Планирование эксперимента для моделей с мешающими параметрами

Кухтина Дарина Александровна, гр. 422

Санкт-Петербургский государственный университет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор Мелас В.Б.

Рецензент: к.ф.-м.н., Шпилев П.В.

Санкт-Петербург
2015г.

Постановка задачи

Определение

$y_j = \eta(x_j, \theta) + \varepsilon_j$, где $x_j \in \chi$, $\theta \in \Omega \subset \mathrm{R}^n$, $\mathbb{E}\varepsilon_j = 0$, $\mathbb{E}\varepsilon_j^2 = \sigma^2$, $\mathbb{E}\varepsilon_j\varepsilon_i = 0$ *при* $i \neq j$, $\ i, \ j = 1, \ldots, N$ *— общее уравнение регрессии.*

Определение

План эксперимента — это дискретная вероятностная мера на множестве планирования χ *с конечным носителем:*

$$\begin{pmatrix} x_1 & \ldots & x_n \\ \omega_1 & \ldots & \omega_n \end{pmatrix},$$

причем $\sum_{i=1}^{n} \omega_i = 1$ *и* $\omega_i \geq 0$.

Постановка задачи

- Полиномиальная модель:
  $\eta(x,\theta) = \theta_1 x^{n-1} + \ldots + \theta_{n-1}x + \theta_n$

Некоторые нелинейные по параметрам модели:

- Модель Михаэлиса-Ментен:

$$\eta(x,\theta) = \frac{ax}{x+b},\ x \in [0,d];$$

- Обобщенная модель Михаэлиса-Ментен ($EMAX$-модель):

$$\eta(x,\theta) = \frac{ax^h}{b+x^h},\ x \in [0,d];$$

- $EMAX$-модель:

$$\eta(x,\theta) = a + \frac{bx}{x+c},\ x \in [0,d].$$

Информационная матрица плана: $M(\xi) = \int\limits_{\chi} f(x) f^T(x) \xi dx$,

где $f(x)$:

- Для линейной модели: $\eta(x, \theta) = \theta^{\mathrm{T}} f(x)$, причем $f(x) = (f_1(x), \ldots, f_n(t))^{\mathrm{T}}$, где $f_i(t)$ — непрерывные, линейно независимые функции.
- Для нелинейной модели: $f(x) = f(x, \theta^{(0)}) = (\frac{\partial \eta(x, \theta^{(0)})}{\partial \theta_1}, \ldots, \frac{\partial \eta(x, \theta^{(0)})}{\partial \theta_m})^{\mathrm{T}}$.

Определение

*План ξ^* называется D-**оптимальным**, если*
$\det M(\xi^*) \to \max_{\xi \in \Xi}$.

Постановка задачи

Определение

*D_s-**оптимальный план** максимизирует $\det M_{(s)}(\xi)$. Здесь $M_{(s)}(\xi) = M_{11}(\xi) - X^{\mathrm{T}} M_{22}(\xi) X$, где*

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} M_{11}(\xi) & M_{12}(\xi)^{\mathrm{T}} \\ M_{12}(\xi) & M_{22}(\xi) \end{pmatrix},$$

- *если матрица M_{22} невырождена, $X = M_{22}^{-1} M_{12}$;*
- *иначе: X — произвольное решение системы $M_{22} X = M_{12}$.*

Задача: найти D_s-оптимальные планы и исследовать их эффективность в случае полиномиальных и некоторых нелинейных моделей.

Теоремы эквивалентности

Теорема (Kiefer, Wolfowitz, 1961 г.)

Если множество информационных матриц компактно, то следующие условия эквивалентны:

- план ξ^* — D-оптимальный.
- $\max_{x \in \chi} d(x, \xi^*) = m$, где $d(x, \xi) = f^T(x) D(\xi) f(x)$.

Теорема (Karlin, Studden, 1976 г.)

План ξ является D_s-оптимальным планом $\Leftrightarrow$
$\exists$ матрица X, удовлетворяющая условию:

$$M_{22}(\xi) X = M_{12}(\xi),$$

и такая что

$$\max_{x \in X} \psi(t)^{\mathrm{T}} (M_{(s)}(\xi))^{-1} \psi(x) = s,$$

где $\psi(x) = f_{(1)}(x) - X^{\mathrm{T}} f_{(2)}(x)$, $M_{(s)} = M_{11} - X^{\mathrm{T}} M_{22} X$.

Вспомогательные теоремы

Известный результат см. (Мелас, Шпилев, 2012 г.)

Для полиномиальной модели на отрезке $[-1, 1]$ точки D-оптимального плана — корни уравнения $(x^2-1)P'_{n-1}$, $\omega_i = \frac{1}{n}, i = 1, \ldots, n$.

