

УДК 519. 242

КВАЗИДИФФЕРЕНЦИАЛЫ В ЗАДАЧАХ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В.И. Хабаров

*Сибирский государственный университет путей сообщения
Новосибирский государственный технический университет*

Рассматривается подход к проблеме построения планов регрессионных экспериментов с позиций недифференцируемой оптимизации. Задача планирования экспериментов для ряда известных критериев оптимальности приводится к некоторой экстремальной проблеме с негладкой критериальной функцией и в общем случае с континуумом ограничений. Такая задача является объектом теории математического программирования с квазидифференцируемыми функциями. Эта теория к настоящему времени достаточно хорошо развита. Представляется целесообразным применение результатов данной теории для планирования регрессионных экспериментов. Это дает возможность установить структуру оптимальных планов и предложить эффективные алгоритмы построения этих планов, используя методы построения экстремального базиса. Структура квазидифференциала позволяет на экстремальном базисе построить вероятностную меру, которую можно трактовать как план эксперимента. Другим эффектом данного подхода является возможность отказаться от сложных функционалов, основанных на информационной матрице Фишера. В работе показана эффективность предлагаемого подхода, которая иллюстрируется на примерах. Результаты носят довольно общий характер и могут быть применены к различным регрессионным моделям как в статической, так и в динамической постановке.

Ключевые слова: регрессия, план эксперимента, критерий оптимальности, квазидифференциал, субградиент, экстремальный базис.

DOI: 10.17212/1727-2769-2014-4-124-136

Введение

Теория планирования регрессионных экспериментов [1–4] в настоящее время развивается в основном в сторону усложнения моделей и условий экспериментов, оставаясь в рамках сложившейся методологии. В общих чертах эта методология сводится к тому, чтобы извлечь максимальное количество информации за счет эффективных методов идентификации модели. В рамках параметрического подхода это предполагает выбор адекватной структуры модели и эффективное оценивание параметров модели. Получение эффективной оценки параметров возможно за счет выбора эффективных методов оценивания, а также за счет эффективного использования пространства экспериментирования. Эффективность в указанном смысле формализуется через критерии качества оценок параметров моделей. В настоящее время для задач параметрической идентификации, как правило, в качестве критериев используются различные функционалы от информационной матрицы Фишера.

С другой стороны, в ряде работ замечено, что задачи построения регрессии во многом близки к задачам аппроксимации функций [10]. Наибольший интерес представляет чебышевская аппроксимация.

Задачи чебышевской аппроксимации явились одним из существенных факторов развития теории минимакса [7, 8, 10], а затем более общей теории недифференцируемой оптимизации [7]. Эта теория в общих чертах обобщает понятия производной до более общего понятия *квазидифференциала*.

Вместе с тем в [5, 6] было показано, что ряд критериев оптимальности для планов экспериментов сводится к критериям в вариационной постановке. Досто-

инство последних состоит в том, что они не содержат операции обращения матриц. Более того, они вообще не выражаются через информационные матрицы. Однако эти критерии по природе являются негладкими, поскольку содержат операторы взятия экстремума, причем с ограничениями. К ним применима теория квазидифференциалов. В данной работе показано, что квазидифференциалы могут весьма эффективно использоваться для задач планирования экспериментов.

1. Вариационная постановка задачи планирования эксперимента

Для всякой всюду дифференцируемой на $X \times \Omega$ и сильно выпуклой на Ω функции $\varphi(x, \theta)$ рассмотрим экстремальную проблему вида

$$\xi^* = \arg \sup_{\xi \in \Xi} \inf_{\theta \in \Omega} \int_X \varphi(x, \theta) \xi(dx), \tag{1.1}$$

к которой можно свести достаточно широкий ряд задач планирования экспериментов. Здесь $\xi \in \Xi$ – план эксперимента, рассматриваемый как некоторая вероятностная мера на области планирования X .

В работе [6] показано, что приведенные в таблице конкретные условия, налагаемые на (1.1), позволяют рассматривать некоторые важные критерии оптимальности в терминах функции $\varphi(x, \theta)$ на $X \times \Omega$, где Ω – специально выбранное множество.

