

УДК 519.23:004.93'1:004.942

Планирование экспериментов при исследовании решающих правил распознавания сигналов методом моделирования

А. В. Фёдоров, А. В. Омельченко

Харьковский национальный университет радиоэлектроники, Украина

Рассмотрена задача построения рабочих характеристик решающих правил распознавания сигналов методом статистического моделирования с использованием полиномиальной регрессии. Обоснованы планы экспериментов, оптимальные по критерию минимума суммы квадратов отклонений оценки функции регрессии от ее истинных значений на множестве планирования (Q-оптимальные). Эффективность разработанных методов проиллюстрирована на примерах.

Ключевые слова: полиномиальная регрессия, регрессионный эксперимент, план эксперимента, решающие правила распознавания сигналов.

Розглянута задача побудови робочих характеристик вирішувальних правил розпізнавання сигналів методом статистичного моделювання з використанням поліноміальної регресії. Обґрунтовано плани експериментів, що є оптимальними за критерієм мінімуму суми квадратів відхилень оцінки функції регресії від її справжніх значень на множині планування (Q-оптимальні). Ефективність методів, що були розроблені, проілюстрована на прикладах.

Ключові слова: поліноміальна регресія, регресійний експеримент, план експерименту, вирішувальні правила розпізнавання сигналів.

The problem of getting working performances of signals recognition decision rules by statistical modeling with the aid of polynomial regression has been considered. Designs optimal with respect to the criterion of minimum of the total of squared deviations of a regression function estimate from its true values on a design region (Q-optimal) have been substantiated. The effectiveness of the developed methods has been illustrated by examples.

Key words: polynomial regression, regression experiment, design for experiment, signals recognition decision rules.

1. Введение

При исследовании решающих правил распознавания сигналов основное внимание уделяется таким их характеристикам как зависимость вероятности ошибки распознавания от: 1) объема выборки; 2) соотношения сигнал/шум; 3) числа распознаваемых сигналов и т.д. Как показывает практика, решение прикладных задач, связанных с получением этих характеристик методом моделирования, требует существенных вычислительных затрат. Это обуславливает актуальность задачи планирования модельного эксперимента, заключающейся в выборе условий эксперимента таким образом, чтобы по результатам его статистической обработки можно было сделать наиболее точные выводы об исследуемом явлении [1-4].

История развития математической теории оптимального регрессионного эксперимента насчитывает более 50 лет. Основное внимание исследователей было сосредоточено на ставшей ныне классической теории D-оптимального планирования [1-4], при котором минимизируется объем области ограниченной эллипсоидом рассеяния оценок параметров полиномиальной регрессии,

найденных по методу наименьших квадратов. Столь значительный интерес к D-оптимальным планам обусловлен, во-первых, относительной простотой D-критерия, что дает возможность использовать такие планы на различных, часто встречающихся на практике, множествах планирования [3], а, во-вторых, теоремами эквивалентности [1, 2, 4], согласно которым задачи построения планов, оптимальных по ряду других, имеющих ясный физический смысл, критериев сводятся к задачам D-оптимального планирования. Однако, если исследователя прежде всего интересует повышение точности оценивания функции регрессии на всем множестве планирования, то целесообразно использовать так называемые Q-оптимальные планы, общих методов синтеза которых, пока предложено не было, ввиду сложности данного критерия [1, 2, 4].

Целями настоящей работы являются: 1) построение Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов; 2) повышение точности оценивания характеристик решающих правил распознавания на основе Q-оптимального планирования полиномиальных регрессионных экспериментов.

2. Постановка задачи

Пусть имеется решающее правило распознавания сигналов, принимающее решение в пользу одного из M сигналов

$$i = R(\bar{x}, \bar{\gamma}', \bar{\gamma}), \quad i \in \{1, \dots, M\}, \quad (2.1)$$

где \bar{x} – вектор отсчетов сигнала, $\bar{\gamma}$ – вектор истинных значений параметров распределений распознаваемых сигналов; $\bar{\gamma}'$ – значение вектора $\bar{\gamma}$, используемое в решающем правиле (2.1).

Истинные значения $\bar{\gamma}$ не известны, однако заданы классифицированные обучающие выборки сигналов. Для упрощения будем полагать, что объемы обучающих выборок всех сигналов одинаковы и равны ν . На основе (2.1) построено адаптивное решающее правило

$$i = R(\bar{x}, \hat{\bar{\gamma}}, \bar{\gamma}), \quad i \in \{1, \dots, M\}, \quad (2.2)$$

где $\hat{\bar{\gamma}}$ – оценка вектора параметров $\bar{\gamma}$, найденная по обучающей выборке.

Необходимо:

1. Показать, что зависимость вероятности ошибки распознавания сигналов правилом (2.2) от объема обучающей выборки ν допускает аппроксимацию полиномами малых степеней от переменной ν^{-1} .

2. Синтезировать и исследовать свойства Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов на множествах планирования со структурой определяемой особенностями решаемой задачи, в частности задачей построения рабочих характеристик решающих правил вида (2.2).

3. Критерии оптимальности полиномиальных регрессионных экспериментов

Введем обозначения. Пусть $\mathbf{X} = \{x_j \mid x_j \in R, j = \overline{0, J}\}$ множество планирования. Рассмотрим схему проведения регрессионного эксперимента, согласно которой измерения выполняются в возможно совпадающих точках $x_0, \dots, x_N \in \mathbf{X}$, а

результаты измерений $\bar{y} = [y(x_0), \dots, y(x_N)]^T$ представляются в виде [1-3, 5-7]:

$$\bar{y} = \bar{\rho} + \bar{\eta}, \quad \bar{\rho} = \mathbf{F}\bar{\theta}, \quad (3.1)$$

где $\bar{\theta} = [\theta_0, \dots, \theta_h]^T$ - неизвестные параметры регрессии, h - порядок модели; $\bar{\eta} = [\eta(x_0), \dots, \eta(x_N)]^T$ - вектор шумов наблюдений, с нулевыми средними $M[\bar{\eta}] = \bar{0}$ и ковариационной матрицей $M[\bar{\eta}\bar{\eta}^T] = \mathbf{W}^{-1}$, $M[\cdot]$ - символ математического ожидания, $\mathbf{W} = \text{diag}(w(x_0), \dots, w(x_N))$ - диагональная матрица весов измерений [1, 6]; $\mathbf{F} = [\bar{f}^T(x_0), \dots, \bar{f}^T(x_N)]^T$, $\bar{f}(x) = [f_0(x), \dots, f_h(x)]^T$ - система базисных функций определенных на \mathbf{X} . Матрицу \mathbf{F} называют матрицей плана.

Оценки неизвестных параметров регрессии $\hat{\theta} = [\hat{\theta}_0, \dots, \hat{\theta}_h]^T$ находят из условия $\bar{\eta}^T \mathbf{W} \bar{\eta} \rightarrow \min$ [1]:

$$\hat{\theta} = (\mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{W} \bar{y}. \quad (3.2)$$

Поскольку, среди точек $x_0, \dots, x_N \in \mathbf{X}$ могут быть совпадающие, то, фактически, измерения в эксперименте выполняются $r_i \geq 1$ раз в каждой из точек множества $\{\varepsilon_i\}_{i=0}^n \subset \mathbf{X}$, $\sum_{i=0}^n r_i = N+1$, $h \leq n \leq N$. Планом эксперимента [1-4] называется набор

$$\xi = \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_0, \dots, \varepsilon_n \\ p_0, \dots, p_n \end{array} \right\}, \quad (3.3)$$

где $p_i = r_i / (N+1)$ - частоты проведения наблюдений в точках ε_i , $i = \overline{0, n}$ плана (3.3). Совокупность точек $\{\varepsilon_i\}_{i=0}^n$ называют *спектром* плана. Если $n = \text{const}$, а число точек N неограниченно, то план (3.3) называют *непрерывным*, при этом частоты p_i интерпретируют как вероятности точек ε_i плана ξ .

