МАТЕМАТИКА

УДК 524.19
MSC 62K05

Построение c-оптимальных планов для полиномиальной регрессии без свободного члена*

В. Б. Мелас, П. В. Шпилев

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

Для цитирования: *Мелас В. Б., Шпилев П. В.* Построение c-оптимальных планов для полиномиальной регрессии без свободного члена // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2020. Т. 7 (65). Вып. 2. С. 331–342. https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2020.215

Данная работа посвящена задаче построения c-оптимальных планов для полиномиальной регрессии без свободного члена. Рассматривается частный случай $c = f'(z)$ (т. е. в качестве вектора c выбирается вектор производных регрессионных функций в некоторой точке z). Дается краткий обзор аналитических результатов, имеющихся в литературе. Предлагается эффективный численный метод для нахождения $f'(z)$-оптимальных планов в тех случаях, когда аналитическое решение построить не удается.

Ключевые слова: c-оптимальные планы, $f'(z)$-оптимальные планы, планы, оптимальные для оценивания производной, полиномиальная регрессия без свободного члена.

1. Введение. В литературе по планированию эксперимента наиболее изученными являются оптимальные планы для линейных по параметрам регрессионных моделей (см. [1–3]). В частности, большое число исследователей рассматривало полиномиальную регрессионную модель. Для этой модели получено множество красивых аналитических решений (для различных критериев оптимальности). В значительной части работ (начиная с пионерской работы [4]) рассматривались критерии, связанные с так называемым D-критерием, т. е. с критерием детерминантного типа и с различными его вариациями (см. [5–8]). Также получен ряд аналитических результатов для E-критерия, максимизирующего минимальное собственное число информацион-

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-01-00096-а).

ной матрицы плана (см. [1, 9, 10]). Задача построения E-оптимального плана наиболее исследована для случая, когда кратность минимального собственного числа равна единице (см. [11]). Достаточно полное описание задачи c-оптимального планирования (то есть задачи построения планов с минимальной дисперсией оценки линейной комбинации параметров) для регрессионных моделей с базисными функциями, образующими систему Чебышёва, может быть найдено в пионерской статье [12]. Но уже в данной статье было отмечено, что в общем случае решение задачи c-оптимального планирования является чрезвычайно трудным. По этой причине явные решения данной задачи, как правило, удается получить только для моделей с небольшим числом параметров, с помощью геометрических интерпретаций и теоремы Элвинга (см. [13]). Поэтому аналитические решения подобной задачи для моделей с произвольным числом параметров представляют значительный практический и теоретический интерес. Существует несколько классов задач c-оптимального планирования, связанных с выбором вектора c и имеющих особое значение. В частности, выделяют случай, когда в качестве вектора c выбирается вектор производных регрессионных функций в некоторой точке. В этом случае c-оптимальный план принято называть планом, оптимальным для оценивания производной. Задача построения планов, оптимальных для оценивания производной, хорошо изучена (см. [14–22]).

Несмотря на значительный интерес, проявленный к данной проблеме, для модели полиномиальной регрессии без свободного члена вышеупомянутые задачи до недавнего времени не исследовались. В работе [23] для этой модели и планов, оптимальных для оценивания производной, был получен ряд аналитических результатов. Однако, как оказалось, аналитически построить оптимальный план удается не во всех случаях. В настоящей работе дается обзор аналитических результатов и предлагается эффективный численный метод для нахождения c-оптимальных планов.

2. Постановка задачи. Рассмотрим линейную полиномиальную регрессионную модель без свободного члена

$$Y = \theta^\top f(x) + \varepsilon, \quad x \in \mathcal{X}, \tag{1}$$

где $f(x) = (f_1(x), \ldots, f_d(x))^\top = (1, x, \ldots, x^d)^\top$ — вектор регрессионных функций, $\theta \in \mathbb{R}^d$ — вектор неизвестных параметров, а ε — случайная ошибка с нормальным распределением, нулевым средним и конечной дисперсией $\sigma^2 > 0$, причем результаты различных экспериментов предполагаются независимыми. Будем также предполагать, что множество $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}$ компактно. Под планом ξ понимается вероятностная мера на множестве $\mathcal{X}$

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & \ldots & x_m \\ \omega_1 & \ldots & \omega_m \end{pmatrix}, \quad x_i \in \mathcal{X}, \quad i = 1, 2, \ldots, m, \tag{2}$$

с конечным носителем и распределением весов, определяющим относительные доли общего числа наблюдений, проводимых в соответствующих точках [24]. Веса ω_i удовлетворяют условиям $\omega_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^m \omega_i = 1$. Ковариационная матрица МНК-оценки вектора параметров θ приблизительно равна

$$\frac{\sigma^2}{m} M^{-1}(\xi).$$

Матрицу

$$M(\xi) = \left(\int_{\mathcal{X}} f(t) f^T(t) d\xi(t) \right) \in R^{d \times d}$$

в литературе принято называть информационной матрицей Фишера (см., например, [25]). В данной работе для заданного вектора $c \in \mathbb{R}^d$ мы будем рассматривать c-оптимальные планы, т. е. планы, доставляющие минимум следующей функции:

$$\Phi_c(\xi) = \begin{cases} c^\top M^-(\xi) c, & \text{если существует вектор } v \in \mathbb{R}^n \text{ такой, что } c = M(\xi) v, \\ \infty, & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{3}$$

В случае, если функция $\Phi_c(\xi)$ принимает конечное значение для некоторого плана ξ, то данный план называется допустимым для оценивания линейной комбинации $c^\top \theta$ для регрессионной модели (1). Для допустимых планов значение квадратичной формы не зависит от выбора обобщенно-обратной матрицы $M^-(\xi)$ (см., например, [24]).

