d\theta_j = 1.$$

Величина  $\Delta I[\mathcal{E}, p(\theta_j, 0)]$  называется мерой количества информации (или просто информацией), приобретенной в эксперименте. Рассматриваемая величина имеет много общего с величиной (6.4.3). Ряд доводов о целесообразности введения информации в качестве меры точности экспериментов рассматриваемого типа можно найти в [63], [73], [74].

Из (7.2.1) и (7.2.2) следует, что информация, приобретенная в эксперименте  $\mathcal{E}$ , зависит не только от плана эксперимента, но и от результатов этого эксперимента. Поэтому при планировании мы будем опираться на среднее от этой величины:

$$\Delta J [\mathcal{E}(N), p(\theta_j, 0)] = \int p(y, 0) \Delta I [\mathcal{E}, p(\theta_j, 0)] dy, \quad (7.2.3)$$

где

$$p(y, 0) = \sum_{j=1}^v \int p(y/\theta_j) p(\theta_j, 0) d\theta_j.$$

Нетрудно проверить, что среднее количество информации можно также представить в виде

$$\begin{aligned} \Delta J [\mathcal{E}(N), p(\theta_j, 0)] &= \\ &= \sum_{j=1}^v \int p(y/\theta_j) p(\theta_j, 0) \ln \frac{p(y/\theta_j)}{p(y, 0)} dy d\theta_j. \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

Напомним, что  $\mathcal{E}(N)$  — план эксперимента  $\mathcal{E}$ , состоящего из  $N$  измерений. Среднее значение информации, приобретенной в эксперименте  $\mathcal{E}$ , всегда неотрицательно (см., например, [74]). Заметим, что информация  $\Delta I [\mathcal{E}, p(\theta_j, 0)]$  может быть любого знака.

II. Ниже мы будем рассматривать такие эксперименты, наблюдения в которых независимы и распределены по нормальному закону. Наша цель — построение планов  $\mathcal{E}^*(N)$ , максимизирующих среднюю информацию:

$$\Delta J [\mathcal{E}^*(N), p(\theta_j, 0)] = \max_{\mathcal{E}(N)} J [\mathcal{E}(N), p(\theta_j, 0)].$$

Рассмотрим одноточечные планы. Пусть после  $N$  измерений проводится эксперимент, в котором все  $\Delta N$  измерений сосредоточены в одной точке  $x$ . Тогда

$$\begin{aligned} \Delta J [x, p(\theta_j, N)] &= \Delta J [\mathcal{E}(\Delta N), p(\theta_j, N)] = \\ &= \sum_{j=1}^v \int p(y/\eta_j(x, \theta_j)) p(\theta_j, N) \ln \frac{p(y/\eta_j(x, \theta_j))}{p(y, N)} dy d\theta_j. \end{aligned} \quad (7.2.5)$$

Здесь  $p(\theta_j, N)$  — плотность вероятности для  $\theta_j$  после  $N$  измерений. В (7.2.5) учитывалось, что для рассматриваемого типа экспериментов

$$p(y/\theta_j) = p(y/\eta_j(x, \theta_j)). \quad (7.2.6)$$

В соответствии с (7.2.6)

$$p(y, N) = \int p(y/\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)) p(\theta_j, N) d\theta_j. \quad (7.2.7)$$

Нетрудно проверить, что (7.2.5) и (7.2.7) можно переписать в виде  $(\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j))$  предполагается дифференцируемой по  $\theta_j$ ,  $j=1, \dots, v$ ):

$$\begin{aligned} \Delta J[\mathbf{x}, p(\theta_j, N)] &= \Delta J[\mathbf{x}, p(\eta_x, N)] = \\ &= \sum_{j=1}^v \int p(y/\eta_x) p(\eta_x, N) \ln \frac{p(y/\eta_x)}{p(y, N)} dy d\eta_x \end{aligned} \quad (7.2.8)$$

и

$$p(y, N) = \int p(y/\eta_x) p(\eta_x, N) d\eta_x. \quad (7.2.9)$$

Здесь случайная величина  $\eta_x$  определяется как  $\eta_x = \eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)$ .

