Исследование L-оптимальных планов для двумерной экспоненциальной модели

Плешкова Алина Артуровна, гр. 15.Б04-мм

Санкт-Петербургский государственный университет
Математико-механический факультет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Шпилёв П. В.

Рецензент: д.ф.-м.н., профессор Невзоров В.Б.

Санкт-Петербург
2019г.

Цели работы

Цель:

Исследовать задачу построения L-оптимальных планов для двумерной экспоненциальной модели.

Этапы исследования:

- Найти веса трехточечного оптимального плана.
- Исследовать данную задачу, когда трехточечный план сосредоточен во внутренних точках отрезков планирования.
- Исследовать данную задачу при фиксированных значениях параметров и области планирования $[0, 1] \times [0, 1]$.

Уравнение регрессии

Уравнение регрессии:

$$y_j = \theta^{\mathrm{T}} f(t_j) + \varepsilon_j,\ j = 1, \dots, N$$

- N — количество проведенных экспериментов;
- $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)^{\mathrm{T}}$ — вектор неизвестных параметров;
- $t_1, \dots, t_N$ — условия проведения эксперимента — элементы множества планирования χ
- $f(t) = (f_1(t), \dots, f_m(t))^{\mathrm{T}}$ — вектор регрессионных функций;
- χ — фиксированное множество, наделенное структурой компактного топологического пространства
- $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N$ — случайные величины, характеризующие ошибки наблюдений
  - Несмещенные: $\mathrm{E}\varepsilon_j = 0,\ j = 1, \dots, N$.
  - Некоррелированные: $\mathrm{E}\varepsilon_j\varepsilon_i = 0,\ i \neq j$.
  - Равноточные: $\mathrm{E}\varepsilon_j^2 \equiv \sigma^2 > 0,\ j = 1, \dots, N$.

План, информационная и дисперсионная матрицы

- Непрерывный план:

$$\xi = \begin{pmatrix} t_1 & \dots & t_n \\ \omega_1 & \dots & \omega_n \end{pmatrix}, \; t_i \neq t_j \text{ при } i \neq j, \, \omega_i \geqslant 0, \, \sum_{i=1}^{n} \omega_i = 1$$

ω_i — весовые коэффициенты, n — число различных точек.

- Под информационной матрицей плана ξ будем понимать матрицу

$$\mathcal{M}(\xi) = \int\limits_{\chi} f(t) f^{\mathrm{T}}(t) \xi(dt).$$

- Дисперсионная матрица:

$$\mathcal{D}(\xi) = \mathcal{M}(\xi)^{-1}.$$

Критерий оптимальности

Критерий L-оптимальности имеет вид

$$\operatorname{tr}\bigl(\mathrm{L}\mathcal{D}(\xi)\bigr) \longrightarrow \inf_{\xi \in \Xi_{\mathrm{H}}},$$

где $\Xi_{\mathrm{H}} = \{\xi \in \Xi : \det \mathcal{M}(\xi) \neq 0\}$, а L — фиксированная вещественная квадратная неотрицательно определенная матрица.

Смысл L-оптимального плана — минимизировать обобщенные квадратичные потери $\mathrm{E}(\hat{\theta} - \theta)^{\mathrm{T}}\mathrm{L}(\hat{\theta} - \theta)$, где $\hat{\theta}$ — оценка метода наименьших квадратов.

В работе за матрицу L взята единичная матрица.

Теорема эквивалентности

Теорема [Ермаков С.М., Жиглявский А.А., 1987]

План $\xi^* \in \Xi$ является L-оптимальным тогда и только тогда, когда выполнено

- $$\max_{t \in \chi} \varphi(t, \xi^*) = \mathrm{tr}\left(\mathrm{L}\mathcal{D}(\xi^*)\right), \text{ где}$$

  $$\varphi(t, \xi) = f^{\mathrm{T}}(t)\mathcal{D}(\xi)\mathrm{L}\mathcal{D}(\xi)f(t),$$

  при этом в точках $t_i \in supp(\xi^*)$ выполняется равенство

- $$\varphi(t_i, \xi^*) = \mathrm{tr}\left(\mathrm{L}\mathcal{D}(\xi^*)\right).$$

Двумерная экспоненциальная модель

Рассматриваемая регрессионная модель

$$\eta(t_1, t_2) = \theta_0 e^{-\theta_1 t_1 - \theta_2 t_2},$$

где $\theta_i > 0,\ i = 0, 1, 2,\ t_i \in \chi = [0, b_1] \times [0, b_2]$.