Настоящая работа посвящена исследованию специального случая $c^\top = (f_1'(z), \ldots, f_d'(z))$ для некоторого $z \in \mathbb{R}$. В этом случае c-оптимальный план принято называть планом, оптимальным для оценивания производной в точке z, или $f'(z)$-оптимальным планом.

Полезным инструментом для проверки заданного плана на оптимальность является теорема Элвинга (см. [13]), которую мы будем использовать в следующей, слегка измененной формулировке (см. [26]):

Теорема 2.1. *Допустимый план*

$$\xi^* = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \ldots & x_m \\ \omega_1 & \omega_2 & \ldots & \omega_m \end{pmatrix}$$

для оценивания линейной комбинации $c^\top \theta$ является c-оптимальным тогда и только тогда, когда существует вектор $p \in \mathbb{R}^d$ и константа h, удовлетворяющие следующим условиям:

(1) $|p^\top f(x)| \le 1$ для всех $x \in \mathcal{X}$;

(2) $|p^\top f(x_i)| = 1$ для всех $i = 1, 2, \ldots, m$;

(3) $c = h \sum_{i=1}^m f(x_i) \omega_i p^\top f(x_i)$.

При этом имеет место равенство $c^\top M^-(\xi^*) c = h^2$.

Функцию $p^\top f(x)$ принято называть *экстремальным многочленом.*

3. Аналитические результаты. Данный раздел посвящен обзору аналитических результатов, полученных в работе [23]. Для модели (1) на интервале $[-1, 1]$ рассматривается задача построения $f'(z)$-оптимальных планов ($f'(z) = (1, 2z, \ldots, nz^{n-1})^\top$) в некоторой заданной точке $z \in \mathbb{R}$.

Следующая теорема определяет общую структуру $f'(z)$-оптимального плана.

Теорема 3.1. *Для полиномиальной модели* (1) *степени n без свободного члена оптимальный план для оценивания производной имеет $m = n$ или $m = n - 1$ точек носителя $t_1^*, \ldots, t_m^*$. Веса определяются по следующей формуле:*

$$\omega_i = \frac{|\bar{L}_i'(z)|}{\sum_{j=1}^m |\bar{L}_j'(z)|}\ , \ i = 1, \ldots, m, \tag{4}$$

где $\bar{L}_1, \ldots, \bar{L}_m$ — интерполяционные полиномы Лагранжа без свободного члена, построенные по точкам $t_1^*, \ldots, t_m^*$:

$$\bar{L}_i(z) = \frac{z \prod_{j \neq i}(z - t_j^*)}{t_i^* \prod_{j \neq i}(t_i^* - t_j^*)}, \tag{5}$$

а $\bar{L}_i'$ — производные функций $\bar{L}_i$.

Как будет показано в следующих подразделах, вид оптимального плана зависит от того, является степень модели (n) четной или нечетной.

3.1. Оптимальные планы для оценивания производной. Случай нечетной степени $n = 2k + 1$. При $k = 0$ ($n = 1$) оптимальный план имеет вид (оптимальность следует непосредственно из теоремы Элвинга)

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \omega & 1 - \omega \end{pmatrix}, \quad \omega \in [0, 1].$$

При $k > 0$ ($n > 1$) ситуация значительно сложнее. Обозначим за $s_{i,l}$ экстремальные точки многочлена Чебышёва $T_l(x) = \cos(l \arccos x)$ первого рода:

$$s_{i,l} = \cos(\tfrac{(l+1-i)\pi}{l}) \ , \quad i = 1, \ldots, l + 1. \tag{6}$$

Обозначим за $\xi_j^{(s)}$ план, сосредоточенный в $l = 2k+1$ точках: $\{s_{1,2k+1}, \ldots, s_{2k+2,2k+1}\} \setminus \{s_{j,2k+1}\}$. Рассмотрим следующие функции:

$$R_1(x) = \left(\frac{x(x+1)U_{2k}(x)}{x - s_{k+1,2k+1}}\right)', \qquad R_2(x) = \left(\frac{x(x-1)U_{2k}(x)}{x - s_{k+2,2k+1}}\right)', \tag{7}$$

$$R_3(x) = \left(\frac{x(x-1)U_{2k}(x)}{x - s_{k+1,2k+1}}\right)', \qquad R_4(x) = \left(\frac{x(x+1)U_{2k}(x)}{x - s_{k+2,2k+1}}\right)', \tag{8}$$

где $U_{2k}(x) = \frac{\sin((2k+1)\arccos x)}{\cos(\arccos x)}$ — полиномы Чебышёва второго рода. Пусть

$$\nu_1 < \nu_2 < \cdots < \nu_{2k}, \qquad \mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_{2k}, \tag{9}$$

$$\rho_1 < \rho_2 < \cdots < \rho_{2k}, \qquad \tau_1 < \tau_2 < \cdots < \tau_{2k} \tag{10}$$

— корни функций $R_i(x)$, $i = 1, \ldots, 4$. Имеет место следующая теорема.