**Теорема 7.2.1.** *Средний прирост информации для плана, сосредоточенного в единственной точке  $\mathbf{x}$ , равен*

$$\Delta J[\mathbf{x}, p(\theta_j, N)] = \frac{1}{2} D[\eta_x, N] \omega + O[\omega^{3/2}], \quad (7.2.10)$$

где

$$\omega = \lambda(\mathbf{x}) \Delta N$$

и

$$D[\eta_x, N] = E[\eta_x - E[\eta_x]]^2. \quad (7.2.11)$$

**Доказательство.** Подставляя в (7.2.8) явное выражение для  $p(y/\eta_x)$ , получим

$$\begin{aligned} \Delta J[\mathcal{G}(\Delta N), p(\theta_j, N)] &= \\ &= \int p(y/\eta_x) p(\eta_x, N) \ln \frac{e^{1/2(2y\eta_x - \eta_x^2)} \omega}{\int e^{1/2(2y\eta_x - \eta_x^2)} \omega d\eta_x} dy d\eta_x. \end{aligned} \quad (7.2.12)$$

Разлагая логарифм, входящий в (7.2.12), в ряд по  $\omega = \lambda(\mathbf{x}) \Delta N$  и сохраняя члены до второй производной включительно, в полной аналогии с доказательством теоремы 6.3.1 получим (7.2.10). Величину  $D[\eta_x, N]$  можно трактовать как дисперсию случайной величины  $\eta_x$ .

Отметим, что при выводе (7.2.11) конкретный вид функции  $p(\eta_x, N)$  не используется. Поэтому результаты теоремы 7.2.1 применимы при произвольной параметри-

зации поверхностей отклика  $\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j)$ . При этом основная трудность при подсчете  $D[\eta_x, N]$  заключается в построении функции  $p(\eta_x, N)$ . Если она известна, то дальнейшие вычисления не представляют трудностей.

Ниже будут рассмотрены два случая, к которым могут быть сведены большинство практических задач и при которых плотность вероятности  $p(\eta_x, N)$  может быть найдена.

III. Пусть имеется  $j$  моделей, причем

$$\eta_j(\mathbf{x}, \theta_j) = \theta_j^T \mathbf{f}_j(\mathbf{x}), \quad (7.2.13)$$

и пусть было проведено  $N$  измерений. Тогда в предположении равномерности любого из значений  $\theta_j$  имеем:

$$\begin{aligned} p(\theta_j, N) &= \frac{\prod_{i=1}^N p(y_i / \eta_j(x_i, \theta_j))}{\sum_{j=1}^v \prod_{i=1}^N p(y_i / \eta_j(x_i, \theta_j))} \sim \\ &\sim e^{-\frac{1}{2} S_j(N) - \frac{1}{2} (\hat{\theta}_j - \theta_j)^T \mathbf{D}_j^{-1}(N) (\hat{\theta}_j - \theta_j)}. \end{aligned} \quad (7.2.14)$$

Напомним, что

$$S_j(N) = \sum_{i=1}^n \omega_j [y_i - \eta_j(\mathbf{x}_i, \theta_j(N))]^2,$$

$\hat{\theta}_j$  — наилучшие линейные оценки после  $N$  измерений, построенные в предположении верности  $j$ -й модели, и  $\mathbf{D}_j(N)$  — их дисперсионная матрица.

Используя условие нормировки

$$\sum_{j=1}^v \int p(\theta_j, N) d\theta_j = 1,$$

перепишем (7.2.14) в виде

$$p(\theta_j, N) = P(H_j, N) p_j(\theta_j, N), \quad (7.2.15)$$

где

$$P(H_j, N) = \frac{(2\pi)^{\frac{m_k}{2}} |\mathbf{D}_j(N)| e^{-1/2 S_j}}{\sum_{k=1}^v (2\pi)^{\frac{m_k}{2}} |\mathbf{D}_k(N)| e^{-1/2 S_k(N)}} \quad (7.2.16)$$

и

$$p_j(\theta_j, N) =$$

$$= (2\pi)^{-m_j/2} |\mathbf{D}_j(N)|^{-1/2} e^{-1/2(\hat{\theta}_j(N) - \theta_j)^T \mathbf{D}_j^{-1}(N) (\hat{\theta}_j(N) - \theta_j)}.$$

Весовой множитель  $P(H_j, N)$  есть не что иное, как вероятность  $j$ -й модели (ср. с § 6.4). Учитывая, что  $\eta_x$  линейно связана с  $\theta_j$  (см. (7.2.13)), легко убедиться, что

$$p(\eta_x) = \sum_{j=1}^v P(H_j, N) (2\pi d_j(\mathbf{x}, N))^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} \frac{[\eta_x - \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)]^2}{d_j(\mathbf{x}, N)}}, \quad (7.2.17)$$

где

$$\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) = \mathbf{f}_j^T(\mathbf{x}) \hat{\theta}_j(N) \quad \text{и} \quad d_j(\mathbf{x}, N) = \mathbf{f}_j^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}_j(N) \mathbf{f}_j(\mathbf{x}).$$