Критерий	$\varphi(x, \theta)$	Ω
E -критерий $\max_{i=1, \dots, m} \lambda_i [M^{-1}(\xi)]$	$\eta^2(x, \theta)$	$(\theta : \theta^T A \theta \geq 1)$ $A = I$
A -критерий $SpAM^{-1}(\xi)$	$\eta^2(x, \theta)$	$(\theta : \theta^T A \theta \geq 1)$
C -критерий $c^T M^{-1}(\xi) c$	$\eta^2(x, \theta)$	$(\theta : \theta^T A \theta \geq 1)$ $A = cc^T$
G - критерий $\inf_{\xi \in \Xi} \sup_{x \in X} f^T(x) M^{-1}(\xi) f(x)$	$\eta^2(x, \theta) = \theta^T f^T(x) f(x) \theta$	$\{\theta : \sup_{x \in X} \varphi(x, \theta) \geq 1\}$
T -критерий	$(\eta_1(x, \theta) - \eta_2(x, \theta))^2$	$\theta_1 \in \Omega_1,$ $\theta_2 \in \Omega_2,$ $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2$

Рассмотрим ситуацию, когда на переменные наложены следующие ограничения:

$$\Omega = \{ \theta : g(\theta, z) \leq 0, z \in Z \}, \tag{1.2}$$

где Z – компактное множество в R^m . В этом случае приходим к задаче математического программирования с континуумом ограничений. Пусть Ω – выпуклое множество. Тогда [7] для задачи

$$\theta^* = \arg \inf_{\theta \in \Omega} \int_X \varphi(x, \theta) \xi^*(dx) \tag{1.3}$$

необходимые и достаточные условия оптимальности имеют вид

$$\begin{cases} \lambda_0 \int_X \varphi'_0(x, \theta^*) \xi^*(dx) + \lambda_{-1} c = 0; \\ \lambda_{-1} g_{-1}(\theta^*) = 0, \end{cases} \quad (1.4)$$

где λ_0, λ_{-1} – некоторые неотрицательные константы, не равные нулю одновременно,

$$g_{-1}(\theta) = \max_{z \in Z} g(\theta, z),$$

c – элемент квазидифференциала

$$\partial g_{-1}(\theta) = co \left\{ \bigcup_{z \in Z(\theta^*)} g'_0(\theta, z) \right\}, \quad (1.5)$$

$$Z(\theta) = \{z : g(\theta, z) = g_{-1}(\theta)\}.$$

Поскольку $\partial g_{-1}(\theta)$ есть выпуклая линейная оболочка m -мерных векторов $g'_0(\theta, z)$, $z \in Z(\theta^*)$, то вектор c представим в виде

$$c = \sum_{i=1}^{m+1} \lambda_i g'_0(\theta^*, z_i),$$

где $z_i \in Z(\theta^*)$, $\lambda_i \geq 0$, $\lambda_1 + \dots + \lambda_{m+1} = 1$.

Таким образом,

$$\lambda_0 \int_X \varphi'_0(x, \theta^*) \xi^*(dx) + \sum_{i=1}^{m+1} \gamma_i g'_0(\theta^*, z_i) = 0, \quad (1.6)$$

где $\gamma_i = \lambda_1 \lambda_i \geq 0$, $\lambda_1 + \dots + \lambda_{m+1} = \lambda_{-1}$.

Пусть n – количество опорных точек плана ξ^* , k – количество элементов множества $\{i : \gamma_i \geq 0\}$. Тогда для (1.6) должно выполняться соотношение $n + k < m + 1$. Отсюда $n < m + 1 - k$. Понятно, что $n \geq 1$. Доказано следующее.

Утверждение 1. Для всякой выпуклой и дифференцируемой функции $\varphi(x, \theta)$ на множестве Ω для любого $x \in X$ в экстремальной задаче (1.3) всегда найдется такой план ξ^* , количество опорных точек которого $n < m + 1 - k$, где k – количество существенных ограничений в точке θ^* .

Пусть функция $\varphi(x, \theta)$ не удовлетворяет условиям выпуклости по θ и множество Ω также невыпукло, но имеет структуру (1.2).