Теорема 3.2. *Для полиномиальной регрессионной модели порядка $n = 2k + 1$, $k \geq 1$ на интервале $[-1, 1]$ $f'(z)$-оптимальный план сосредоточен не более, чем в $2k + 1$ опорных точках из множества $\{s_{1,2k+1}, \ldots, s_{2k+2,2k+1}\}$ тогда и только тогда, когда $z \in \cup_{i=1}^{2k+1} A_i$, где множества A_i определяются как $A_i = (-\nu_{2k+2-i}, \nu_i)$, $i = 1, \ldots, 2k + 1$. При этом*

(1) План $\xi_1^{(s)}$ является оптимальным тогда и только тогда, когда z принадлежит одному из интервалов $(\mu_i, \rho_i), i = 1, \ldots, 2k$. Если $z = \rho_i, i = 1, \ldots, 2k$ оптимальный план сосредоточен в $2k$ точках:

$$s_{2,2k+1}, \ldots, s_{k,2k+1}, s_{k+2,2k+1}, \ldots, s_{2k+2,2k+1}$$

с весами, определенными в (4).

(2) *План* $\xi_{k+1}^{(s)}$ *является оптимальным тогда и только тогда, когда* z *принадлежит одному из интервалов* $(-\infty, \nu_1), (\rho_{2k}, \infty)$ *или* (ρ_i, ν_{i+1}), $i = 1, \ldots, 2k-1$. *Если* $z = \nu_i, i = 1, \ldots, 2k$ *оптимальный план сосредоточен в* $2k$ *точках:*

$$s_{1,2k+1}, \ldots, s_{k,2k+1}, s_{k+2,2k+1}, \ldots, s_{2k+1,2k+1}$$

с весами, определенными в (4).

(3) *План* $\xi_{k+2}^{(s)}$ *является оптимальным тогда и только тогда, когда* z *принадлежит одному из интервалов* $(-\infty, \tau_1)$, (μ_{2k}, ∞) *или* $(\mu_i, \tau_{i+1}), i = 1, \ldots, 2k-1$. *Если* $z = \mu_i, i = 1, \ldots, 2k$ *оптимальный план сосредоточен в* $2k$ *точках:*

$$s_{2,2k+1}, \ldots, s_{k+1,2k+1}, s_{k+3,2k+1}, \ldots, s_{2k+2,2k+1}$$

с весами, определенными в (4).

(4) *План* $\xi_{2k+2}^{(s)}$ *является оптимальным тогда и только тогда, когда* z *принадлежит одному из интервалов* $(\tau_i, \nu_i), i = 1, \ldots, 2k$. *Если* $z = \tau_i, i = 1, \ldots, 2k$ *оптимальный план сосредоточен в* $2k$ *точках:*

$$s_{1,2k+1}, \ldots, s_{k+1,2k+1}, s_{k+3,2k+1}, \ldots, s_{2k+1,2k+1}$$

с весами, определенными в (4).

Пример 3.1. Проиллюстрируем, как работает теорема 3.2 на примере кубической регрессионной модели ($k = 1$) без свободного члена. В этом случае точки, определенные в (6), равны $\{-1, -1/2, 1/2, 1\}$, а корни функций $R_i(x)$, $i = 1, 2, 3, 4$, будут следующими:

$$\nu_1 = -0.608\ , \quad \nu_2 = 0.274\ , \quad \mu_1 = -0.274\ , \quad \mu_2 = 0.608\ ,$$
$$\rho_1 = 0.211\ , \quad \rho_2 = 0.789\ , \quad \tau_1 = -0.789\ , \quad \tau_2 = -0.211.$$

Значит, в силу теоремы 3.2 $f'(z)$-оптимальный план сосредоточен в трех из четырех точек $\{-1, -1/2, 1/2, 1\}$ тогда и только тогда, когда

$$z \in (-\infty, -0.608) \cup (-0.274, 0.274) \cup (0.608, \infty).$$

(1) Оптимальный план сосредоточен в точках $\{-1/2, 1/2, 1\}$, если

$$z \in (\mu_1, \rho_1) \cup (\mu_2, \rho_2) \approx (-0.274, 0.211) \cup (0.608, 0.789).$$