Можно показать, что оценки (3.2) являются несмещенными ($M[\hat{\theta}] = \bar{\theta}$) с ковариационной матрицей

$$\mathbf{C}(\xi) = M[(\hat{\theta} - \bar{\theta})(\hat{\theta} - \bar{\theta})^T] = (\mathbf{F}^T \mathbf{W} \mathbf{F})^{-1} = \frac{1}{N+1} \mathbf{M}^{-1}(\xi), \quad (3.4)$$

где $\mathbf{M}(\xi) = \sum_{i=0}^n \bar{f}(\varepsilon_i) \bar{f}^T(\varepsilon_i) w(\varepsilon_i) p_i$ - информационная матрица [1-4]. При этом суммарная дисперсия погрешности [5] оценивания функции регрессии $\rho(x) = \bar{\theta}^T \bar{f}(x)$ по всем точкам $x_j \in \mathbf{X}$, $j = \overline{0, J}$ множества \mathbf{X} равна

$$Q(\xi) = \sum_{j=0}^J M[\hat{\rho}(x_j) - \rho(x_j)]^2 = \frac{J+1}{N+1} d(\xi); \quad d(\xi) = \frac{1}{J+1} \sum_{j=0}^J \bar{f}^T(x_j) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \bar{f}(x_j), \quad (3.5)$$

где $\hat{\rho}(x) = \hat{\theta}^T \bar{f}(x)$ - выборочная функция регрессии.

Известно довольно много критериев оптимальности планов. Дадим определение D и Q-оптимальным планам [1-4].

План

$$\xi^* = \arg \min_{\xi} \det \mathbf{M}^{-1}(\xi) \quad (3.6)$$

називається D-оптимальним. Часто в критерії D-оптимальності замість $\det \mathbf{M}^{-1}(\xi)$ використовується $-\ln \det \mathbf{M}(\xi)$.

План

$$\xi^* = \arg \min_{\xi} d(\xi) \quad (3.7)$$

називається Q-оптимальним. Величина $d(\xi)$ визначається виразом (3.5). Крім того, планом, оптимальним для екстраполяції в точку x' , називається план

$$\xi^* = \arg \min_{\xi} M[\hat{\rho}(\xi, x') - \rho(\xi, x')]^2, \quad \rho(\xi, x') \stackrel{\text{def}}{=} \rho(x'). \quad (3.8)$$

D-оптимальне планування мінімізує максимальну по $x \in \mathbf{X}$ дисперсію виборочної функції регресії. Однак, якщо потрібно забезпечити загальну точність апроксимації залежності на всьому множині планування, то цілорозумно використовувати Q-оптимальні плани.

Замітимо, що при практичних обчисленнях як базисних функцій $f_0(x), \dots, f_h(x)$ зазвичай використовують систему функцій Чебишева [5-7] $\psi_0(x), \dots, \psi_h(x)$ ортогональних на множині точок $x_0, \dots, x_N \in \mathbf{X}$ з вагами $w(x_i)$, $i = \overline{0, N}$. В цьому випадку вирази (3.4) і (3.5) для $\mathbf{M}(\xi)$ і $Q(\xi)$ приймають, відповідно, вигляд

$$\mathbf{M}(\xi) = \|m_{i,j}\|_{i,j=0}^h, \quad m_{i,j} = \begin{cases} \sum_{k=0}^n \psi_i^2(\varepsilon_k) w(\varepsilon_k) p_k, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \end{cases} \quad (3.9)$$

$$Q(\xi) = \frac{J+1}{N+1} d(\xi); \quad d(\xi) = \sum_{i=0}^h \frac{\frac{1}{J+1} \sum_{j=0}^J \psi_i^2(x_j)}{\sum_{k=0}^n \psi_i^2(\varepsilon_k) w(\varepsilon_k) p_k}. \quad (3.10)$$

4. Залежність ймовірності помилки розпізнавання сигналів від обсягу навчальної вибірки

Знайдемо залежність ймовірності помилки розпізнавання сигналів від обсягу навчальної вибірки ν . Припустимо, що відома залежність середньої ймовірності помилки розпізнавання сигналів рішенням правилом (2.1) $P(\hat{\gamma})$, тоді середня ймовірність помилки розпізнавання сигналів рішенням правилом (2.2) дорівнює

$$\bar{P}(\nu) = M[P(\hat{\gamma})]. \quad (4.1)$$

Сформулюємо і доведемо теорему, визначає клас функцій для апроксимації залежності ймовірності помилки від обсягу навчальної вибірки [17]. Використаємо поняття мультиіндекса [8]. Позначимо через $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ вектор з неотрицательними цілими координатами, тоді $\beta_{\vec{\alpha}} = \beta_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}$, $\bar{x}^{\vec{\alpha}} = x_1^{\alpha_1} \dots x_m^{\alpha_m}$ і покладемо $|\vec{\alpha}| = \alpha_1 + \dots + \alpha_m$, $(\vec{\alpha})! = \alpha_1! \dots \alpha_m!$.

Производную порядка $|\vec{\alpha}|$ от функции $f(\vec{x})$ в точке \vec{x}_0 обозначим $P_{,\vec{\alpha}}(\vec{x}_0) = \frac{\partial^{|\vec{\alpha}|} f}{\partial x_m^{\alpha_m} \dots \partial x_1^{\alpha_1}}(\vec{x}_0)$.

Теорема 1. Пусть функция $P(\hat{\gamma})$ представима рядом Тейлора в окрестности точки $\vec{\gamma}$ и $P = P(\vec{\gamma})$, а оценка $\hat{\gamma}$ является несмещенной, эффективной и нормально распределенной. Тогда средняя вероятность ошибки распознавания сигналов решающим правилом (2.2) представима рядом

$$\bar{P}(v) = P + \sum_{|\vec{\delta}|=1}^{\infty} \beta_{2\vec{\delta}} \cdot v^{-|\vec{\delta}|}, \quad (4.2)$$

где $\beta_{2\vec{\delta}} = \frac{P_{,2\vec{\delta}}(\vec{\gamma}) (2\delta_1-1)(2\delta_1-3)\dots(2\delta_m-1)(2\delta_m-3)\dots 1}{(2\vec{\delta})! I^{\delta_1}(\gamma_1)\dots I^{\delta_m}(\gamma_m)}$.

Доказательство. В работе [9] дано доказательство сформулированного утверждения для одномерного случая, т.е., когда размерность вектора $\vec{\gamma}$ равна 1. Покажем, что утверждение теоремы справедливо и для многомерного случая.