Для экстремальной задачи

$$\Omega^* = \arg \inf_{\theta \in \Omega} \int_X \varphi(x, \theta) \xi^*(dx) \quad (1.7)$$

необходимые условия примут вид, аналогичный (6):

$$\lambda_0(\Omega^*) \int_X \varphi'_\theta(x, \theta^*) \xi^*(dx) + \sum_{i=1}^{k(\theta^*)} \gamma_i(\theta^*) g'_\theta(\theta^*, z_i(\theta^*)) = 0,$$

где $\gamma_i(\theta^*) \geq 0$, $k(\theta^*)$ – число существенных в точке θ^* ограничений,

$$\sum_{i=1}^{k(\theta^*)} \gamma_i(\theta^*) = \lambda_{-1}(\theta^*), \quad \theta^* \in \Omega^*.$$

Повторяя рассуждения, приведенные выше, и ограничиваясь случаем, когда Ω^* имеет число элементов, равное 1, приходим к соотношению

$$n + \sum_{\theta^* \in \Omega^*} k(\theta^*) \leq l^* m + 1.$$

Отсюда следует

Утверждение 2. Для всякой дифференцируемой на Ω функции $\varphi(x, \theta)$ для экстремальной задачи (1.7) всегда найдется план ξ^* , количество опорных точек которого

$$n \leq \min \left\{ \frac{m(m+1)}{2}, l^* m - \sum_{\theta^* \in \Omega^*} k(\theta^*) \right\} + 1.$$

Замечание. Очевидно, в качестве множества Z в (1.2) можно рассматривать конечное число индексов, а задачу (7) рассматривать как задачу математического программирования с конечным числом ограничений.

Необходимые условия, использованные выше для получения результатов о количестве опорных точек планов экспериментов, могут быть использованы для установления структуры весов опорных точек.

Вернемся к случаю, когда множество определено ограничениями вида (1.2). Введем понятие расширенного плана эксперимента. Расширенным планом эксперимента будем называть матрицу вида

$$\xi^* = \begin{bmatrix} x_1, \dots, x_n; & z_1, \dots, z_s \\ p_1, \dots, p_n; & q_1, \dots, q_s \end{bmatrix}, \quad (1.8)$$

где $n + s = m + 1$, $q_j = \lambda_j \lambda_{-1} / \lambda_0 \geq 0$, $q_j < \infty$, λ_j , λ_{-1} , λ_0 , z_j – определены в (1.6), $p_i \geq 0$, $p_1 + \dots + p_n = 1$. Будем предполагать, что $\{x_i\} (i=1, \dots, n)$, $\{z_j\} (j=1, \dots, s)$ известны. Установим структуру весов $\{p_i\} (i=1, \dots, n)$ и $\{q_j\} (j=1, \dots, s)$. С учетом введенных ограничений и предположений систему (1.6) можно переписать следующим образом:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n p_i \varphi'_\theta(x_i, \theta^*) + \sum_{j=1}^s q_j g'_\theta(\theta, z_j) = 0; \\ \sum_{i=1}^n p_i = 1, p_i \geq 0, i=1, \dots, n; q_j \geq 0, j=1, \dots, s. \end{cases} \quad (1.9)$$

Потребуем, чтобы квадратная матрица для системы (1.9) вида

$$\left| \begin{array}{ccc|ccc} \varphi_{\theta_1}(x_1, \theta^*) & \cdots & \varphi_{\theta_1}(x_n, \theta^*) & \varphi_{\theta_1}(\theta^*, z_1) & \cdots & \varphi_{\theta_1}(\theta^*, z_s) \\ \varphi_{\theta_m}(x_1, \theta^*) & \cdots & \varphi_{\theta_m}(x_n, \theta^*) & \varphi_{\theta_m}(\theta^*, z_1) & \cdots & \varphi_{\theta_m}(\theta^*, z_s) \\ \hline 1 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{array} \right| = \left| \begin{array}{c|c} A & B \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right|$$

удовлетворяла условию альтернанса и была невырождена. Это значит, что миноры вида

$$\Delta_i = \det(A_i | B), i = 1, \dots, n; \quad (1.10)$$

$$\delta_j = \det(A | B_j), j = 1, \dots, s,$$

должны иметь чередующиеся знаки, причем $\text{sign } \Delta_n = -\text{sign } \delta_1$, где A_i получается из A путем вычеркивания i -го столбца. Это условие гарантирует, что решение вида

$$p_i = (-1)^{i-1} \Delta_i / \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} \Delta_k, i = 1, \dots, n; \quad (11)$$

$$q_j = (-1)^{j-1} \delta_j / \sum_{k=1}^s (-1)^{k-1} \delta_k, j = 1, \dots, s,$$

удовлетворяет (1.9).