Вычислим, опираясь на (7.2.17), значение  $D[\eta_x, N]$ . Из определения среднего

$$\begin{aligned} E[\eta_x] &= \int \eta_x p(\eta_x) d\eta_x = \\ &= \sum_{j=1}^v P(H_j, N) (2\pi d_j(\mathbf{x}, N))^{1/2} \int \eta_x e^{-\frac{1}{2} \frac{[\eta_x - \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)]^2}{d_j(\mathbf{x}, N)}} d\eta_x = \\ &= \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N). \end{aligned}$$

Подставляя полученное выражение в (7.2.11), получим:

$$\begin{aligned} D[\eta_x, N] &= \sum_{j=1}^v P(H_j, N) (2\pi d_j(\mathbf{x}, N))^{-1/2} \times \\ &\times \int \left[ \eta_x - \sum_{k=1}^v P(H_k, N) \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N) \right]^2 e^{-\frac{1}{2} \frac{[\hat{\eta}_x - \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N)]^2}{d_j(\mathbf{x}, N)}} d\eta_x = \\ &= \sum_{j=1}^v P(H_j, N) d_j(\mathbf{x}, N) + \sum_{j=1}^v P(H_j, N) [\hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \\ &\quad - \sum_{k=1}^v P(H_k, N) \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N)]^2. \end{aligned}$$

Проведя подробное исследование остаточного члена в (7.2.10) путем несложных, но громоздких вычислений,

можно показать, что этот член мал по сравнению с  $\frac{1}{2} D[\eta_x, N] \omega$  при  $\omega^{-1} \ll d_j(x, N)$  и

$$\omega^{-1} \ll \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \left[ \hat{\eta}_j(x, N) - \sum_{k=1}^v P(H_k, N) \hat{\eta}_k(x, N) \right]^2.$$

Таким образом, если справедливы приведенные выше неравенства, то (см. [71])

$$\Delta J[\mathcal{G}(\Delta N), \rho(\theta_j, N)] \simeq \frac{1}{2} D[\eta_x, N] \omega. \quad (7.2.18)$$

Из (7.2.18) следует, что наиболее информативными являются измерения, проводимые там, где обобщенная дисперсия  $D[\eta_x, N]$  имеет наибольшее значение (ср. с гл. 3).

Обобщенная дисперсия тем больше, чем мы хуже знаем каждую из поверхностей отклика и чем больше между ними расстояние в смысле метрики

$$\sum_{i=1}^v P(H_i, N) \left[ \hat{\eta}_i(x, N) - \sum_{k=1}^v P(H_k, N) \hat{\eta}_k(x, N) \right]^2.$$

Выше предполагалось, что априори все значения  $\theta_j$  равновероятны. Данный выбор до некоторой степени традиционен (см. [58]), но в данном случае он имеет существенный недостаток. Если для каждой модели параметры  $\theta_j$  несут различную смысловую (с физической, химической или какой-либо иной точки зрения) нагрузку, то изменение масштаба по одному из параметров  $\theta_{aj}$ , входящему в  $k$ -ю модель, приведет к изменению вероятностей  $P(H_j, N)$ , что явно нецелесообразно. Поэтому предположение об априорной равновероятности значений  $\theta_j$  имеет смысл, когда  $\theta_j$  во всех моделях несут одну и ту же смысловую нагрузку (см. пример).

В иных случаях рекомендуется проводить более тщательный анализ априорной ситуации, с тем чтобы представить имеющиеся сведения (точнее, априорную плотность вероятности) в виде

$$\rho(\theta_j, 0) = P(H_j, 0) \cdot p_j(\theta_j, 0).$$

Наиболее простые результаты удастся получить, когда функция  $p_j(\theta_j, 0)$  близка к сильно размытому нормальному закону (ср. с § 6.2). В этом случае апостериор-

ная плотность вероятности имеет вид

$$p(\theta_j, N) = P(H_j, N) p_j(\theta_j, N),$$

где

$$P(H_j, N) \simeq \frac{P(H_j, 0) |\mathbf{D}_j(N)|^{1/2} |\mathbf{D}_j(0)|^{-1/2} e^{-1/2 S_j(N)}}{\sum_{k=1}^n P(H_k, 0) |\mathbf{D}_k(N)|^{1/2} |\mathbf{D}_k(0)|^{-1/2} e^{-1/2 S_k(N)}}.$$

и

$$p_j(\theta_j, N) \simeq (2\pi)^{-m_j/2} |\mathbf{D}_j(N)|^{-1/2} e^{-1/2 (\hat{\theta}_j(N) - \theta_j)^T \mathbf{D}_j^{-1}(N) (\hat{\theta}_j(N) - \theta_j)}.$$

Заметим, что теперь вероятности  $P(H_j, N)$  инвариантны относительно линейных преобразований параметров  $\theta_j$ .