(2) Оптимальный план сосредоточен в точках $\{-1, 1/2, 1\}$, если

$$z \in (-\infty, \nu_1) \cup (\rho_1, \nu_2) \cup (\rho_2, \infty) \approx (-\infty, -0.608) \cup (0.211, 0.274) \cup (0.789, \infty).$$

(3) Оптимальный план сосредоточен в точках $\{-1, -1/2, 1\}$, если

$$z \in (-\infty, \tau_1) \cup (\mu_1, \tau_2) \cup (\mu_2, \infty) \approx (-\infty, -0.789) \cup (-0.274, -0.211) \cup (0.608, \infty).$$

(4) Оптимальный план сосредоточен в точках $\{-1, -1/2, 1/2\}$, если

$$z \in (\tau_1, \nu_1) \cup (\tau_2, \nu_2) \approx (-0.789, -0.608) \cup (-0.211, 0.274).$$

Веса оптимального плана определяются по формуле (4).

3.2. Оптимальные планы для оценивания производной. Случай четной степени. В этом подразделе мы дадим обзор аналитических результатов для полиномиальной модели четной степени $n = 2k$ без свободного члена.

Рассмотрим точки

$$x_i^* = -\sqrt{\frac{\cos\frac{(i-1)\pi}{k} + \cos\frac{\pi}{2k}}{1+\cos\frac{\pi}{2k}}}\ ,\ x_{2k+1-i}^* = \sqrt{\frac{\cos\frac{(i-1)\pi}{k} + \cos\frac{\pi}{2k}}{1+\cos\frac{\pi}{2k}}}\ ,\quad i = 1, \ldots, k, \qquad (11)$$

являющиеся точками экстремума полинома

$$P(x) = T_k\left(x^2\left(1+\cos\frac{\pi}{2k}\right) - \cos\frac{\pi}{2k}\right). \qquad (12)$$

Введем функции

$$\begin{aligned} Q_1(x) &= x(x+1)\prod_{\ell=2}^{2k-1}(x - x_\ell^*) = x(x+1)P'(x), \\ Q_2(x) &= x(x^2-1)\prod_{\ell=2,\ell\neq k}^{2k-1}(x - s_{\ell,2k-1}), \end{aligned}$$

где точки $s_{i,j}$ определены в (6) при $l = 2k-1$. Обозначим за $\nu_1 < \nu_2 < \cdots < \nu_{2k-1}$ и $\rho_1 < \rho_2 < \cdots < \rho_{2k-1}$ корни производных функций $Q_1(x)$ и $Q_2(x)$ и определим следующие множества:

$$B \;=\; \cup_{i=0}^{2k-1}(-\nu_{2k-i}, \nu_{i+1}), \qquad C = \cup_{i=1}^{2k-1}(-\rho_{2k-i}, \rho_i). \qquad (13)$$

Справедлива следующая теорема.

Теорема 3.3.

(1) Для полиномиальной регрессии четной степени $2k \geq 2$ без свободного члена существует и единственный $f'(z)$-оптимальный план, сосредоточенный в точках $x_1^*, \ldots x_{2k}^*$, определенных в (11), тогда и только тогда, когда $z \in B$.

(2) Для полиномиальной регрессии четной степени $2k \geq 2$ без свободного члена существует и единственный $f'(z)$-оптимальный план, сосредоточенный в точках экстремума $s_{1,2k-1}, s_{2,2k-1}, \ldots, s_{2k,2k-1}$ полинома Чебышёва $T_{2k-1}(x)$ первого рода, тогда и только тогда, когда $z \in C$.

Веса оптимального плана определяются по формуле (4) при $m = 2k$.

Пример 3.2. Рассмотрим случай $n = 4$. Существует единственный $f'(z)$-оптимальный план, сосредоточенный в точках $-1, -0.6436, 0.6436, 1$, тогда и только тогда, когда z принадлежит одному из интервалов

$$(-\infty, -0.8503),\ (-0.4027, -0.3023),\ (0.3023, 0.4027),\ (0.8503, \infty).$$

В случае, если z принадлежит одному из интервалов

$$(-0.804, -0.663), (-0.235, 0.235), (0.663, 0.804),$$

существует единственный $f'(z)$-оптимальный план, сосредоточенный в точках $1, -0.5,\ 0.5, 1$. Веса этих оптимальных планов определяются по формуле (4) при $m = 4$.

Доказательство рассмотренных в этом разделе теорем и дополнительные детали могут быть найдены в работе [23]. В следующем разделе мы предложим алгоритм, который позволяет численно находить оптимальные планы в тех случаях, когда аналитически их построить не удается.