Рассмотрим теперь случай, когда множество Ω невыпукло. Пусть множество Ω^* , определенное в (7), имеет конечное число точек, равное l . Тогда необходимые условия в каждой точке $\theta \in \Omega^*$ можно записать следующим образом:

$$\sum_{i=1}^n p_i \varphi'_{\theta}(x_i, \theta^*) + \sum_{j=1}^{k(\theta^*)} q_j (\theta^*) g'_{\theta}(\theta^*, z_j(\theta_j)) = 0; \quad (1.12)$$

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1, p_i \geq 1, i = 1, \dots, n; \quad q_j(\theta^*) \geq 0, j = 1, \dots, k(\theta^*),$$

где

$$\theta^* \in \Omega^*, n + \sum_{\theta^* \in \Omega^*} k(\theta^*) = l * m + 1.$$

Рассмотрим квадратную матрицу, соответствующую системе (1.11):

$$C = \begin{bmatrix} A_1 & B_1 & 0 & \cdots & 0 \\ A_2 & 0 & B_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_l & 0 & 0 & \cdots & B_l \\ 1^T & 0^T & 0^T & \cdots & 0^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ 1^T & 0^T \end{bmatrix}, \quad (1.13)$$

где

$$A_i = \left\{ \varphi'_{\theta}(x_k, \theta^{*(i)}) \right\} (i = 1, \dots, l; k = 1, \dots, n);$$

$$B_j = \left\{ g'_\theta \left(\theta^*, z(\theta^{*(i)}) \right) \right\} \left(j = 1, \dots, l; \quad q = 1, \dots, k(\theta^{*(j)}) \right).$$

Потребуем, чтобы для матрицы C выполнялись условия невырожденности и альтернанса, аналогичные (1.10). Тогда решение системы (1.12) будет иметь вид, соответствующий (1.11).

Таким образом, структура весов опорных точек плана ξ^* установлена в предположении, что опорные точки заданы. Остается охарактеризовать множество опорных точек оптимального плана ξ^* . Эта характеристика дается в следующей теореме, которая справедлива в общем случае для экстремальной проблемы (1.1).

Утверждение 3. Если план ξ^* оптимальный, то существует такая вероятностная мера μ^* на Ω^* , что

$$\int_{\Omega X} \varphi(x, \theta^*) \xi^*(dx) \mu(d\theta^*) \leq \int_{\Omega} \varphi(x, \theta^*) \mu(d\theta^*) \quad \forall x \in X. \quad (1.14)$$

Равенство в (1.14) достигается на $X^* \subseteq X$, таких, что

$$\int_{X^*} \xi^*(dx) \geq 0. \quad (1.15)$$

Множество оптимальных планов выпукло.

Если план ξ неоптимален, то

$$\int_X \varphi(x, \theta(\xi)) \xi(dx) < \sup_{x \in X} \varphi(x, \theta(\xi)),$$

где

$$\theta(\xi) = \arg \inf_{\theta \in \Omega} \int \varphi(x, \theta) \xi(dx).$$

Таким образом, данная теорема характеризует множество опорных точек оптимального плана X^* как объединение всех подмножеств, отличных от множества меры нуль относительно ξ^* и для которых достигается равенство в (1.14). Поскольку выше были установлены результаты о количестве точек в оптимальном плане, то можно утверждать, что множество X^* , определенное в (1.15), является совокупностью конечного числа точек из X . Для расширенного плана ξ^* (см. (1.8)) опорные точки из множества Z есть элементы множества $\{z(\theta^*) : \theta^* \in \Omega^*\}$, где $z(\theta^*)$ определено в (1.5).

Пример 1. Покажем на примере критерия $\psi(\xi) = c^T M(\xi)c$, как полученные выше результаты могут быть использованы для установления структуры оптимального плана. Поскольку из [6] следует, что для задачи планирования эксперимента возможно представление в виде (1.1), где

$$\varphi(x, \theta) = \left[\theta^T f(x) \right]^2,$$

$$x \in X, \theta \in \Omega = \left\{ \theta : \left| c^T \theta \right| \geq 1 \right\},$$

то для нее применимы полученные выше результаты. Из содержания задачи следует, что экстремум в задаче

$$\theta^* = \arg \inf_{\theta \in \Omega} \int \left[\theta^T f(x) \right]^2 \xi(dx) \quad (1.16)$$