Полученные в данном разделе результаты обобщаются на случай нелинейной параметризации, если для каждой из моделей выполняются условия § 1.4. При этом во всех формулах следует заменить  $f_{j\alpha}(\mathbf{x})$  на

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{j\alpha}} \eta(\mathbf{x}, \theta_j) \Big|_{\theta_j = \hat{\theta}_j}.$$

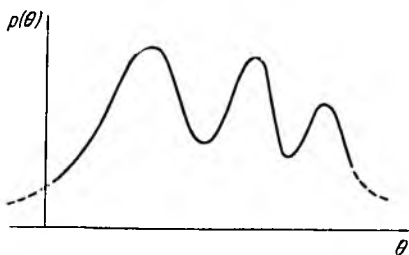


Рис. 34. Пример многоэкстремальной апостериорной функции плотности распределения.

IV. Пусть параметризация поверхности отклика  $\eta(\mathbf{x}, \theta)$  такова, что на некотором этапе эксперимента функция  $p(\theta, N)$  имеет несколько локальных максимумов (рис. 34), сравниваемых друг с другом по высоте (это эквивалентно тому, что уравнение (1.4.4) обладает несколькими корнями). С подобными случаями приходится иметь дело, например, при обработке экспериментальных данных в опытах по рассеянию элементарных частиц [75].

Одним из реально возможных путей [76], [77] решения рассматриваемой задачи является замена функции  $p(\theta, N)$ , функцией  $\tilde{p}(\theta, N)$ , которая имеет простой вид и в то же время достаточно хорошо аппроксимирует  $p(\theta, N)$ , например, в смысле метрики



$\int [p(\theta, N) - \tilde{p}(\theta, N)]^2 d\theta$ , что в свою очередь влечет близость интегралов  $\Delta J[p(\theta, N)]$  и  $\Delta J[\tilde{p}(\theta, N)]$ .

Если экстремальные точки достаточно удалены друг от друга, то функцию  $p(\theta, N)$  можно аппроксимировать композицией нормальных распределений

$$\tilde{p}(\theta, N) = \sum_{j=1}^v P(H_j, N) p_j(\theta, N). \quad (7.2.19)$$

Здесь

$$P(H_j, N) = \frac{|\mathbf{D}_j(N)|^{1/2} e^{-1/2 S_j(N)}}{\sum_{k=1}^v |\mathbf{D}_k(N)|^{1/2} e^{-1/2 S_k(N)}},$$

$$p_j(\theta_j, N) = (2\pi)^{-m/2} |\mathbf{D}_j(N)|^{-1/2} e^{-1/2 (\theta_j - \hat{\theta}_j(N))^T \mathbf{D}_j^{-1}(N) (\theta_j - \hat{\theta}_j(N)}},$$

матрица  $\mathbf{D}_j(N)$  определяется формулой (1.4.11), причем

$$f_{j\alpha}(x) = \left. \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_\alpha} \right|_{\theta = \hat{\theta}_j(N)}, \quad \hat{\theta}_j(N) \text{ — координаты } j\text{-го локального максимума функции } p(\theta, N),$$

$v$  — число этих максимумов. Величины  $S_j(N)$  определяются формулой

$$S_j(N) = \sum_{j=1}^v \omega_j [y_j - \hat{\eta}_j(x, N)]^2, \quad \hat{\eta}_j(x, N) = \eta(x, \hat{\theta}_j(N)).$$

Представление (7.2.19) соответствует квазилинейности в окрестности каждого из максимумов:

$$\eta(x, \theta) \simeq \eta(x, \hat{\theta}_j) + f_j(x) (\theta - \hat{\theta}_j(N)). \quad (7.2.20)$$

Непосредственным дифференцированием можно проверить, что при условии выполнения (7.2.19) в наиболее важных для экспериментатора областях вблизи экстремальных точек  $\hat{\theta}_j(N)$  функции  $p(\theta, N)$  и  $\sum_{j=1}^v P(H_j, N) p_j(\theta, N)$  совпадают с точностью до вторых производных включительно.

Аппроксимация  $p(\theta, N)$  функциями типа (7.2.19) сводит вычисление  $\Delta J[\mathcal{E}(\Delta N), p(\theta, N)]$  к задаче, рассмотренной в предыдущем параграфе.