4. Численное построение $f'(z)$-оптимальных планов. В общем случае существует несколько подходов к задаче построения оптимальных планов. Например, можно использовать методы, основанные на универсальных алгоритмах, таких как алгоритм Нелдера — Мида. Другой подход заключается в построении последовательных приближений, как, например, предлагается в процедуре Федорова — Уинна (см. [27]). Но в случае, если оптимальный план вырожденный (т. е. число точек его носителя меньше числа параметров модели), данные подходы могут оказаться неэффективными. В значительной степени это связано с тем, что информационная матрица плана, близкого к вырожденному, является плохо обусловленной. В данном разделе мы предлагаем альтернативный эффективный подход, основанный на использовании теоремы 2.1 и аналитических результатов, представленных в предыдущем разделе. Обозначим за ξ_l^*, ξ_r^* следующие планы:

$$\xi_l^* = \begin{pmatrix} t_1^{(l)} & t_2^{(l)} & \dots & t_n^{(l)} \\ \omega_1^{(l)}(z) & \omega_2^{(l)}(z) & \dots & \omega_n^{(l)}(z) \end{pmatrix}, \quad \xi_r^* = \begin{pmatrix} t_1^{(r)} & t_2^{(r)} & \dots & t_n^{(r)} \\ \omega_1^{(r)}(z) & \omega_2^{(r)}(z) & \dots & \omega_n^{(r)}(z) \end{pmatrix}.$$

Вот псевдокод нашего алгоритма:

Шаг 1. Выбираем вектор $c(z) = (1, 2z, ...nz^{n-1})^T$.

Шаг 2. Проверяем, принадлежит ли z интервалу, на котором существует аналитическое решение. Если «да», переходим к шагу 4.

Шаг 3. Пусть $z \in [a, b]$, где a и b — ближайшие границы интервалов, на которых аналитическое решение существует. Пусть ξ_l^* и ξ_r^* — соответствующие аналитические решения (для левого и правого смежных интервалов). Как следует из доказательства теорем 3.2, 3.3 (см. [23]), существуют $s_1, s_2 \in \{1, \dots, n\}$ такие, что $\omega_{s_1}^{(l)}(a)\omega_{s_2}^{(r)}(b) = 0$. Обозначим за v^{s_1} и v^{s_2} векторы

$$(P_l(t_1^{(l)}), \dots, P_l(t_{s_1-1}^{(l)}), P_l(t_{s_1+1}^{(l)}), \dots, P_l(t_n^{(l)}))^\top,$$

и

$$(P_r(t_1^{(r)}), \dots, P_r(t_{s_2-1}^{(r)}), P_r(t_{s_2+1}^{(r)}), \dots, P_r(t_n^{(r)}))^\top,$$

где $P_l(t), P_r(t)$ — экстремальные многочлены планов ξ_l^* и ξ_r^* соответственно. Находим оптимальный план ξ^*, как решение одной из двух систем уравнений при дополнительных ограничениях $|p^\top f(x)| \le 1$ для всех $x \in [-1, 1]$:

$$\begin{cases} p^\top f(x_i) = v_i^{s_1}, \ i = 1, \dots, n-1, \\ (p^\top f(x_i))' = 0 \text{ для всех } x_i \in (-1, 1), \\ c(z) = h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\omega_i p^\top f(x_i); \end{cases} \quad \begin{cases} p^\top f(x_i) = v_i^{s_2}, \ i = 1, \dots, n-1, \\ (p^\top f(x_i))' = 0 \text{ для всех } x_i \in (-1, 1), \\ c(z) = h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\omega_i p^\top f(x_i). \end{cases}$$

Шаг 4. Записываем результат.

Проиллюстрируем на примерах, как работает этот алгоритм.

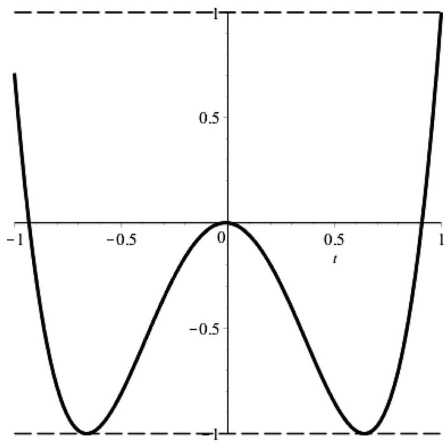

Рис. 1. Поведение экстремального многочлена плана ξ_1^* из примера 3.3 в случае $z = 0.3$, $n = 4$ ($k = 2$).

Пример 3.3. Рассмотрим полиномиальную регрессию без свободного члена степени $n = 4$. Найдем численно вырожденный оптимальный план, используя наш алгоритм.

Шаг 1. Пусть $z = 0.3$.

Шаг 2. Проверяем, принадлежит ли z интервалу, на котором существует аналитическое решение (см. пример 3.2).