достигается на границе множества Ω , которая представляет из себя линейное многообразие. Следовательно, эту задачу можно рассматривать как задачу выпуклого программирования. Поскольку активное ограничение единственное, то из утверждения 2 следует, что всегда существует оптимальный план ξ^* , количество опорных точек которого не превосходит m , ну а поскольку меньше, чем m оно быть не может (иначе план будет вырожденным), то можно найти план ξ^* , количество опорных точек которого равно m . Установим теперь структуру весов точек оптимального плана в предположении тех условий, для которых справедливо (1.11):

$$\Delta_i = \det \begin{bmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_1(x_{i-1}) & f_1(x_{i+1}) & \dots & f_1(x_n) & | & c_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & | & \dots \\ f_m(x_1) & \dots & f_m(x_{i-1}) & f_m(x_{i+1}) & \dots & f_m(x_n) & | & c_m \end{bmatrix}.$$

Поскольку предполагается, что условие альтернанса выполнено, то можно записать

$$p_i = |\Delta_i| / \sum_{k=1}^m |\Delta_k|, i = \overline{1, n};$$

$$q_1 = |d_1| / \sum_{k=1}^m |\Delta_k|.$$

Известно [8], что для (16) $\theta^* = M^{-1}(\xi^*)c$. Тогда из утверждения 3 следует, что опорные точки оптимального плана образуют множество

$$X^* = \left\{ x : c^T M^{-1}(\xi^*)c = c^T M^{-1}(\xi^*)f(x)f^T(x)M^{-1}(\xi^*)c \right\}.$$

Покажем теперь, что на множестве X условие альтернанса будет выполнено. Действительно, поскольку для Ω^* условия (9) выполняются и существует оптимальный план, то имеет место (11). Так как все $p_i \geq 0$ и $q_j \geq 0$, то это будет справедливо только в этом случае, если миноры Δ_i будут иметь чередующиеся знаки.

Заметим, что приведенные рассуждения справедливы и в общем случае. Таким образом, справедливо

Утверждение 4. На множестве опорных точек оптимального плана ξ^* для (1.1) имеет место альтернанс в смысле данного выше определения.

2. Численные методы

Рассмотрим класс задач планирования регрессионных экспериментов, характеризуемый функционалом вариационного типа

$$V(\xi) = \inf_{\theta \in \Omega} \int_X \varphi(x, \theta) \xi(dx). \quad (2.1)$$

План

$$\xi^* = \arg \sup_{\xi} V(\xi) \quad (2.2)$$

будем называть V -оптимальным.

Пусть множество

$$\Omega = \{\theta : g_i(\theta) \leq 0, i = 1, \dots, k\}$$

удовлетворяет обобщенному условию Слейтера [9]. Введем множество индексов

$$J(\theta) = \{j : g_j(\theta) = 0\}.$$

Потребуем дополнительное условие выпуклости для множества Ω и выпуклости вниз для функции $\varphi(\cdot, \theta)$ на Ω . Кроме того пусть множества X и Ω будут компактными. Тогда согласно общим результатам теории игр [11] для можно записать двойственную экстремальную проблему:

$$(\Omega^*, X^*) = \text{Arg min}_{x \in X} \max_{\theta \in \Omega} \varphi(x, \theta). \quad (2.3)$$

Очевидно, множество

$$X^* = \left\{x : \varphi(x, \theta) = \max_{x \in X} \varphi(x, \theta), \theta \in \Omega^*\right\}$$

является экстремальным базисом.

Приведение задачи (2.1) к (2.3) позволяет рассматривать синтез оптимального плана как совокупность двух задач:

- отыскание экстремального базиса X^* ;
- вычисление весов спектра плана ξ^* .

Среди многообразия методов решения непрерывных минимаксных задач типа (2.3) заслуживает внимания метод экстремального базиса (МЭБ) [9]. Суть этого метода сводится к последовательному уточнению некоторого начального базиса. При этом решение непрерывной максимальной задачи заменяется последовательностью решений дискретных минимаксных задач. Процедура, реализующая этот метод применительно к проблеме синтеза плана эксперимента, включает следующие шаги.

1. задается начальный базис

$$X^{(s)} = \{x_i\}_{i=1}^{m+2}, (s = 0),$$

где $m = \dim \Omega$.