Пусть вектор $\hat{\gamma}$ имеет некоррелированные координаты, если это не так, то выполним декоррелирующее преобразование. Разложим функцию $P(\hat{\gamma})$ в ряд Тейлора [8] в окрестности точки $\vec{\gamma}$:

$$P(\hat{\gamma}) = P + \sum_{|\vec{\alpha}|=1}^{\infty} \frac{P_{,\vec{\alpha}}(\vec{\gamma})}{(\vec{\alpha})!} (\hat{\gamma} - \vec{\gamma})^{\vec{\alpha}}.$$

Тогда с учетом некоррелированности координат вектора $\hat{\gamma}$ выражение (4.1) примет вид:

$$\bar{P}(v) = P + \sum_{|\vec{\alpha}|=1}^{\infty} \frac{P_{,\vec{\alpha}}(\vec{\gamma})}{(\vec{\alpha})!} M[\hat{\gamma}_1 - \gamma_1]^{\alpha_1} \dots M[\hat{\gamma}_m - \gamma_m]^{\alpha_m}. \quad (4.3)$$

Для гауссовских случайных величин центральные моменты высших порядков выражаются через центральный момент второго порядка [10]:

$$M[\hat{\gamma}_i - \gamma_i]^{\alpha_i} = \begin{cases} (\alpha_i - 1)(\alpha_i - 3)\dots 1 \cdot \sqrt{D_i^{\alpha_i}}, & \text{если } \alpha_i \text{ четно,} \\ 0, & \text{если } \alpha_i \text{ нечетно,} \end{cases} \quad (4.4)$$

где $D_i = M[\hat{\gamma}_i - \gamma_i]^2$.

Поскольку оценки координат вектора параметров эффективны, то [10]

$$D_i \geq [v \cdot I(\gamma_i)]^{-1}, \quad (4.5)$$

где $I(\cdot)$ - информация Фишера.

Подставив соотношения (4.4) и (4.5) в (4.3) и выполнив замену $|\vec{\alpha}| = 2|\vec{\delta}|$ получим (4.2). ■

При анализе решающих правил часто бывает затруднительно найти аналитическое выражение для коэффициентов $\beta_{2\vec{\delta}}$. В этих случаях их значения

могут быть найдены численно с использованием вместо производных конечных разностей соответствующего порядка.

Обоснованная теоретически зависимость вероятности ошибки распознавания сигналов от объема обучающей выборки вида (4.2) может быть положена в основу метода построения рабочих характеристик решающих правил распознавания сигналов с использованием результатов статистического моделирования. В работе [9] содержится обширный иллюстративный материал, показывающий, что в подавляющем большинстве случаев зависимости такого рода хорошо аппроксимируются полиномами малых степеней от ν^{-1} .

На рис. 4.1 точками показана аппроксимация полиномом третьей степени зависимости $P(\nu)$ вероятности ошибки распознавания двух гауссовых векторов с различными математическими ожиданиями и одинаковыми дисперсиями от объема обучающей выборки ν при объеме контрольной выборки равном 20 [13, 17]. Соотношение для расчета указанной зависимости $P(\nu)$ взято из [11].

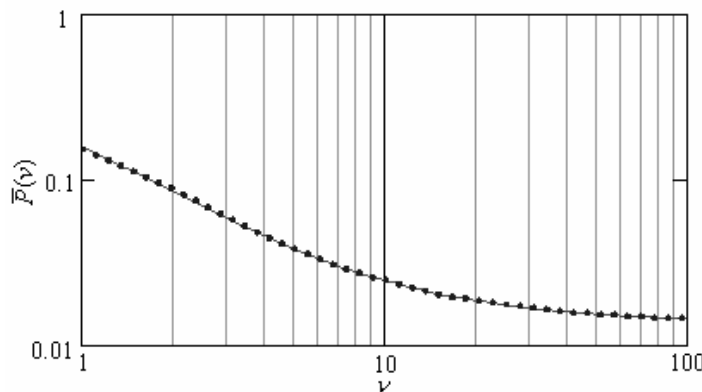


Рис. 4.1. Аппроксимация зависимости $\bar{P}(\nu)$ вероятности ошибки распознавания двух гауссовых векторов от объема обучающей выборки ν полиномом третьей степени относительно переменной ν^{-1}

5. Синтез Q-оптимальных планов

Следующая теорема [15-18] дает общее решение задачи непрерывного Q-оптимального планирования полиномиального регрессионного эксперимента произвольного порядка, проводимого согласно (3.1).

Теорема 2. Пусть измерения в эксперименте проводятся согласно (3.1), тогда непрерывный Q-оптимальный план полиномиального регрессионного эксперимента произвольного порядка $n > 0$ имеет вид (3.3), где $n = h$,

$$p_i = \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)}{w(\varepsilon_i)}} \left[\sum_{k=0}^n \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^J L_k^2(x_j)}{w(\varepsilon_k)}} \right]^{-1}, \text{ а точки } \varepsilon_i \in \mathbf{X}, \quad i = \overline{0, n} \text{ находятся из}$$

$$\text{условия } \min_{\varepsilon_0, \dots, \varepsilon_n} \frac{1}{J+1} \left[\sum_{i=0}^n \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)}{w(\varepsilon_i)}} \right]^2. \quad L_i(x) = \frac{(x-\varepsilon_0) \cdots (x-\varepsilon_{i-1})(x-\varepsilon_{i+1}) \cdots (x-\varepsilon_n)}{(\varepsilon_i-\varepsilon_0) \cdots (\varepsilon_i-\varepsilon_{i-1})(\varepsilon_i-\varepsilon_{i+1}) \cdots (\varepsilon_i-\varepsilon_n)}$$

интерполяционные коэффициенты Лагранжа.

Доказательство. Будем считать, что $n = h$, т.к. при $n < h$ план (3.3) вырожденный [1]. Используя подход Ноел'а [12] представим исходную и выборочную функции регрессии интерполяционной формулой Лагранжа. С учетом (3.3) имеем

$$\rho(x) = \bar{y}^T \bar{l}(x), \quad (5.1)$$

где $\bar{y} = [y(\varepsilon_0), \dots, y(\varepsilon_n)]^T$, $\bar{l}(x) = [L_0(x), \dots, L_n(x)]^T$.

Подставляя теперь (5.1) в (3.5) и учитывая, что $\bar{l}(x) = \bar{f}(x)$, а также $\mathbf{M}(\xi) = \sum_{i=0}^n \bar{l}(\varepsilon_i) \bar{l}^T(\varepsilon_i) w(\varepsilon_i) p_i = \mathbf{P} \cdot \mathbf{W}$, получим

$$Q(\xi) = \frac{J+1}{N+1} d(\xi); \quad d(\xi) = \frac{1}{J+1} \sum_{j=0}^J \bar{l}^T(x_j) \mathbf{P}^{-1} \mathbf{W}^{-1} \bar{l}(x_j), \quad (5.2)$$

где $\mathbf{P} = \text{diag}(p_0, \dots, p_n)$ - диагональная матрица вероятностей точек плана.