Шаг 3. $z \in [a, b]$, где $a = 0.2345$, $b = 0.3023$. Для таких a и b немедленно получаем (по теореме 3.3), что $\omega_2^{(l)}(0.2345) = \omega_1^{(r)}(0.3023) = 0$, т. е. $s_1 = 2, s_2 = 1$. Таким образом, мы имеем $v^{s_1} = (-1, -1, 1)^\top = v^{s_2}$. Находим оптимальный план ξ^* как решение системы уравнений при дополнительных ограничениях $|p^\top f(x)| \le 1$ для всех $x \in [-1, 1]$:

$$\begin{cases} p^\top f(x_1) = -1, \\ p^\top f(x_2) = -1, \\ p^\top f(1) = 1, \\ (p^\top f(x_i))' = 0, \ i = 1, 2, \\ c(z) = h \sum_{i=1}^{3} f(x_i) \omega_i p^\top f(x_i). \end{cases}$$

Шаг 4. Записываем результат:

$$\xi_1^* = \begin{pmatrix} -0.6621 & 0.6397 & 1 \\ 0.0228 & 0.8741 & 0.1031 \end{pmatrix}.$$

Поведение экстремального многочлена этого плана ($P(x) = 5.576t^4 + 0.2501t^3 - 4.720t^2 - 0.1059t$) отображено на рис. 1. Непосредственные вычисления показывают, что план ξ_1^* удовлетворяет условиям теоремы 2.1 (при $h = -2.2681$).

Рассмотрим еще один пример.

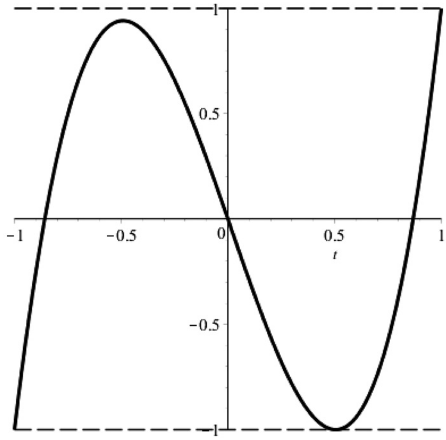

Рис. 2. Поведение экстремального многочлена плана ξ_2^* из примера 3.4 в случае $z = 0.805$, $n = 4$ $(k = 2)$.

Пример 3.4.

Шаг 1. Пусть $z = 0.805$.

Шаг 2. Проверяем, принадлежит ли z интервалу, на котором существует аналитическое решение (см. пример 3.2).

Шаг 3. $z \in [a, b]$, где $a = 0.8036$, $b = 0.8503$. Для таких a и b немедленно получаем (по теореме 3.3), что $\omega_2^{(l)}(0.8036) = \omega_1^{(r)}(0.8503) = 0$, т. е. $s_1 = 2, s_2 = 1$. Таким образом, мы имеем $v^{s_1} = (-1, -1, 1)^\top = v^{s_2}$. Находим оптимальный план ξ^* как решение системы уравнений при дополнительных ограничениях $|p^\top f(x)| \le 1$ для всех $x \in [-1, 1]$:

$$\begin{cases} p^\top f(-1) = -1, \\ p^\top f(x_2) = -1, \\ p^\top f(1) = 1, \\ (p^\top f(x_2))' = 0, \\ c(z) = h \sum_{i=1}^{3} f(x_i)\omega_i p^\top f(x_i). \end{cases}$$

Шаг 4. Записываем результат:

$$\xi_2^* = \begin{pmatrix} -1 & 0.5049 & 1 \\ 0.0018 & 0.5254 & 0.4728 \end{pmatrix}.$$

Поведение экстремального многочлена этого плана ($P(x) = 0.1561t^4 + 3.922t^3 - 0.1561t^2 - 2.922t$) отображено на рис. 2. Непосредственные вычисления показывают, что план ξ_2^* удовлетворяет условиям теоремы 2.1 (при $h = 4.7767$).

Замечание 3.1. Отметим, что аналитические решения, представленные в предыдущем разделе, удается найти в тех случаях, когда экстремальный полином оптимального плана обладает чебышёвскими свойствами (т. е. имеет максимально возможное количество экстремумов на интервале $[-1, 1]$). При этом число точек оптимального плана соответствует числу экстремумов данного полинома. Основная идея предложенного нами подхода состоит в том, что мы, используя аналитические результаты, можем установить знакочередование максимумов и минимумов экстремального полинома в «нечебышёвском» случае, что, в свою очередь, позволяет гарантировать существование и единственность решения соответствующей системы уравнений.

Замечание 3.2. Решать соответствующую систему, описанную на третьем шаге псевдокода нашего алгоритма, можно любым подходящим методом. В силу замечания 3.1, в частности, можно использовать функциональный подход (см. [28]) для представления точек и весов оптимального плана как частичных сумм ряда Тейлора в точке z.

Литература

1. *Pukelsheim F., Studden W. J.* E-optimal designs for polynomial regression // Annals of Statistics. 1993. Vol. 21, no. 1. P. 402–415.

2. *Fedorov V. V., Hackl P.* Model-Oriented Design of Experiments. New York: Springer, 1997.

3. *Atkinson A. C., Donev A. N., Tobias R. D.* Optimum Experimental Designs, with SAS. Oxford: Oxford University Press, 2007.

4. *Hoel P. G.* Efficiency problems in polynomial estimation // Annals of Mathematical Statistics. 1958. Vol. 29, no. 4. P. 1134–1145.

5. *Studden W. J.* D_s-Optimal Designs for Polynomial Regression Using Continued Fractions // Annals of Statistics. 1980. Vol. 8, no. 5. P. 1132–1141.