2. Решается дискретная минимаксная задача

$$\theta^{(s)} = \arg \min_{\theta \in \Omega} \max_{x \in X^{(s)}} \varphi(x, \theta).$$

3. Решается экстремальная задача

$$x^{(s)} = \arg \max_{x \in X} \varphi(x, \theta^{(s)}).$$

4. Проверяется условие экстремальности базиса. Если

$$\min_{x \in X^{(s)}} \left| \varphi(x, \theta^{(s)}) - \varphi(x^{(s)}, \theta^{(s)}) \right| \leq \delta$$

для заданного положительного δ , то перейти к пункту 6, иначе к пункту 5.

5. Строится новый базис путем модификации старого:

$$X^{(s+1)} = (X^{(s)} / \bar{x}^{(s)}) \cup \{x^{(s)}\},$$

где

$$\bar{x}^{(s)} = \arg \min_{x \in X^{(s)}} \varphi(x, \theta^{(s)}).$$

Положить $s = s + 1$ и перейти к пункту 2 процедуры.

6. План эксперимента есть $\xi^{(s)} = (X^{(s)}, P^{(s)})$, где $P^{(s)}$ есть решение линейной системы уравнений:

$$\begin{cases} A * P^{(s)} = 0; \\ 1 * P^{(s)} = 1. \end{cases} \quad (2.4)$$

$$A = \left[\frac{d\varphi(x, \theta)}{d\theta} \mid \frac{dg_j(\theta)}{d\theta} \right]_{x \in X^{(s)}, j = s(\theta^{(s)})}, \quad k(\theta^{(s)}),$$

где $s(\theta^{(s)})$ – множество номеров существенных ограничений.

Сходимость данной процедуры непосредственно следует из доказанной в [9] сходимости метода экстремального базиса при условии сильной выпуклости функции $\varphi(\bullet, \theta)$ на Ω .

Замечание 1. Необходимость в пункте 6 процедуры может отпасть, если в качестве метода решения дискретной минимаксной задачи пункта 2 использовать метод наискорейшего спуска [7], поскольку при выборе направления наискорейшего спуска все равно приходится вычислять $P^{(s)}$.

Замечание 2. Если рассмотреть задачу без ограничений и предположить, что $\Omega = R^m$, то можно увидеть точную связь между теорией чебышевской аппроксимации и теорией оптимального планирования экспериментов, поскольку оказывается, что веса точек оптимального плана эксперимента в (2.4) являются коэффициентами представления 0-вектора через систему векторов, составляющих столбцы матрицы A . При этом достаточным условием существования экстремального базиса является условие, состоящее в том, чтобы вектор-функция являлась чебышевской системой функций [10].

Замечание 3. Пусть

$$\varphi(x, \theta) = \left[\left(\eta(x) - f^T(x)\theta \right) \right]^2,$$

т. е. рассматривается аппроксимация функции $\eta(x)$ линейным параметрическим семейством $f^T(x)\theta$, где $f(x)$ – вектор базисных функций. В этом случае матрица A соответствует с точностью до постоянного множителя семейству базисных функций, вычисленных в точках плана эксперимента (в точках экстремального базиса). Для неоптимального плана направление наискорейшего спуска выбирается таким

образом, чтобы минимизировать расстояние от 0-вектора до выпуклой линейной оболочки, образованной столбцами матрицы A .

Пример 2. Пусть

$$\varphi(x, \theta) = \{\eta_t(x) - \eta(x, \theta)\}^2,$$

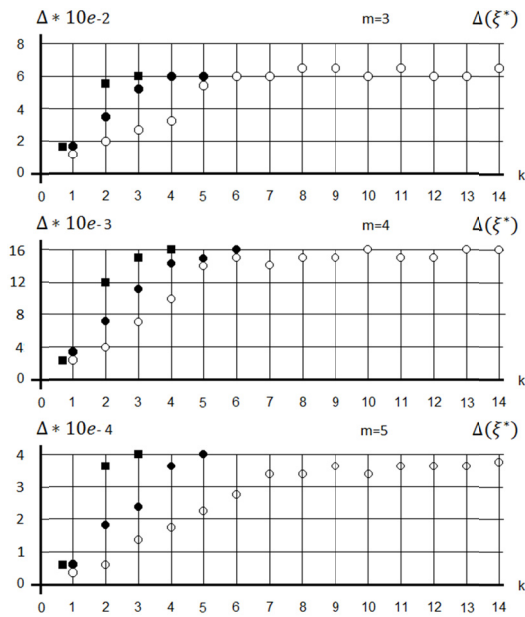
где $\eta_t(x) = x^m$,

$$\eta(x, \theta) = \sum_{i=1}^m x^{i-1} \theta_i, \quad X \in [-1; 1].$$

Это есть задача дискриминации модели η_t против $\eta(x, \theta)$. Для данного примера аналитическими методами можно построить V -оптимальный план эксперимента для всякого $m > 1$:

$$\xi^* = \begin{bmatrix} x_1 = -1 & \dots & x_i = \cos[(m-i+1)/m]\pi & \dots & x_{m+1} = 1 \\ p_1 = \frac{1}{2m} & \dots & p_i = \frac{1}{m} & \dots & p_{m+1} = \frac{1}{2m} \end{bmatrix}.$$

Используем этот результат для исследования сходимости приведенных процедур и сравним их с типичным двойственным алгоритмом численного построения оптимальных планов экспериментов [2]. Сравнивались три алгоритма (см. рисунок).



Сравнение процедур синтеза V -оптимальных планов экспериментов для примера 2.1:

- – алгоритм экстремального базиса с заменой одной точки; ■ – с заменой двух точек, ○ – последовательный алгоритм планирования эксперимента

Comparison synthesis procedures optimum V -plans experiments for Example 2.1:

- – algorithm extreme base with the replacement of a single point; ■ – the replacement of two points, ○ – sequential algorithm design of experiments

Заключение

Приведенные в данной работе результаты позволяют сделать следующие выводы:

- а) наиболее важные критерии оптимальности допускают вариационное представление;
- б) вариационное представление критериев оптимальности во многом является полезным. В частности, возможно использовать достаточно эффективные численные методы построения экстремального базиса для минимаксных задач;
- в) необходимые условия оптимальности для обобщенного вариационного критерия можно привести к так называемым условиям альтернанса. Условия альтернанса активно используются в теории чебышевской аппроксимации. Они просты в интерпретации;
- г) в связи с введением понятия квазидифференциал, появилась удобное геометрическое представление условий оптимальности. В частности, для задач с ограничениями субградиент должен пересекаться с конусом возможных направлений;
- д) возникает ряд интересных направлений для поиска новых процедур поиска планов экспериментов с использованием квазидифференциалов. В частности требуют исследования многоточечные модификации метода экстремального базиса.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Налимов В.В.** Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 208 с.
2. **Федоров В.В.** Теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 312 с.
3. **Денисов В.И.** Математическое обеспечение системы «ЭВМ-экспериментатор» (регрессионный и дисперсионный анализы). – М.: Наука, 1977. – 251 с.
4. Математическая теория планирования эксперимента / под ред. С.М. Ермакова. – М.: Наука, 1983. – 392 с.
5. **Денисов В.И., Федоров В.В., Хабаров В.И.** Чебышевская аппроксимация в задачах построения асимптотических локально-оптимальных планов дискриминирующих экспериментов // Вопросы кибернетики. – 1981. – № 71. – С. 3–10.
6. **Fedorov V., Khabarov V.** Duality of optimal design for model discrimination and parameter estimation // *Biometrika*. – 1986. – Vol. 73, iss. 1. – P. 183–190. – doi.: 10.1093/biomet/73.1.183.
7. **Демьянов В.Ф., Васильев Л.В.** Недифференцируемая оптимизация. – М.: Наука, 1981. – 384 с.
8. **Рао С.Р.** Линейные статистические методы и их применение. – М.: Наука, 1968. – 548 с.
9. **Демьянов В.Ф., Малоземов В.Н.** Введение в минимакс. – М.: Наука, 1972. – 368 с.
10. **Карлин С., Стадден В.** Чебышевские системы и их применение в анализе и статистике. – М.: Наука, 1976. – 568 с.
11. **Блекуэлл Д., Гиршик М.А.** Теория игр и статистических решений: пер. с англ. – М.: Иностранная литература, 1958. – 374 с.