Таким образом, средний прирост информации при проведении в точке  $\mathbf{x}$  измерений с суммарным весом  $\omega$  равен [76]

$$J(\mathcal{G}(\Delta N), p(\theta, N)) \simeq \frac{1}{2} \left\{ \sum_{j=1}^v P(H_j, N) d_j(\mathbf{x}, N) + \sum_{j=1}^v P(H_j, N) \left[ \hat{\eta}_j(\mathbf{x}, N) - \sum_{k=1}^v P(H_k, N) \hat{\eta}_k(\mathbf{x}, N) \right]^2 \right\} \omega, \quad (7.2.21)$$

где  $d_j(\mathbf{x}, N) = \mathbf{f}_j^T(\mathbf{x}) \mathbf{D}_j(N) \mathbf{f}_j(\mathbf{x})$ , остальные обозначения те же, что и в пояснениях к (7.2.19).

V. Используя результаты теоремы 7.2.1, нетрудно построить последовательную процедуру планирования экспериментов, которая заключается в следующем.

После каждого  $N$ -го измерения отыскивается функция  $p(\theta_j, N)$ , затем ищется

$$\max_{\mathbf{x} \in X} J[\mathcal{G}(\Delta N), p(\theta_j, N)].$$

В точке  $\mathbf{x}_N$ , соответствующей указанному максимуму, проводится измерение (или группа измерений). После проведения измерения отыскивается  $p(\theta_j, N+1)$  и все операции повторяются вновь. Измерение продолжается до тех пор, пока не будет достигнута необходимая точность, т. е. с достаточно большой вероятностью будет выделена одна из моделей и соответствующая ей величина  $\max_{\mathbf{x} \in X} d_j(\mathbf{x}, N)$  будет меньше некоторого наперед заданного положительного числа.

Вычислительный аппарат последовательного планирования особенно прост в случаях, рассмотренных в разделах III и IV. Указанные два случая и их очевидные комбинации хорошо приближают большинство реальных ситуаций (особенно удобны эти приближения при больших  $N$ , что обычно эквивалентно требованию, чтобы каждое отдельное измерение было не слишком дорогим). При этом (7.2.10) заменяется на формулу типа (7.2.18) и вычисления сводятся к поиску оценок  $\hat{\theta}$ , их диспер-

сионных матриц  $\mathbf{D}(N)$  и максимума по  $\mathbf{x}$  некоторой функции от данных величин (см. (7.2.18) и (7.2.21)).

Интересно рассмотреть случай, когда имеется одна модель и уравнение (1.4.4) обладает единственным корнем. При сделанных предположениях (7.2.18) или (7.2.21) принимает вид

$$J[\mathcal{G}(\Delta N), p(\theta, N)] \simeq \frac{1}{2} d(\mathbf{x}, N) \lambda(\mathbf{x}) \Delta N \quad (7.2.22)$$

и предложенная выше последовательная процедура планирования эксперимента совпадает с последовательной процедурой, рассмотренной в гл. 4.

Данное совпадение не случайно. Оно является следствием того факта, что

$$\begin{aligned} \Delta J[\mathcal{G}(\Delta N), p(\theta, N)] = & \int p(\theta, N) \ln p(\theta, N) d\theta - \int p(\theta, 0) \ln p(\theta, 0) d\theta = \\ & = \int -\frac{1}{2} (\hat{\theta} - \theta)^T \mathbf{D}^{-1}(N) \times \\ & \times (\hat{\theta} - \theta) (2\pi)^{-m/2} |\mathbf{D}(N)|^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} (\hat{\theta} - \theta)^T \mathbf{D}^{-1}(N) (\hat{\theta} - \theta)} d\theta + \\ & + \int [\ln |\mathbf{D}(N)|^{1/2}] (2\pi)^{-m/2} |\mathbf{D}(N)|^{-1/2} \times \\ & \times e^{-\frac{1}{2} (\hat{\theta} - \theta)^T \mathbf{D}^{-1}(N) (\hat{\theta} - \theta)} d\theta + C_1 = \ln |\mathbf{D}(N)|^{-1/2} + C_2, \end{aligned} \quad (7.2.23)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — константы, не зависящие от  $N$  и результатов измерений.

Из (7.2.23) следует, что требование максимума  $\Delta J$  эквивалентно требованию минимума определителя матрицы  $\mathbf{D}(N)$ . Используя (7.2.23) и (4.2.9), можно непосредственно получить (7.2.22).

Если число моделей больше единицы и модели различимы, то при  $N \rightarrow \infty$  средний прирост информации за  $\Delta N$  измерений равен

$$\Delta J[\mathcal{G}(\Delta N), p(\theta_j, N)] \simeq \frac{1}{2} d_{j_0}(\mathbf{x}, N) \lambda(\mathbf{x}) \Delta N,$$

где  $j_0$  — истинная модель,  $P(H_j, N) \rightarrow 0$  ( $j \neq j_0$ ).