Определим теперь значения p_i , $i = \overline{0, n}$ матрицы \mathbf{P} , минимизирующие выражение (5.2). Для этого воспользуемся методом неопределенных множителей Лагранжа с уравнением связи $\sum_{i=0}^n p_i - 1 = 0$. Составим функционал

$$u(\xi) = d(\xi) + \lambda (\sum_{i=0}^n p_i - 1).$$

Дифференцируя $u(\xi)$ по p_i , а также по вспомогательному параметру λ и приравнявая нулю, получим систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{\frac{1}{J+1} \sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)}{w(\varepsilon_i) p_i^2} = \lambda, & i = \overline{0, n}, \\ \sum_{i=0}^n p_i = 1. \end{cases} \quad (5.3)$$

Решая систему (5.3) находим:

$$p_i = \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)}{w(\varepsilon_i)}} \left[\sum_{k=0}^n \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^J L_k^2(x_j)}{w(\varepsilon_k)}} \right]^{-1}. \quad (5.4)$$

Определим характер найденного условного экстремума. Легко видеть, что, поскольку $p_i > 0$, то

$$d^2 u(\xi) = \frac{2}{J+1} \sum_{i=0}^n \frac{\sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)}{w(\varepsilon_i) p_i^3} dp_i^2 > 0.$$

Таким образом, найденные значения p_i , $i = \overline{0, n}$ соответствуют точке локального минимума, которая так же является точкой глобального минимума.

Подставляя теперь (5.4) в (5.2) получим

$$Q(\xi) = \frac{J+1}{N+1} d(\xi); \quad d(\xi) = \frac{1}{J+1} \left[\sum_{i=0}^n \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)}{w(\varepsilon_i)}} \right]^2. \quad (5.5)$$

Очевидно, что точки плана $\varepsilon_i \in \mathbf{X}$, $i = \overline{0, n}$ должны выбираться из условия $\min_{\varepsilon_i} d(\xi)$, где $d(\xi)$ определяется выражением (5.5). ■

Принимая во внимание результаты теоремы 1, в дальнейшем мы будем рассматривать Q и D-оптимальные планы на множествах $\mathbf{X}_1 = \{x_j \mid x_0 = a < b, x_j = x_{j-1} + \Delta, j = \overline{1, J}, \Delta = \frac{b-a}{J}\}$; $\mathbf{X}_2 = [a, b]$, $a, b \in \mathbf{R}$ и $\mathbf{X}_3 = \{(j+m+1)^{-1} \mid j = \overline{0, J}, m \in \mathbf{Z}_+, m < J\}$.

Заметим, что при $\mathbf{X} = \mathbf{X}_2$ функционал $d(\xi)$, получаемый из (5.5) путем предельного перехода $J \rightarrow \infty$, имеет вид

$$d(\xi) = \frac{1}{b-a} \left[\sum_{i=0}^n \sqrt{\frac{\int_a^b L_i^2(x) dx}{w(\varepsilon_i)}} \right]^2. \quad (5.6)$$

Исследуем свойства функционалов (5.5-5.6). Введем обозначения: $\tilde{\mathbf{X}} = [\min \mathbf{X}, \max \mathbf{X}]$; $E_n = \{e = (\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) \in \tilde{\mathbf{X}}^{n+1} \mid (\forall i > j)(\varepsilon_i > \varepsilon_j)\}$; $L_i(x, e) \stackrel{\text{def}}{=} L_i(x)$, $x \in \tilde{\mathbf{X}}$, $e \in E_n$, $i = \overline{0, n}$. Зададим функции из множества $\tilde{\mathbf{X}} \times \mathbf{R}^{n+1} \times E_n$ в \mathbf{R} : $\mathbf{1}(x, c, e) \equiv 1$ и $\mathbf{I}(x, c, e) = \sum_{i=0}^n c_i L_i(x, e)$, $c = (c_0, c_1, \dots, c_n) \in \mathbf{R}^{n+1}$. Рассмотрим следующее множество функций из $\tilde{\mathbf{X}}$ в \mathbf{R} :

$$V = \{\mathbf{I}(x, c, e) \mid c \in \mathbf{R}^{n+1}, e \in E_n\} \cup \{g \cdot \mathbf{1}(x, c, e) \mid g \in \mathbf{R}, c \in \mathbf{R}^{n+1}, e \in E_n\}.$$

Справедлива

Лемма 1. Пусть $\mathbf{X} = \mathbf{X}_2$, тогда пространство V непрерывных на \mathbf{X}_2 функций со скалярным произведением $(v_1, v_2) = \int_a^b v_1(x) \cdot v_2(x) dx$, $v_1, v_2 \in V$ является евклидовым пространством.

Доказательство. Легко проверить, что элементы множества V удовлетворяют всем условиям, налагаемым на элементы линейного пространства. Таким образом, множество V является линейным пространством с фиксированным в нем скалярным произведением, т.е. является евклидовым пространством. ■

Теорема 3. Пусть $\mathbf{X} = \mathbf{X}_2$, тогда функционал

$$d(e) = \frac{1}{b-a} \left[\sum_{i=0}^n \sqrt{\frac{\int_a^b L_i^2(x, e) dx}{w(\varepsilon_i)}} \right]^2$$

выпуклый на множестве функций V .

Доказательство. Поскольку $(\forall e \in E_n \wedge i = \overline{0, n})(L_i(x, e) \in V)$, то в силу леммы 1 верно следующее $\|L_i(x, e)\| = \|\mathbf{I}(x, c^{(i)}, e)\| = \left(\int_a^b L_i^2(x, e) dx\right)^{1/2}$, где $c^{(i)} = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ - вектор длины $n+1$ содержащий 1 в i -й позиции. Учитывая тот факт, что норма $\|\cdot\|$ является выпуклым на V функционалом и, в силу особенностей построения множества V , зависит от двух параметров $c \in \mathbf{R}^{n+1}$ и $e \in E_n$, т.е. $(\forall v \in V)(\|v\| = f(c, e))$, то $\|L_i(x, e)\|$, $i = \overline{0, n}$ также является выпуклым на V функционалом, т.к. представляет собой сечение

функции $f(c, \epsilon)$ в точке $c^{(i)}$. В свою очередь, функционал $\sum_{i=0}^n \left(\frac{\int_a^b L_i^2(x, \epsilon) dx}{w(\epsilon_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \geq 0$ выпуклый на V как сумма неотрицательных выпуклых функционалов. Последующая операция возведения в квадрат в данном случае выпуклости не меняет. ■

Проанализируем теперь случай, когда \mathbf{X} - конечное дискретное упорядоченное множество, т.е. $\mathbf{X} = \mathfrak{X} = \{x_j \in \mathbf{R} \mid j = \overline{0, J} \wedge (\forall j \geq 1)(x_j > x_{j-1})\}$.

Образует множество векторов значений функций пространства V , вычисленных в точках множества \mathfrak{X} : $V_J = \{(v(x_0), \dots, v(x_J)) \mid v \in V\}$. Справедлива

Лемма 2. Пространство V_J со скалярным произведением $(v_1, v_2) = \sum_{j=0}^J v_1(x_j)v_2(x_j)$, $v_1, v_2 \in V_J$ является евклидовым.

Доказательство. Аналогично доказательству леммы 1. ■

Теорема 4. Пусть $\mathbf{X} = \mathfrak{X}$, тогда функционал

$$d(\epsilon) = \frac{1}{J+1} \left[\sum_{i=0}^n \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^J L_i^2(x_j, \epsilon)}{w(\epsilon_i)}} \right]^2$$

выпуклый на множестве векторов V_J .

Доказательство. Опирается на лемму 2 и проводится по схеме аналогичной доказательству теоремы 3. ■

Как следует из теорем 3 и 4 задачу Q-оптимального планирования можно решать в рамках двух подходов. Первый из них – поиск минимума $d(\xi)$ в пространствах V и V_J , т.е. решение задачи выпуклого программирования. Второй подход - непосредственная минимизация $d(\xi)$ по набору аргументов $\{\epsilon_i \in \mathbf{X}\}_{i=0}^n$. В обоих случаях серьезной трудностью является большая размерность экстремальной задачи. Мы будем использовать второй подход.