Теорема(Studden, 1979 г.)

Множество точек D_s-оптимального плана — $\{-1, 1\}$ и n-1 корень уравнения

$$P'_s(x)U_{n-s}(x) - P'_{s-1}(x)U_{n-s-1}(x) = 0,$$

их веса $\omega_i = \frac{2}{2n+1+U_{2s}(x_i)}, i = 0, 1, \ldots, n, s = 1, \ldots, n-1$.

Теорема(Elfving, 1952 г.)

План является c-оптимальным, если $\exists\, p$:

1. $(p^{\mathrm{T}} f(x))^2 \leq 1$,
2. $p^{\mathrm{T}} f(x_i) = (-1)^i$,
3. $c = \gamma \sum_{i=1}^{n} (-1)^i f(x_i)\omega_i$, *где γ =const, а c — единичный вектор.*

Полиномиальная модель степени 4

Вектор регрессионных функций: $f(x) = (x^4, x^3, x^2, x, 1)^{\mathrm{T}}$.
D-оптимальный план:

$$\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{\frac{3}{7}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{7}} & 1 \\ \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} \end{pmatrix}.$$

Оптимальные планы для оценки коэффициентов:

при (x, x^2, x^3, x^4):

$$\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{\frac{3}{7}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{7}} & 1 \\ \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} \end{pmatrix};$$

при (x^2, x^3, x^4):

$$\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{\frac{2}{5}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{5}} & 1 \\ \frac{1}{6} & \frac{5}{24} & \frac{1}{4} & \frac{5}{24} & \frac{1}{6} \end{pmatrix};$$

при (x^3, x^4):

$$\begin{pmatrix} -1 & -\frac{5}{2\sqrt{3}} & 0 & \frac{5}{2\sqrt{3}} & 1 \\ \frac{1}{7} & \frac{9}{35} & \frac{1}{5} & \frac{9}{35} & \frac{1}{7} \end{pmatrix};$$

при x^4:

$$\begin{pmatrix} -1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} \end{pmatrix}.$$

Эффективность

Эффективность D-оптимального плана, относительно D_s-оптимального плана:

$$\frac{\sqrt[s]{\ detM_{(s)}(\xi_2)}}{\sqrt[s]{\det M_{(s)}(\xi_1)}},$$

s — количество оцениваемых параметров модели,
ξ_2 — D-оптимальный план, ξ_1 — D_s-оптимальный план.

Эффективность D_s-оптимального плана, относительно D-оптимального:

$$\frac{\sqrt[n]{\ detM(\xi_1)}}{\sqrt[n]{\det M(\xi_2)}},$$

n — количество параметров модели.

Сравнение эффективности

Таблица: Эффективность D-оптимального плана, относительно D_s-оптимальных для полиномиальных моделей, $s = 1, \ldots, 4$

Планы	Степень 2	Степень 3	Степень 4
D_1	0.54	0.10	0.03
D_2	1	0.17	0.13
D_3	—	1	0.25
D_4	—	—	1

Таблица: Эффективность D_s-оптимальных планов, относительно D-оптимального плана для полиномиальных моделей, $s = 1, \ldots, 4$

Планы	Степень 2	Степень 3	Степень 4
D_1	0.95	0.94	0.93
D_2	1	0.95	0.96
D_3	—	1	0.98
D_4	—	—	1

Сравнение эффективности

Таблица: Сравнение эффективности D-оптимальных планов для полиномиальных моделей

Модели	Для модели степени 2	Для модели степени 3	Для модели степени 4
Степень 2	—	0.49	0.26
Степень 3	0	—	0.50
Степень 4	0	0	—

Для полиномиальной модели можем проверить гипотезу:

$$H_0 : \theta_1, \ldots, \theta_s = 0.$$

Против альтернативы:

$$H_1 : \exists i \in \{1, \ldots, s\} : \theta_i \neq 0.$$

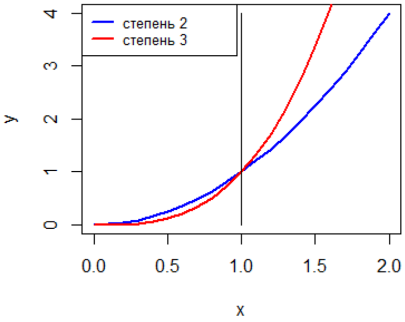


Рис.: Сравнение моделей

Нелинейные модели

Некоторые нелинейные по параметрам модели:

- Модель Михаэлиса-Ментен:

$$\eta(x,\theta) = \frac{ax}{x+b},\ x \in [0,d];$$

- Обобщенная модель Михаэлиса-Ментен ($EMAX$-модель):

$$\eta(x,\theta) = \frac{ax^h}{b+x^h},\ x \in [0,d];$$

- $EMAX$-модель:

$$\eta(x,\theta) = a + \frac{bx}{x+c},\ x \in [0,d].$$

Модель Михаэлиса-Ментен

D-оптимальный план:

$$\begin{pmatrix} \frac{bd}{d+2b} & d \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

D_1-оптимальный план для оценки параметра b:

$$\begin{pmatrix} \frac{bd}{(\sqrt{2}+1)\cdot b+\sqrt{2}\cdot d} & d \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

D_1-оптимальный план для оценки параметра a:

$$\begin{pmatrix} \frac{bd}{(\sqrt{2}+1)\cdot b+\sqrt{2}\cdot d} & d \\ \frac{4+4\sqrt{2}}{5+8\sqrt{2}} & \frac{1+4\sqrt{2}}{5+8\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

D-оптимальный план:

$$\xi = \begin{pmatrix} 0 & \frac{db}{2b+d} & d \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix};$$

D_1-оптимальный план для оценки b:

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{db}{2b+d} & d \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{8} & \frac{3}{8} \end{pmatrix};$$

D_1-оптимальный план для оценки c:

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{db}{2b+d} & d \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Сравнение эффективности для модели Михаэлиса-Ментен:

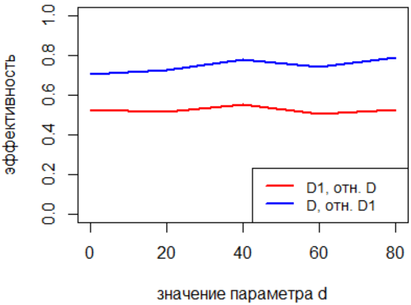


Рис.: D_1-оптимальный для параметра a

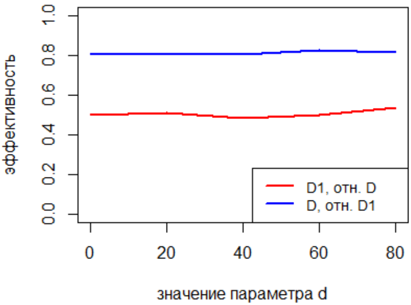


Рис.: D_1-оптимальный для параметра b

Сравнение эффективности

Сравнение эффективности для $EMAX$-модели :

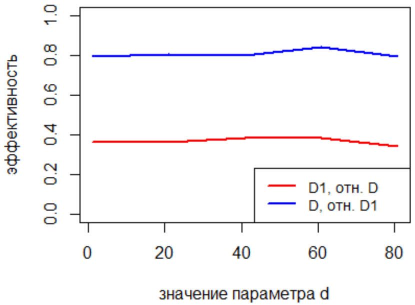


Рис.: D_1-оптимальный для параметра b

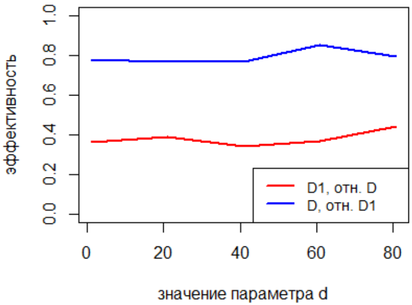
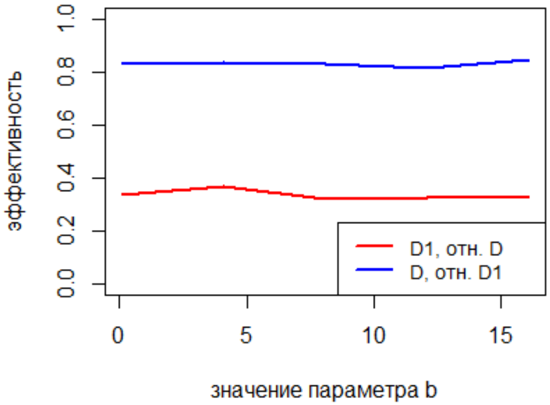


Рис.: D_1-оптимальный для параметра c

Сравнение эффективности для модели обобщенной модели Михаэлиса-Ментен:



Результаты

- Найдены планы для оценки части параметров в полиномиальных и некоторых нелинейных моделях.
- Выяснено, что в случае полиномиальной модели усеченные планы оказываются эффективнее D-оптимальных для оценки части параметров. Также эффективны для оценки всех параметров модели, и используются при проверки гипотез о ее порядке.
- В случае модели Михаэлиса-Ментен и $EMAX$-модели D_s-оптимальные планы не имеют столь высокой эффективности и D-оптимальные планы оказываются эффективнее.