Таким образом, рассматриваемое в данном разделе последовательное планирование на дальних асимптотиках является оптимальным в смысле минимизации определителя  $|D_{j_p}(N)|$  для истинной модели.

**Пример.** Продолжим рассмотрение примера, приведенного в § 6.4. Будем предполагать, что нужно не только выяснить, какая из моделей верна, но

Таблица 10

$N$	$x_1$	$T$	$y$	$P(H_1, N)$	$P(H_2, N)$	$P(H_3, N)$	$P(H_4, N)$
1	25	575	0,396	Затравочный эксперимент			
2	25	475	0,723				
3	125	475	0,422				
4	125	575	0,1297	0,001	0,390	0,612	0,002
5	4,9	600	0,675	$0,23 \cdot 10^{-3}$	0,492	0,505	$0,33 \cdot 10^{-2}$
6	72,7	450	0,706	$0,33 \cdot 10^{-3}$	0,675	0,323	$0,12 \cdot 10^{-2}$
7	150	548	0,085	$0,20 \cdot 10^{-3}$	0,993	$0,63 \cdot 10^{-2}$	$0,7 \cdot 10^{-7}$
8	150	450	0,525	$0,17 \cdot 10^{-3}$	0,995	$0,47 \cdot 10^{-2}$	$0,35 \cdot 10^{-7}$
9	49	600	0,145	$0,8 \cdot 10^{-5}$	0,9998	$0,18 \cdot 10^{-3}$	$\sim 10^{-10}$
10	13	600	0,401	$0,7 \cdot 10^{-5}$	0,9999	$0,6 \cdot 10^{-4}$	$\sim 10^{-11}$
11	39,4	573	0,245	$0,5 \cdot 10^{-6}$	0,9999	$0,5 \cdot 10^{-5}$	$\sim 10^{-14}$
12	150	450	0,544		$\sim 1$		
13	39,0	569	0,279		$\sim 1$		
14	150	450	0,531		$\sim 1$		

и как можно точнее определить входящие в нее неизвестные параметры.

При тех же предположениях, что и ранее, был проведен моделированный эксперимент по последовательному плану, определяемому (7.2.18). Результаты этого эксперимента частично представлены на рис. 35.

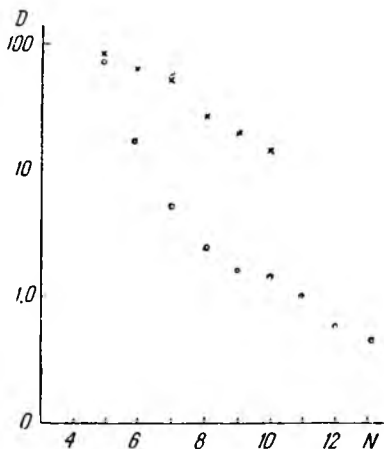


Рис. 35. Значения определителей дисперсионных матриц для истинной модели, полученных при реализации последовательных планов, опирающихся на (6.4.9) (крестики) и (7.2.18) (кружки).

Сравнение табл. 9 и 10 говорит о том, что при последовательном планировании, осуществляемым на основе (7.2.18), дискриминация моделей на первых этапах проходит практически с одинаковой скоростью. Лишь при достижении величиной  $P(N_2, N)$  уровня порядка 0,90 значения этой величины в табл. 9 несколько превышают соответствующие значения в табл. 10. Однако при этом значения определителей  $|D_2(N)|$  существенно меньше соответствующих значений этих величин, получаемых в эксперименте, осуществляемом по последовательному плану, нацеленному только на дискриминацию моделей.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Налимов, Н. А. Чернова, Статистические методы планирования экстремальных экспериментов, «Наука», 1965.
2. Ч. Хикс, Основные принципы планирования эксперимента, «Мир», 1967.
3. Ю. П. Адлер, Ю. В. Грановский, Обзор прикладных работ по планированию экспериментов, Препринт № 1 ЛСМ, Изд-во МГУ, 1967.
4. «Новые идеи в планировании экспериментов», сб. статей под ред. В. В. Налимова, «Наука», 1969.
5. А. М. Herzberg, D. R. Cox, Recent work on the design of experiments, JRSS 132, 29 (1969).
6. Ю. П. Адлер, Введение в планирование эксперимента, «Металлургия», 1969.
7. Н. П. Клепиков, С. Н. Соколов, Анализ и планирование экспериментов методом максимума правдоподобия, Физматгиз, 1964.
8. Ф. Р. Гантмахер, Теория матриц, Физматгиз, 1966.
9. А. П. Мишина, И. В. Проскураков, Высшая алгебра, «Наука», 1965.
10. Э. Беккенбах, Р. Беллман, Неравенства, «Мир», 1965.
11. J. Kiefer, Optimum designs in regression problems, II, Ann. Math. Stat. 32, 298 (1961).
12. M. G. Kendall, A. Stuart, The advanced theory of statistics, vol. 2, N-Y, 1961.
13. С. Уилкс, Математическая статистика, «Наука» 1967.
14. Г. Крамер, Математические методы статистики, ИЛ, 1948.
15. Ю. В. Линник, Метод наименьших квадратов и основы теории обработки наблюдений, Физматгиз, 1962.
16. Е. С. Вентцель, Теория вероятностей, Физматгиз, 1962.
17. С. Р. Рао, Линейные статистические методы и их применение, «Наука», 1968.
18. R. I. Jennrich, Asymptotic properties of nonlinear least squares estimators, Ann. Math. Stat. 40, 633 (1969).
19. С. Н. Соколов, И. И. Силин, Нахождение минимумов функционалов методом линеаризации, Препринт, ОИЯИ, Д-810, 1961.
20. Н. О. Hartley, Modified Gauss—Newton method for the fitting of nonlinear regression function. Technometrics 3, 269 (1961).
21. В. В. Федоров, Анализ экспериментов при наличии ошибок в определении контролируемых переменных, Препринт № 2 ЛСМ, Изд-во МГУ, 1968.