6. Непрерывные Q-оптимальные планы и их свойства

Опираясь на теорему 2 сформулируем и докажем некоторые утверждения о равнооточных $(w(\epsilon_i) = \sigma^{-2}, i = \overline{0, n}, \sigma = const)$ непрерывных Q-оптимальных планах полиномиальных регрессионных экспериментов на множествах $\mathbf{X}_{1,2,3}$ [15-18].

Обозначим через Ξ_i суммы вида $\sum_{j=0}^J (j+1)^{-i}$, $i = 1, 2, \dots$

Теорема 5. Пусть измерения в эксперименте проводятся согласно (3.1), тогда непрерывный Q-оптимальный план равнооточного линейного регрессионного эксперимента имеет вид (3.3), где $n = 1$, $\epsilon_0 = \min \mathbf{X}$, $\epsilon_1 = \max \mathbf{X}$. Если $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{1,2}$,

то $p_{0,1} = \frac{1}{2}$, если $\mathbf{X} = \mathbf{X}_3$, $m = 0$, то $p_0 = \left[1 + \sqrt{\frac{1}{J+1} \left[1 + \frac{J(\Xi_2 - 1)}{\Xi_2 - 2\Xi_1 + J + 1} \right]} \right]^{-1}$,

$p_1 = 1 - p_0 = \left[1 + \sqrt{(J+1) \left[1 - \frac{J(\Xi_2 - 1)}{(J+1)\Xi_2 - 2\Xi_1 + 1} \right]} \right]^{-1}$.

Доказательство. Поскольку $h=1$, то план ξ должен быть сосредоточен, по крайней мере, в $n+1=2$ точках: $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 \in \mathbf{X}$. Покажем, что этими точками должны быть $\varepsilon_0 = \min \mathbf{X}$, $\varepsilon_1 = \max \mathbf{X}$.

Рассмотрим сначала случай $\mathbf{X}=\mathbf{X}_1$. Пусть $a=-1$, $b=1$, тогда, в силу симметрии множества \mathbf{X}_1 имеем $\varepsilon_0 = -\varepsilon_1$, $\varepsilon_1 > 0$, $\sum_{j=0}^J L_0^2(x_j) = \sum_{j=0}^J L_1^2(x_j)$ и $p_0 = p_1 = 1/2$, как это следует из (5.4). Функционал (5.5) принимает вид

$$d(\xi) = \sigma^2 (1 + \varepsilon_1^{-2} \frac{1}{J+1} \sum_{j=0}^J x_j^2).$$

Откуда легко видеть, что минимум $d(\xi)$ достигается в точке $\varepsilon_1 = 1$. Заметим, что при произвольных a и b , полагая $t = 1/2[a+b+(b-a)x]$ можно установить взаимно однозначное соответствие между $x \in [-1, 1]$ и $t \in [a, b]$, другими словами $\varepsilon_0 = \min \mathbf{X}_1$, $\varepsilon_1 = \max \mathbf{X}_1$. Решение для случая $\mathbf{X} = \mathbf{X}_2$ легко получить из предыдущего путем предельного перехода $J \rightarrow \infty$. Действительно, снова полагая $a=-1$, $b=1$, имеем $p_{0,1} = 1/2$ и $\lim_{J \rightarrow \infty} d(\xi) = \sigma^2 (1 + 3^{-1} \varepsilon_1^{-2})$.

Рассмотрим теперь случай $\mathbf{X} = \mathbf{X}_3$. Функционал (5.5) принимает вид

$$d(\xi) = \frac{\sigma^2}{J+1} [\tilde{d}(\xi)]^2; \quad \tilde{d}(\xi) = (\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^{-1} (\sqrt{\sum_{j=0}^J (x_j - \varepsilon_0)^2} + \sqrt{\sum_{j=0}^J (x_j - \varepsilon_1)^2}). \quad (6.1)$$

Дифференцируя $\tilde{d}(\xi)$ по ε_0 и ε_1 будем иметь

$$\frac{\partial \tilde{d}(\xi)}{\partial \varepsilon_0} = \frac{\sqrt{(J+1)\varepsilon_0^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_0} \sqrt{(J+1)\varepsilon_1^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_1} + (J+1)\varepsilon_0\varepsilon_1 + \Xi_2 - (\varepsilon_0 + \varepsilon_1)\Xi_1}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^2 \sqrt{(J+1)\varepsilon_0^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_0}},$$

$$\frac{\partial \tilde{d}(\xi)}{\partial \varepsilon_1} = - \frac{\sqrt{(J+1)\varepsilon_0^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_0} \sqrt{(J+1)\varepsilon_1^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_1} + (J+1)\varepsilon_0\varepsilon_1 + \Xi_2 - (\varepsilon_0 + \varepsilon_1)\Xi_1}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^2 \sqrt{(J+1)\varepsilon_1^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_1}}.$$

Знаменатели производных $(\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_0}$ и $(\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_1}$ не принимают нулевых значений; покажем, что числители также не имеют корней. Докажем неравенство:

$$\sqrt{(J+1)\varepsilon_0^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_0} \sqrt{(J+1)\varepsilon_1^2 + \Xi_2 - 2\Xi_1\varepsilon_1} > |(J+1)\varepsilon_0\varepsilon_1 + \Xi_2 - (\varepsilon_0 + \varepsilon_1)\Xi_1|.$$

Возводя в квадрат обе части неравенства, получим

$$(J+1)(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^2 (\Xi_2 - (J+1)^{-1} \Xi_1^2) > 0.$$

Последнее верно поскольку $(\forall J \geq 1) (\Xi_2 > (J+1)^{-1} \Xi_1^2)$. Таким образом, $(\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_0} > 0$ и $(\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_1} < 0$, следовательно, функция $d(\xi)$, задаваемая выражением (6.1), имеет глобальный минимум при $\varepsilon_0 = \min \mathbf{X}_3 = (J+1)^{-1}$; $\varepsilon_1 = \max \mathbf{X}_3 = 1$.

Приведенные в формулировке теоремы выражения для вероятностей, соответствующих найденным точкам плана, легко получаются из (5.4). ■

В виду того, что задача Q-оптимального планирования на множестве \mathbf{X}_1 при $J \rightarrow \infty$ равносильна задаче Q-оптимального планирования на множестве \mathbf{X}_2 , в дальнейшем мы будем рассматривать только Q-оптимальные планы на множествах \mathbf{X}_2 и \mathbf{X}_3 .

Теорема 6. Пусть измерения в эксперименте проводятся согласно (3.1) и пусть $\mathbf{X} = \mathbf{X}_2$, $a, b = \mp 1$, тогда непрерывный Q-оптимальный план равноточного квадратичного регрессионного эксперимента имеет вид (3.3), где $n = 2$, $\varepsilon_{0,2} = \mp 1$, $\varepsilon_1 = 0$, $p_{0,2} = 1/4$, $p_1 = 1/2$.