6. *Dette H.* A generalization of D- and D_1-optimal designs in polynomial regression // Annals of Statistics. 1990. Vol. 18. P. 1784–1805.

7. *Dette H., Franke T.* Robust designs for polynomial regression by maximizing a minimum of D- and D_1-efficiencies // Annals of Statistics. 2001. Vol. 29, no. 4. P. 1024–1049.

8. *Zen M.-M., Tsai M.-H.* Criterion-robust optimal designs for model discrimination and parameter estimation in Fourier regression models // Journal of Statistical Planning and Inference. 2004. Vol. 124. P. 475–487.

9. *Dette H.* A Note on E-Optimal Designs for Weighted Polynomial Regression // Annals of Statistics. 1993. Vol. 21, no. 2. P. 767–771.

10. *Heiligers B.* E-Optimal Designs in Weighted Polynomial Regression // Annals of Statistics. 1994. Vol. 22, no. 2. P. 917–929.

11. *Dette H., Studden W. J.* Geometry of E-optimality // Annals of Statistics. 1993. Vol. 21, no. 1. P. 416–433.

12. *Studden W. J.* Optimal designs on Tchebycheff points // Annals of Mathematical Statistics. 1968. Vol. 39, no. 5. P. 1435–1447.

13. *Elfving G.* Optimal allocation in linear regression theory // The Annals of Mathematical Statistics. 1952. Vol. 23. P. 255–262.

14. *Atkinson A. C.* The Design of Experiments to Estimate the Slope of a Response Surface // Biometrika. 1970. Vol. 57, no. 2. P. 319–328.

15. *Murthy V., Studden W.* Optimal designs for estimating the slope of a polynomial regression // J. Am. Statist. Assoc. 1972. Vol. 67. P. 869–873.

16. *Myres R., Lahoda S.* A generalization of the response surface mean square error criterion with a specific application to the slope // Technometrics. 1975. Vol. 17. P. 481–486.

17. *Ott L., Mendenhall W.* Designs for Estimating the Slope of a Second Order Linear Model // Technometrics. 1972. Vol. 14. P. 341–353.

18. *Hader R., Park S.* Slope-rotatable central composite designs // Technometrics. 1978. Vol. 20. P. 413–417.

19. *Mandal N., Heiligers B.* Minimax designs for estimating the optimum point in a quadratic response surface // Journal of Statistical Planning and Inference. 1992. Vol. 31. P. 235–244.

20. *Pronzato L., Walter E.* Experimental design for estimating the optimum point in a response surface // Acta Applicandae Mathematicae. 1993. Vol. 33. P. 45–68.

21. *Melas V., Pepelyshev A., Cheng R.* Designs for estimating an extremal point of quadratic regression models in a hyperball // Metrika. 2003. Vol. 58. P. 193–208.
22. *Dette H., Melas V. B., Pepelyshev A.* Optimal designs for estimating the slope of a regression // Statistics. 2010. Vol. 44, no. 6. P. 617–628.
23. *Dette H., Melas V. B., Shpilev P.* Some explicit solutions of c-optimal design problems for polynomial regression with no intercept // Annals of the Institute of Statistical Mathematics. 2020. https://doi.org/10.1007/s10463-019-00736-0
24. *Pukelsheim F.* Optimal Design of Experiments. Philadelphia: SIAM, 2006.
25. *Kiefer J.* General Equivalence Theory for Optimum Designs (Approximate Theory) // The Annals of Statistics. 1974. Vol. 2, no. 5. P. 849–879.
26. *Dette H., Melas V. B., Pepelyshev A.* Optimal designs for estimating individual coefficients in polynomial regression — a functional approach // Journal of Statistical Planning and Inference. 2004. Vol. 118, no. 1. P. 201–219.
27. *Wynn H. P.* The sequential generation of D-optimal experimental designs // Annals of Mathematical Statistics. 1970. Vol. 41, no. 5. P. 1655–1664.
28. *Melas V. B.* Functional approach to experimental optimal design. Heidelber: Springer, 2006.

Статья поступила в редакцию 3 ноября 2019 г.;
после доработки 13 ноября 2019 г.;
рекомендована в печать 12 декабря 2019 г.

Контактная информация:

Мелас Вячеслав Борисович — д-р физ.-мат. наук, проф.; vbmelas@yandex.ru
Шпилев Петр Валерьевич — канд. физ.-мат. наук, доц.; p.shpilev@spbu.ru

Constructing c-optimal designs for polynomial regression with no intercept*

V. B. Melas, P. V. Shpilev

St. Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St. Petersburg, 199034, Russian Federation

For citation: Melas V. B., Shpilev P. V. Constructing c-optimal designs for polynomial regression with no intercept. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2020, vol. 7 (65), issue 2, pp. 331–342. https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2020.215 (In Russian)

The paper is devoted to the problem of constructing c-optimal design for polynomial regression with no intercept. A special case of $c = f'(z)$ is considered (i. e., the vector of derivatives of regression functions at some point z is selected as the vector c). A brief review of the analytical results are available in the literature is given. An effective numerical method for constructing $f'(z)$-optimal designs is proposed in those cases when an analytical solution cannot be provided.