- Назовем план ξ насыщенным, если количество точек в плане n совпадает с количеством параметров в регрессионной модели m.
- План ξ избыточен, если количество точек в плане n больше количества параметров в регрессионной модели m.

Насыщенный план

В работе показано, что насыщенный L-оптимальный план имеет следующую структуру:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} (0;0) & (a_1;0) & (0;a_2) \\ \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 \end{pmatrix}, \text{ где } a_i \in (0, b_i],\ i = 1,2.$$

Существует три типа насыщенных планов:

a) $a_i \in (0, b_i], \frac{\partial \operatorname{tr} \mathcal{D}(\xi)}{\partial a_i} = 0,\ i = 1,2$ (первый тип);

b) $a_1 \in (0, b_1],\ \frac{\partial \operatorname{tr} \mathcal{D}(\xi)}{\partial a_1} = 0,\ a_2 = b_2,\ \frac{\partial \operatorname{tr} \mathcal{D}(\xi)}{\partial a_2} \neq 0$ (второй тип);

c) $a_i = b_i,\ \frac{\partial \operatorname{tr} \mathcal{D}(\xi)}{\partial a_i} \neq 0,\ i = 1,2$ (третий тип).

Теорема об L-оптимальности плана

Теорема: Для $\eta(t_1, t_2) = \theta_0 e^{-\theta_1 t_1 - \theta_2 t_2}$, $0 \leqslant t_1 \leqslant b_1$, $0 \leqslant t_2 \leqslant b_2$ план $\xi^* = \begin{pmatrix} (0;0) & (a_1;0) & (0;a_2) \\ \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 \end{pmatrix}$, где $\omega_1,\ \omega_2,\ \omega_3$ — решение системы (1), $a_1,\ a_2$ — решение системы (2), L-оптимальный, если $a_1 \in (0, b_1],\ a_2 \in (0, b_2]$, $\mathrm{L} = \mathrm{I}$.

$$p_1 = \sqrt{a_1^2 a_2^2 \theta_0^2 + a_1^2 + a_2^2},\quad p_2 = a_2 e^{\theta_1 a_1},\quad p_3 = a_1 e^{\theta_2 a_2};$$

$$\begin{cases} \omega_1 = \frac{p_1}{p_1+p_2+p_3}, \\ \omega_2 = \frac{p_2}{p_1+p_2+p_3}, \\ \omega_3 = \frac{p_3}{p_1+p_2+p_3}; \end{cases} \quad (1) \qquad \begin{cases} \theta_1 = \dfrac{W\left(\frac{a_2}{e \cdot p_1}\right)+1}{a_1}, \\ \theta_2 = \dfrac{W\left(\frac{a_1}{e \cdot p_1}\right)+1}{a_2}, \end{cases} \quad (2)$$

где W — функция Ламберта.

Некоторые частные случаи

- Пусть $\theta_0 = \theta_1 = \theta_2 = 1$. Тогда для регрессионной функции

$$\eta(t_1, t_2) = e^{-t_1 - t_2},\ 0 \leqslant t_1, t_2 \leqslant 1. \tag{3}$$

следующий план является L-оптимальным:

$$\begin{pmatrix} (0;0) & (1;0) & (0;1) \\ \frac{\sqrt{3}}{2e+\sqrt{3}} & \frac{e}{2e+\sqrt{3}} & \frac{e}{2e+\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

- Пусть $\theta_0 > 0,\ \theta_1 = \theta_2 = 1$. Тогда для регрессионной функции

$$\eta(t_1, t_2) = \theta_0 e^{-t_1 - t_2},\ 0 \leqslant t_1, t_2 \leqslant 1 \tag{5}$$

следующий план является L-оптимальным:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} (0;0) & (1;0) & (0;1) \\ \frac{\sqrt{\theta_0^2+2}}{\sqrt{\theta_0^2+2}+2e} & \frac{e}{\sqrt{\theta_0^2+2}+2e} & \frac{e}{\sqrt{\theta_0^2+2}+2e} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Теорема об оптимальных планах при $\theta_1 = \theta_2$ и $\chi = [0,1]^2$