Доказательство. Поскольку $h = 2$, то план должен быть сосредоточен, по крайней мере, в $n + 1 = 3$ точках: $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \in \mathbf{X}$. Из соображений симметрии очевидно, что $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_0 = -\varepsilon_2$, $\varepsilon_2 > 0$. В этом случае, функционал, определяемый (5.6), принимает вид:

$$d(\xi) = 2^{-1}(\tilde{d}(\xi))^2; \quad \tilde{d}(\xi) = \sqrt{2/15}\varepsilon_2^{-2}(\sqrt{15\varepsilon_2^4 - 10\varepsilon_2^2 + 3} + \sqrt{5\varepsilon_2^2 + 3}).$$

Как и прежде, для оптимизации функционала $d(\xi)$ будем искать минимум $\tilde{d}(\xi)$. Дифференцируя $\tilde{d}(\xi)$ по ε_2 находим:

$$\tilde{d}'(\xi) = -\sqrt{\frac{2}{15}} \frac{(5\varepsilon_2^2 + 6)\sqrt{15\varepsilon_2^4 - 10\varepsilon_2^2 + 3} - 2(5\varepsilon_2^2 - 3)\sqrt{5\varepsilon_2^2 + 3}}{\varepsilon_2^3 \sqrt{15\varepsilon_2^4 - 10\varepsilon_2^2 + 3} \sqrt{5\varepsilon_2^2 + 3}}.$$

Нетрудно проверить, что $(5\varepsilon_2^2 + 6)\sqrt{15\varepsilon_2^4 - 10\varepsilon_2^2 + 3} > 2|5\varepsilon_2^2 - 3|\sqrt{5\varepsilon_2^2 + 3}$, следовательно, $\tilde{d}'(\xi) < 0$, т.е. $\tilde{d}(\xi)$ монотонно убывает. Таким образом, следует выбирать $\varepsilon_2 = 1$.

Значения вероятностей, соответствующих найденным точкам оптимального плана, получаются непосредственной подстановкой $\varepsilon_{0,2} = \mp 1$, $\varepsilon_1 = 0$ в (5.4). ■

Теорема 7. Пусть измерения в квадратичном полиномиальном регрессионном эксперименте проводятся по схеме (3.1) и пусть $\mathbf{X} = \mathbf{X}_3$, $m = 0$, $J \gg 1$, $\varepsilon_0 = M^{-1}$, $M = J + 1$, $\varepsilon_2 = 1$, тогда непрерывный условно Q-оптимальный план равноточного квадратичного регрессионного эксперимента имеет вид (3.3), где $n = 2$, $\varepsilon_1 = \frac{1}{2}$, $p_0 = [\frac{M-2}{M^2} \frac{Z_2}{Z_0} + \frac{4(M-1)}{M^2} \frac{Z_1}{Z_0} + 1]^{-1}$, $p_1 = [\frac{M-2}{4(M-1)} \frac{Z_2}{Z_1} + \frac{M^2}{4(M-1)} \frac{Z_0}{Z_1} + 1]^{-1}$, $p_2 = [\frac{4(M-1)}{M-2} \frac{Z_1}{Z_2} + \frac{M^2}{M-2} \frac{Z_0}{Z_2} + 1]^{-1}$, $Z_0 = [4\Xi_4 - 12\Xi_3 + 13\Xi_2 - 6\Xi_1 + 1]^{1/2}$, $Z_1 = [M^2\Xi_4 - 2(M+1)(M\Xi_3 + \Xi_1) + (M^2 + 4M + 1)\Xi_2 + 1]^{1/2}$, $Z_2 = [4M^2\Xi_4 - 2(M+2)(2M\Xi_3 + \Xi_1) + (M^2 + 8M + 4)\Xi_2 + 1]^{1/2}$.

Доказательство. Поскольку $h = 2$, то план ξ должен быть сосредоточен, по крайней мере, в $n + 1 = 3$ точках: $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \in \mathbf{X}$, две из которых заданы условием теоремы. Следовательно выражение (5.5) будет зависеть только от одного параметра: положения точки ε_1 , таким образом,

$$d(\xi) = \frac{\sigma^2}{M} \tilde{d}^2(\varepsilon_1), \quad \tilde{d}(\varepsilon_1) = \sum_{i=0}^2 \sqrt{\sum_{j=0}^{M-1} L_i^2(x_j)},$$

здесь $L_0(x) = \frac{(x-1)(x-\varepsilon_1)}{(M^{-1}-1)(M^{-1}-\varepsilon_1)}$, $L_1(x) = \frac{(x-1)(x-M^{-1})}{(\varepsilon_1-1)(\varepsilon_1-M^{-1})}$, $L_2(x) = \frac{(x-M^{-1})(x-\varepsilon_1)}{(1-M^{-1})(1-\varepsilon_1)}$. Для оптимизации $d(\xi)$ будем минимизировать $\tilde{d}(\varepsilon_1)$. Преобразуя $\tilde{d}(\varepsilon_1)$, получаем:

$$\tilde{d}(\varepsilon_1) = \sum_{i=0}^2 \tilde{d}_i(\varepsilon_1), \quad (6.2)$$

где $\tilde{d}_0(\varepsilon_1) = \frac{\sqrt{a_2 \varepsilon_1^2 + a_1 \varepsilon_1 + a_0}}{(1-M^{-1})(\varepsilon_1-M^{-1})}$, $\tilde{d}_1(\varepsilon_1) = \frac{\sqrt{b_0}}{(1-\varepsilon_1)(\varepsilon_1-M^{-1})}$, $\tilde{d}_2(\varepsilon_1) = \frac{\sqrt{c_2 \varepsilon_1^2 + c_1 \varepsilon_1 + c_0}}{(1-M^{-1})(1-\varepsilon_1)}$, $a_0 = \Xi_4 - 2\Xi_3 + \Xi_2$; $a_1 = -2(\Xi_3 - 2\Xi_2 + \Xi_1)$; $a_2 = \Xi_2 - 2\Xi_1 + M$; $b_0 = \Xi_4 - 2(1+M^{-1})\Xi_3 + (1+4M^{-1}+M^{-2})\Xi_2 - 2M^{-1}(1+M^{-1})\Xi_1 + M^{-1}$; $c_0 = \Xi_4 - 2M^{-1}\Xi_3 + M^{-2}\Xi_2$; $c_1 = -2(\Xi_3 - 2M^{-1}\Xi_2 + M^{-2}\Xi_1)$; $c_2 = \Xi_2 - 2M^{-1}\Xi_1 + M^{-1}$. Можно показать, что каждое из слагаемых $\tilde{d}_0(\varepsilon_1) + \frac{3}{4}\tilde{d}_1(\varepsilon_1)$ и $\frac{1}{4}\tilde{d}_1(\varepsilon_1) + \tilde{d}_2(\varepsilon_1)$ суммы (6.2) является выпуклой функцией $\varepsilon_1 \in (M^{-1}, 1)$, следовательно, функция (6.2) выпукла. Кроме того, можно показать, что $(\forall M \geq 19)(\tilde{d}(1/3) - \tilde{d}(1/2) > 0)$. Другими словами, при $M \geq 19$ точка минимума функции (6.2) $\varepsilon_1^* \in (1/3, 1)$, а, поскольку, в силу специфики решаемой задачи, этот отрезок содержит только одну точку из множества планирования $\mathbf{X} = X_3$, то $\varepsilon_1^* = 1/2$.