Keywords: c-optimal designs, $f'(z)$-optimal designs, optimal designs for estimating the slope, polynomial regression models with no intercept.

References

1. Pukelsheim F., Studden W. J., "E-optimal designs for polynomial regression", *Annals of Statistics* **21**(1), 402–415 (1993).
2. Fedorov V. V., Hackl P., *Model-Oriented Design of Experiments* (Springer, New York, 1997).
3. Atkinson A. C., Donev A. N., Tobias R. D., *Optimum Experimental Designs, with SAS* (Oxford University Press, Oxford, 2007).
4. Hoel P. G., "Efficiency problems in polynomial estimation", *Annals of Mathematical Statistics* **29**(4), 1134–1145 (1958).

*The work is supported by Russian Foundation for Basic Research (grant N 20-01-00096-a).

5. Studden W. J., “D_s-Optimal Designs for Polynomial Regression Using Continued Fractions”, *Annals of Statistics* **8**(5), 1132–1141 (1980).

6. Dette H., “A generalization of D- and D_1-optimal designs in polynomial regression”, *Annals of Statistics* **18**, 1784–1805 (1990).

7. Dette H., Franke T., “Robust designs for polynomial regression by maximizing a minimum of D- and D_1-efficiencies”, *Annals of Statistics* **29**(4), 1024–1049 (2001).

8. Zen M.-M., Tsai M.-H., “Criterion-robust optimal designs for model discrimination and parameter estimation in Fourier regression models”, *Journal of Statistical Planning and Inference* **124**, 475–487 (2004).

9. Dette H., “A Note on E-Optimal Designs for Weighted Polynomial Regression”, *Annals of Statistics* **21**(2), 767–771 (1993).

10. Heiligers B., “E-Optimal Designs in Weighted Polynomial Regression”, *Annals of Statistics* **22** (2), 917–929 (1994).

11. Dette H., Studden W. J., “Geometry of E-optimality”, *Annals of Statistics* **21**(1), 416–433 (1993).

12. Studden W. J., “Optimal designs on Tchebycheff points”, *Annals of Mathematical Statistics* **39**(5), 1435–1447 (1968).

13. Elfving G., “Optimal allocation in linear regression theory”, *The Annals of Mathematical Statistics* **23**, 255–262 (1952).

14. Atkinson A. C., “The Design of Experiments to Estimate the Slope of a Response Surface”, *Biometrika* **57**(2), 319–328 (1970).

15. Murthy V., Studden W., “Optimal designs for estimating the slope of a polynomial regression”, *J. Am. Statist. Assoc.* **67**, 869–873 (1972).

16. Myres R., Lahoda S., “A generalization of the response surface mean square error criterion with a specific application to the slope”, *Technometrics* **17**, 481–486 (1975).

17. Ott L., Mendenhall W., “Designs for Estimating the Slope of a Second Order Linear Model”, *Technometrics* **14**, 341–353 (1972).

18. Hader R., Park S., “Slope-rotatable central composite designs”, *Technometrics* **20**, 413–417 (1978).

19. Mandal N., Heiligers B., “Minimax designs for estimating the optimum point in a quadratic response surface”, *Journal of Statistical Planning and Inference* **31**, 235–244 (1992).

20. Pronzato L., Walter E., “Experimental design for estimating the optimum point in a response surface”, *Acta Applicandae Mathematicae* **33**, 45–68 (1993).

21. Melas V., Pepelyshev A., Cheng R., “Designs for estimating an extremal point of quadratic regression models in a hyperball”, *Metrika* **58**, 193–208 (2003).

22. Dette H., Melas V. B., Pepelyshev A., “Optimal designs for estimating the slope of a regression”, *Statistics* **44**(6), 617–628 (2010).

23. Dette H., Melas V. B., Shpilev P., “Some explicit solutions of c-optimal design problems for polynomial regression with no intercept”, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics* (2020). https://doi.org/10.1007/s10463-019-00736-0

24. Pukelsheim F., *Optimal Design of Experiments* (SIAM, Philadelphia, 2006).

25. Kiefer J., “General Equivalence Theory for Optimum Designs (Approximate Theory)”, *The Annals of Statistics* **2**(5), 849–879 (1974).

26. Dette H., Melas V. B., Pepelyshev A., “Optimal designs for estimating individual coefficients in polynomial regression — a functional approach”, *Journal of Statistical Planning and Inference* **118**(1), 201–219 (2004).

27. Wynn H. P., “The sequential generation of D-optimal experimental designs”, *Annals of Mathematical Statistics* **41**(5), 1655–1664 (1970).

28. Melas V. B., *Functional approach to experimental optimal design* (Springer, Heidelber, 2006).

Received: November 3, 2019
Revised: November 13, 2019
Accepted: December 12, 2019

Authors’ information:

Vyacheslav B. Melas — vbmelas@yandex.ru
Petr V. Shpilev — p.shpilev@spbu.ru