Теорема: Если регрессионная модель имеет вид

$$\eta(t_1, t_2) = \theta_0 e^{-\theta_1 t_1 - \theta_1 t_2},\ 0 \leqslant t_1, t_2 \leqslant 1, \tag{7}$$

$$\xi^* = \begin{pmatrix} (0;0) & (a;0) & (0;a) \\ \frac{\sqrt{\theta_0^2+2}}{\sqrt{\theta_0^2+2}+2e^{\theta_1}} & \frac{e^{\theta_1}}{\sqrt{\theta_0^2+2}+2e^{\theta_1}} & \frac{e^{\theta_1}}{\sqrt{\theta_0^2+2}+2e^{\theta_1}} \end{pmatrix} \tag{8}$$

то

a) план ξ^*, где $a = 1$, L-оптимальный при параметрах из области $\Theta_1 = \{(\theta_0,\ \theta_1)\}$;

b) план ξ^* L-оптимальный при параметрах из области $\Theta_2 = \{(\theta_0,\ \theta_1)\}$; Точка a является решением уравнения

$$\theta_1 = \frac{W\left(\frac{1}{e\sqrt{a^2\theta_0^2+2}}\right) + 1}{a}; \tag{9}$$

c) оптимальный план состоит из четырех точек, если параметры принадлежат множеству $\Theta_3 = \{(\theta_0,\ \theta_1)\}$.

Области $\Theta_1, \ \Theta_2, \ \Theta_3$

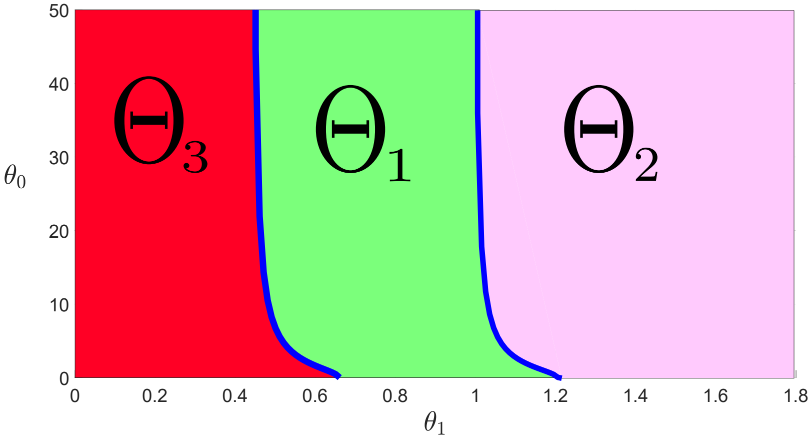

Рис.: Области параметров $\Theta_1, \ \Theta_2, \ \Theta_3$

Границы области Θ_1

Границами являются функции:

$$\theta_0 = \sqrt{\frac{16e^{-6\theta_1}}{(1 - e^{-4\theta_1} - 2e^{-2\theta_1})^2} - 2}, \quad -\frac{\ln(\sqrt{2} - 1)}{2} < \theta_1 \leqslant \frac{\ln(2 + \sqrt{3})}{2}$$

— левая граница Θ_1;

$$\theta_0 = \frac{\sqrt{e^{-2\theta_1} - 2(\theta_1 - 1)^2}}{\theta_1 - 1}, \quad 1 < \theta_1 \leqslant W\left(\frac{1}{e\sqrt{2}}\right) + 1$$

— правая граница Θ_1.

Результаты

В ходе работы были получены следующие ключевые результаты:

- найдены в явном виде веса насыщенного L-оптимального плана;
- доказана теорема для общего случая, в которой показано, что точки оптимального плана первого типа определены неявно, как решение системы нелинейных уравнений (2);
- рассмотрены частные случаи с областью планирования $\chi = [0, 1] \times [0, 1]$ и ограничениями на параметры:
  - $\theta_0 = \theta_1 = \theta_2 = 1$
  - $\theta_0 > 0, \ \theta_1 = \theta_2 = 1$
  - $\theta_0 > 0, \ \theta_1 = \theta_2 > 0.$

  Для каждого из представленных случаев был найден трехточечный L-оптимальный план в явном виде. Для последнего случая доказана теорема об изменении вида оптимального плана в зависимости от параметров модели.