Вероятности, соответствующие точкам оптимального плана, находятся согласно (5.4). ■

Теорема 8. Пусть измерения в эксперименте проводятся согласно (3.1) и пусть $\mathbf{X} = \mathbf{X}_3$, $m > 0$, $J \rightarrow \infty$, тогда непрерывный Q-оптимальный план равноточного полиномиального регрессионного эксперимента порядка $n \geq 2$ имеет вид

$$\xi = \left\{ \begin{array}{l} 0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n \\ 1, 0, \dots, 0 \end{array} \right\}, \quad \varepsilon_i \in \mathbf{X}_3, \quad \varepsilon_i \neq 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Доказательство. В рассматриваемом случае (5.5) принимает вид

$$d(\xi) = \sigma^2 \left[\sum_{i=0}^n \sqrt{\lim_{J \rightarrow \infty} \frac{1}{J+1} \sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)} \right]^2. \quad (6.3)$$

Задача минимизации (6.3) равносильна задаче минимизации суммы

$$\tilde{d}(\xi) = \sum_{i=0}^n \tilde{d}_i(\xi), \quad \tilde{d}_i(\xi) = \sqrt{\lim_{J \rightarrow \infty} \frac{1}{J+1} \sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \varepsilon_j |\varepsilon_i - \varepsilon_j|^{-1}. \quad (6.4)$$

Здесь ε_i , $i = \overline{0, n}$ - точки плана, принадлежащие множеству \mathbf{X}_3 , получаемому при $J \rightarrow \infty$.

Для нахождения $\min_{\varepsilon_i} \tilde{d}(\xi)$, $i = \overline{0, n}$ составим систему уравнений

$$(\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_i} = 0, \quad i = \overline{0, n}. \quad (6.5)$$

Покажем, что она несовместна. Нам достаточно убедиться, что $(\forall \varepsilon_i \in \mathbf{X}_3)((\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_0} > 0)$. Определим множество индексов $I = \{i = (i_1, i_2, \dots, i_{n-1}) \in \overline{1, n}^{n-1} \mid i_1 < i_2 < \dots < i_{n-1}\}$, тогда при $n \geq 2$

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_0} \prod_{j=1}^n (\varepsilon_j - \varepsilon_0) = -\sum_{i \in I} \prod_{j=1}^{n-1} (\varepsilon_{i_j} - \varepsilon_0) < 0 \Rightarrow \frac{\partial \tilde{d}_0(\xi)}{\partial \varepsilon_0} = \frac{\prod_{j=1}^n \varepsilon_j \sum_{i \in I} \prod_{j=1}^{n-1} (\varepsilon_{i_j} - \varepsilon_0)}{\prod_{j=1}^n (\varepsilon_j - \varepsilon_0)^2} \geq 0.$$

Предположим, что $(\tilde{d}_0(\xi))'_{\varepsilon_0} = 0$. Это возможно только, если при $J \rightarrow \infty$ найдется хотя бы одна из точек ε_j , $j = \overline{1, n}$ плана, равная нулю. Однако, поскольку, $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \dots < \varepsilon_n$, такой точкой может быть только ε_0 , т.е. $\varepsilon_0 = (J+k)^{-1} \rightarrow 0$ при $J \rightarrow \infty$, $k = \text{const}$, $k \in \mathbb{Z}$. Наше предположение не выполняется и $(\tilde{d}_0(\xi))'_{\varepsilon_0} > 0$.

В свою очередь, если $i \geq 1$, то $(\tilde{d}_i(\xi))'_{\varepsilon_0} = (\varepsilon_i - \varepsilon_0)^{-2} \prod_{j=1}^n \varepsilon_j \prod_{j=1, j \neq i}^n |\varepsilon_i - \varepsilon_j|^{-1} \geq 0$.

Другими словами, $(\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_0} = \sum_{i=0}^n (\tilde{d}_i(\xi))'_{\varepsilon_0} > 0$ и система уравнений (6.5) несовместна. Кроме того, поскольку производные $(\tilde{d}(\xi))'_{\varepsilon_i}$ определены во всей рассматриваемой нами области, функция $\tilde{d}(\xi)$ принимает свои экстремальные значения на границах области. Из сказанного выше, в частности, следует, что необходимым условием обеспечения минимума $\tilde{d}(\xi)$ является совпадение точки плана ε_0 с $\min \mathbf{X}_3$, т.е., $\varepsilon_0 = (J+m+1)^{-1} \rightarrow 0$ при $J \rightarrow \infty$.

Вычислим теперь согласно (5.4) вероятности, соответствующие точкам плана: $p_i = \tilde{d}_i(\xi) / \tilde{d}(\xi)$, откуда легко видеть, что в силу (6.4) $p_0 = 1$ и $p_i = 0$, $i = \overline{1, n}$. Это означает, что все измерения необходимо сосредоточить в точке ε_0 в то время как выбор остальных n точек может быть произвольным. ■

Замечание 1. Согласно теореме 8 при $J \rightarrow \infty$ проведение полиномиального регрессионного эксперимента порядка $n \geq 2$ на множестве \mathbf{X}_3 в соответствии с Q-оптимальным планом предполагает выполнение всех измерений в точке $x' = 0$. При этом расположение остальных точек плана не является существенным. При $J < \infty$ получение строгих аналитических выражений для точек Q-оптимального плана полиномиального регрессионного эксперимента порядка n на \mathbf{X}_3 , доставляющих минимум функционалу (5.5), осложняется большой размерностью задачи оптимизации даже при малых n . В этом случае, для поиска Q-оптимальных планов, оказывается целесообразным применение

процедур численної оптимізації. Опіраючись на теорему 8, можна висказати гіпотезу о том, что при $J \gg 1$ в процедурах численної оптимізації, применяемых для определения расположения точек Q-оптимального плана на X_3 , в качестве начального приближения следует использовать точки плана, оптимального для экстраполяции в точку $x' = 0$.

Решение задачи экстраполяции в точку, лежащую вне интервала $[-1, 1]$ хорошо известно и дано в работе [12], где точки плана рекомендуется выбирать в точках экстремумов многочленов Чебышева I-го рода, т.е. $x_i = -\cos \frac{i\pi}{n}$, $i = \overline{0, n}$. Отобразив отрезок $[-1, 1]$ на отрезок $[(J+m+1)^{-1}, (m+1)^{-1}]$ с помощью функционального преобразования $f(x) = \frac{J}{2(J+m+1)(m+1)} [x+1+2\frac{m+1}{J}]$ получим

$$\varepsilon_i = \frac{J}{(J+m+1)(m+1)} \left[\frac{m+1}{J} + \sin^2 \frac{i\pi}{2n} \right], \quad i = \overline{0, n}. \quad (6.6)$$

Поскольку вероятности (5.4) для любого заданного набора точек плана обеспечивают минимум выражения (5.2), то после выбора в качестве точек плана, точек (6.6), величины соответствующих им вероятностей должны определяться согласно (5.4). Такие планы будем называть *асимптотически Q-оптимальными* планами на множестве планирования X_3 .

На рис. 6.1 приведены зависимости величины $d(\xi) = \frac{\sigma}{J+1} [\sum_{i=0}^n \sqrt{\sum_{j=0}^J L_i^2(x_j)}]^2$ от параметра J для различных планов при условии, что $n=3$, $m=9$, $\sigma=1$. Кружочками показана зависимость $d(\xi)$ от J для случая, когда точки плана ξ выбирались ближайшими к точкам $(J+m+1)^{-1} [1 + \frac{i}{n} \frac{J}{(m+1)}]$, $i = \overline{0, n}$, т.е. были расположены эквидистантно между крайними точками множества планирования X_3 . Квадратиками показана зависимость $d(\xi)$ от J для случая, когда точки плана ξ находились с использованием численных методов минимизации (метод барьерных функций). Наконец, ромбиками отмечена зависимость $d(\xi)$ от J для случая, когда точки плана ξ выбирались согласно (6.6).