22. И. С. Березин, Н. П. Жидков, Методы вычисления. т. I, 2, Физматгиз, 1962.
23. Д. Блекуэлл, М. А. Гиршик, Теория игр и статистических решений, ИЛ, 1958.
24. С. Карлин, Математические методы в теории игр, программировании и экономике, «Мир», 1964.
25. J. Kiefer, J. Wolfowitz, The equivalence to two extremum problems, Can. J. Math. 12, 363 (1960).
26. S. Karlin, W. Studden, Optimal experimental designs 37, 783, (1966).
27. P. Guest, The spacing of observations in polynomial regression, Ann. Math. Stat. 29, 294 (1958).
28. В. И. Смирнов, Курс высшей математики, т. I, Изд-во технико-теоретической лит-ры, 1957.
29. Г. Серге, Ортогональные многочлены, Физматгиз, 1962.
30. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Физматгиз, 1963.
31. Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Лёш, Специальные функции, «Наука», 1964.
32. P. Hoel, Minimax designs in two dimensional regression, Ann. Math. Stat. 26, 1097 (1965).
33. К. Дж. Эрроу, Л. Гурвиц, Х. Удзава, Исследования по линейному и нелинейному программированию, ИЛ, 1962.
34. Д. Дж. Уайлд, Методы поиска экстремума, «Наука», 1967.
35. Б. Н. Пшеничный, Необходимые условия экстремума, «Наука», 1969.
36. В. В. Федоров, И. С. Дубова, Методы построения оптимальных планов регрессионных экспериментов, Препринт № 4 ЛСМ, Изд-во МГУ, 1968.
37. J. Kiefer, Optimum experimental designs. With applications to systematic and rotatable designs, Proc. Fourth Berkley Symp., I, 381—405, 1965.
38. H. Chernoff, Locally optimal designs for estimating parameters, Ann. Math. Stat. 24, 586 (1953).
39. W. J. Studden, Optimal designs on Tchebycheff points, Ann. Math. Stat. 39, 1435 (1968).
40. С. Н. Соколов, Н. П. Клепиков, Геометрический прием оптимального размещения измерений, Теория вероятн. и ее прим. 8, 238 (1963).
41. G. Elfving, Optimum allocation in linear regression theory, Ann. Math. Stat. 23, 255 (1952).
42. V. V. Fedorov, M. B. Mal'kov, On the designs for certain weighted polynomial regression minimizing the average variance, Preprint № 8, LSR, Moscow State University Press, 1969.
43. P. Hoel, Optimum designs for polynomial extrapolations, Ann. Math. Stat. 36, 1483 (1965).
44. J. Kiefer, J. Wolfowitz, On a theorem of Hoel and Levine on extrapolation designs, Ann. Math. Stat. 36, 1627 (1965).
45. S. Karlin, W. Studden, Tchebycheff Systems with applications in analysis and statistics, Interscience, N.-Y., 1966.
46. В. В. Федоров, Свойства и методы построения точных оптимальных планов регрессионных экспериментов, Препринт № 5, ЛСМ, Изд-во МГУ, 1969.