QUASIDIFFERENTIALS IN EXPERIMENT DESIGN PROBLEMS

Khabarov V.I.¹¹*Siberian State Transport University*²*Novosibirsk State Technical University*

An approach to the problem of designing regression experiment plans in terms of nondifferentiable optimization is considered. The task of planning experiments for a number of known optimality criteria is reduced to some extremal problem with a rough criterion function and in a general case with a continuum of restrictions. Such a problem is an object of the theory of mathematical programming with quasidifferentiable functions. Currently this theory is quite well developed. It is advisable to use the results of this theory for designing regression experiment plans. It makes it possible to determine the structure of optimum plans and to propose effective algorithms of designing these plans using methods of extremal basis construction. The structure of quasidifferentials allows constructing a probability measure on the extremal basis which can be treated as an experiment plan. Another advantage of this approach is a possibility to refuse difficult functionalities based on the Fischer information matrix. The efficiency of the proposed approach illustrated by examples is shown. The results are of a rather general character and can be applied to different regression models both in static, and in dynamic setting.

Keywords: regression, experiment plan, optimality criterion, quasidifferential, subgradient, extremal basis.

REFERENCES

1. Nalimov V.V. *Teoriya eksperimenta* [The theory of experiment]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 208 p.
2. Fedorov V.V. *Teoriya optimal'nogo eksperimenta* [Theory of optimal experiments]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 312 p.
3. Denisov V.I. *Matematicheskoe obespechenie sistemy "EVM-eksperimentator" (regressionnyi i dispersionnyi analizy)* [Mathematical software system "computer-experimenter" (regression and analysis of variance)]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 251 p.
4. Ermakov C.M., ed. *Matematicheskaya teoriya planirovaniya eksperimenta* [Mathematical theory of experiment planning]. Moscow, Nauka Publ., 1983. 392 p.
5. Denisov V.I., Fedorov V.V., Khabarov V.I. Chebyshevskaya approksimatsiya v zadachakh postroyeniya asimptoticheskikh lokal'no-optimal'nykh planov diskriminiruyushchikh eksperimentov [Chebyshev approximation in problems of constructing asymptotic locally optimal designs discriminating experiments]. *Voprosy kibernetiki – Problems of Cybernetics*, 1981, no. 71, pp. 3–10.
6. Fedorov V., Khabarov V. Duality of optimal design for model discrimination and parameter estimation. *Biometrika*, 1986, vol. 73, iss. 1, pp. 183–190. doi.: 10.1093/biomet/73.1.183
7. Dem'yanov V.F., Vasil'ev L.V. *Nedifferentsiruemaya optimizatsiya* [Nondifferentiable optimization]. Moscow, Nauka Publ., 1981. 384 p.
8. Rao S.R. *Lineinye statisticheskie metody i ikh primeneniye* [Linear statistical methods and its application]. Moscow, Nauka Publ., 1968. 548 p.
9. Dem'yanov V.F., Malozemov V.N. *Vvedeniye v minimaks* [Introduction to Minimax]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 368 p.
10. Karlin S., Studden V. *Chebyshevskie sistemy i ikh primeneniye v analize i statistike* [Chebyshev systems and their application in analysis and statistics]. Moscow, Nauka Publ., 1976. 568 p.
11. Blackwell D., Girshick M.A. *Theory of games and statistical decisions*. New York, Springer-Verlag, 1954 (Russ. ed.: Blekuell D., Girshik M.A. *Teoriya igr i statisticheskikh reshenii*. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1958. 374 p.).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Хабаров Валерий Иванович – родился в 1951 году, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой информационных технологий на транспорте, декан факультета «Бизнес-информатика» Сибирского государственного университета путей сообщения, профессор кафедры теоретической и прикладной информатики Новосибирского государственного технического университета. Академик академии транспорта РФ, член-корреспондент АН ВШ РФ. Область научных интересов: обработка данных, планирование экспериментов, математическое моделирование транспортных систем, искусственный интеллект. Опубликовано 103 научных работы. (Адрес: 630049, РФ, Новосибирск, Д. Ковальчук 185/1-82, дом. Email: khabarov51@mail.ru).

Khabarov Valeriy Ivanovich (b. 1951) – D. Sc. (Eng.), professor, information technologies in transport department, head; faculty of business information science, dean, Siberian State Transport University; professor at the department of theoretical and applied informatics, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on data processing, experiment design, mathematical simulation of transport systems, and artificial intelligence. He is author of 103 scientific papers. (Address: 185/1-82 D. Kovalchuk Street, Novosibirsk, 630049, Russian Federation Email: khabarov51@mail.ru).

Статья поступила 11 декабря 2014 г.

Received December 11, 2014

To Reference:

Khabarov V.I. Kvazidifferentsialy v zadachakh planirovaniya eksperimentov [Quasidifferentials in experiment design problems]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2014, no. 4, pp. 124–136.