47. О. В. Шалаевский, Проблема распределения наблюдений в полиномиальной регрессии, Труды матем. ин-та им. Стеклова АН СССР 79, 132 (1965).
48. G. E. P. Vox, N. R. Draper, The choice of second order rotatable design, Biometrika 50, 335 (1963).
49. M. J. Karson, A. R. Manson and R.J. Hader, Minimum bias estimation and experimental design for response surface, Technometrics 11, 461 (1969).
50. С. Е. Ермаков, Об оценивании параметров при непрямах измерениях, Труды матем. ин-та им. Стеклова АН СССР 79, 106 (1965).
51. Н. П. Богачев, И. К. Взорев, ДАН СССР 99, 931 (1951).
52. Л. С. Ажгирей, Н. П. Клепиков и др., Феноменологический анализ взаимодействия при 657 Мэв, ЖЭТФ 45, 1174 (1963).
53. Ф. Легар, В. В. Федоров, З. Яноут, Планирование экспериментов по  $n-p$  рассеянию, ЯФ 5, 887 (1967).
54. G. E. P. Vox, W. Hunter, Sequential design of experiments for nonlinear models, Proceedings of IBM Scientific Computing Symposium on statistics, Page 113, Oct., 1965.
55. А. Пазман, В. В. Федоров, Планирование уточняющих и дискриминирующих экспериментов по  $NN$ -рассеянию, ЯФ 6, 853 (1967).
56. Ф. Легар, Н. Н. Федоров, Планирование экспериментов для выбора между вариантами фазовых сдвигов, ЯФ 3, 693 (1966).
57. С. Н. Соколов, Непрерывное планирование регрессионных экспериментов, Теория вероятн. и ее прим. 8, 95, 318 (1963).
58. H. Jeffreys, Theory of Probability, Oxford Univ. Press, 1948.
59. B. Clemmer, R. Krutchkoff, The use of empirical Bayes estimators in a linear regression model, Biometrika 55, 525 (1968).
60. В. В. Федоров, Планирование экспериментов в случае одновременного измерения нескольких поверхностей отклика, Препринт № 3 ЛСМ, Изд-во МГУ, 1968.
61. N. Draper, W. Hunter, Design of experiments for parameter estimation in multiresponse situations, Biometrika 53, 525 (1966).
62. G. E. P. Vox, W. Hill, Discrimination Among Mechanistic Models, Technometrics 9, 57 (1967).
63. Э. Леман, Проверка статистических гипотез, «Наука», 1964.
64. Т. Андерсон, Введение в многомерный статистический анализ, Физматгиз, 1963.
65. Ю. В. Линник, Статистические задачи с мешающими параметрами, «Наука», 1966.
66. С. Кульбак, Теория информации и статистика, «Наука», 1967.
67. А. Хальд, Математическая статистика с техническими приложениями, ИЛ, 1956.
68. В. В. Федоров, Локально-оптимальные последовательные планы дискриминирующих экспериментов, Препринт № 11 ЛСМ, Изд-во МГУ, 1970.
69. В. В. Федоров, Планирование экспериментов по различению гипотез — кривых при помощи метода отношения вероятностей, Заводская лаборатория 34, 314 (1968).
70. J. Kiefer, J. Sacks, Asymptotical optimum sequential inference and design, Ann. Math. Stat. 34, 705 (1963).
71. Г. С. Федорова, И. В. Игонина, Информационный подход к планированию регрессионных экспериментов, Заводская лаборатория 5, 513 (1970).



- 13
72. W. Hill, W. Hunter, D. Wichern, A joint design criterion for the dual problem of model discrimination and parameter estimation, *Technometrics* **10**, 145 (1968).
  73. И. М. Гельфанд, А. Н. Колмогоров, А. М. Яглом, К общему определению количества информации, *ДАН СССР* **111**, 745 (1956).
  74. D. Lindley, On a measure of the information provided by experiments, *Ann. Math. Stat.* **27**, 986 (1956).
  75. V. V. Fedorov, A. Pazman, Design of physical experiments (statistical methods), *Fortschritte der physic* **24**, 325 (1968).
  76. V. V. Fedorov, A. Pazman, Design of experiments based on the measure of information, Preprint JINR, E5-3247, 1967.
  77. В. В. Федоров, Последовательные методы планирования экспериментов при изучении механизма явлений, Сб. «Новые идеи в планировании экспериментов» под ред В. В. Налимова, «Наука», 1969.
  78. М. Б. Малютов, В. В. Федоров, О планировании экспериментов, учитывающем возможную неадекватность, Препринт № 18 ЛСМ, Изд-во МГУ, 1971.
  79. В. В. Федоров, Планирование при нелинейной зависимости поверхности отклика от оцениваемых параметров, Препринт № 21 ЛСМ, Изд-во МГУ, 1971.

Цена 1 р. 06 к.