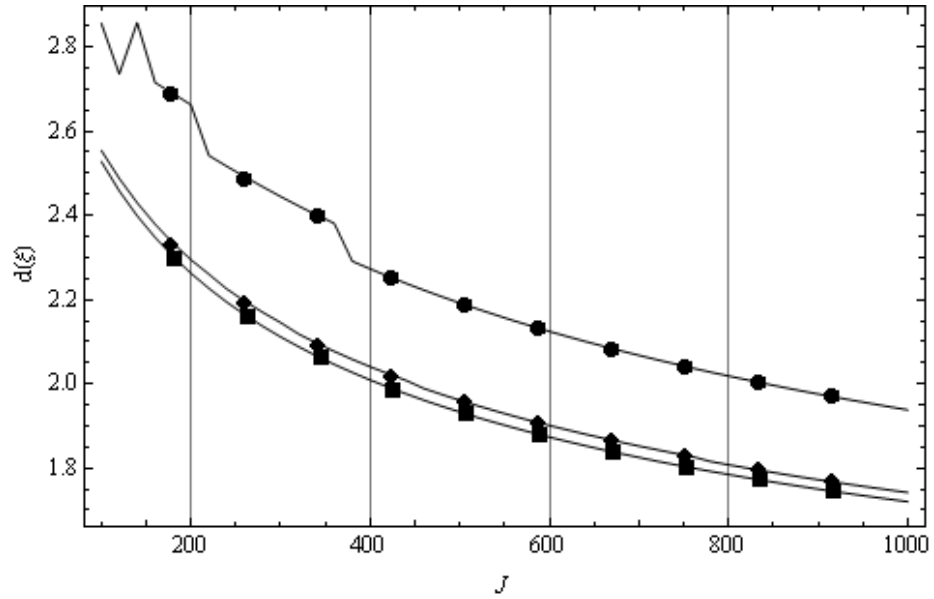


Рис. 6.1. Зависимости величины $d(\xi)$, задаваемой (5.5), от параметра J для различных планов равномерных экспериментов при условии, что $\mathbf{X} = \mathbf{X}_3$, $n = 3$, $m = 9$, $\sigma = 1$

Из анализа графиков, показанных на рис. 6.1, следует, что наихудший случай соответствует эквидистантному расположению точек плана, а точки асимптотически Q-оптимального плана обеспечивают значения величины $d(\xi)$ близкие к ее минимальному значению, найденному численными методами. \square

Построим теперь непрерывные Q-оптимальные планы полиномиальных регрессионных экспериментов третьего и более высоких порядков на множестве планирования $\mathbf{X}_2 = [-1, 1]$.

Замечание 2. На отрезке $[-1, 1]$ функции $L_i^2(x)$, $i = \overline{0, n}$ имеют $2n - 1$ экстремумов: $n - 1$ максимум и n минимумов. Минимумы достигаются в точках плана, за исключением самой точки ε_i . Принимая во внимание симметрию в расположении точек плана, нетрудно сделать вывод, что при $\varepsilon_n \leq 1$ на отрезках $[-1, -\varepsilon_n]$ и $[\varepsilon_n, 1]$ функции $L_i^2(x)$ будут монотонно возрастать, таким образом, с приближением ε_n к 1, интегралы $\int_{-1}^{-\varepsilon_n} L_i^2(x) dx$ и $\int_{\varepsilon_n}^1 L_i^2(x) dx$ стремятся к нулю. Откуда следует, что минимум (5.6) на множестве планирования $\mathbf{X}_2 = [-1, 1]$ целесообразно искать в предположении, что $\varepsilon_n = 1$. \square

Теорема 9. Пусть измерения в эксперименте проводятся согласно (3.1) и пусть $\mathbf{X} = \mathbf{X}_2$, $a, b = \mp 1$, $n = 3$, $\varepsilon_3 = 1$, тогда непрерывный условно Q-оптимальный план равномерного кубического регрессионного эксперимента

имеет вид (3.3), где $\varepsilon_{0,3} = \mp 1$, $\varepsilon_{1,2} = \mp \tau$, $\tau = \frac{1}{2\sqrt{7}} \sqrt{g - 9 + \sqrt{\frac{-g^3 + 303g - 1486}{g}}}$,

$$g = \sqrt{4\sqrt{577} \cos\left(\frac{1}{3} \arctg \frac{4\sqrt{74409}}{13817}\right) + 101}; \quad p_{0,3} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{T}\right)^{-1}, \quad p_{1,2} = [\sqrt{2}(\sqrt{2} + T)]^{-1},$$

$$T = \tau \sqrt{\frac{35\tau^4 - 28\tau^2 + 9}{7\tau^2 + 1}}.$$

Доказательство. С учетом симметрии множества \mathbf{X}_2 и условия $\varepsilon_3 = 1$ взаимное расположение точек плана будет $\varepsilon_0 = -\varepsilon_3 = -1$, $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$, $0 < \varepsilon_2 < 1$, а суммарная ошибка выборки (5.6)

$$d(\xi) = \frac{\sigma^2}{2(1-\varepsilon_2^2)^2} \left[\sqrt{\int_{-1}^1 (x-\varepsilon_2^2)(1-x)^2 dx} + \varepsilon_2^{-1} \sqrt{\int_{-1}^1 (1-x^2)^2 (x-\varepsilon_2)^2 dx} \right]^2. \quad (6.7)$$

Таким образом, задача Q-оптимального планирования сводится к задаче минимизации (6.7) по ε_2 , решая которую находим $\varepsilon_2 = \tau$. Наконец, соответствующие значения вероятностей точек плана получаем, подставляя в (5.4), $\varepsilon_{0,3} = \mp 1$ и $\varepsilon_{1,2} = \mp \tau$. ■

Замечание 3. В работе [2] рекомендуется выбирать точки непрерывного Q-оптимального плана полиномиального регрессионного эксперимента степени n на $\mathbf{X} = [-1, 1]$ так, чтобы они совпадали с корнями полинома $(1-x^2)P'_n(x)$. При этом вероятности точек плана должны быть $p_i = [|P_n(\varepsilon_i)| \sum_{i=0}^n |P_n(\varepsilon_i)|^{-1}]^{-1}$, где $P_n(x)$ - многочлен Лежандра степени n . Обозначим такие планы через ξ_L . В свою очередь, через ξ_Q будем обозначать планы, точки которых для кубической регрессии определяются теоремой 9, а для регрессии порядка $n \geq 4$ находятся численно методом Нелдера-Мида при условии, что точки начального приближения выбираются совпадающими со спектром соответствующего плана ξ_L . В табл. 1 приведены точки планов ξ_L и ξ_Q , а также отношения значений величины (5.5), вычисленных в этих точках для $n = 3 - 7$.

Непосредственный анализ данных табл. 1 показывает что планы ξ_L , предложенные в [2], являются квазиоптимальными в том смысле, что обеспечивают значение величины (5.5) близкие к минимальным. □

Обозначим через ξ_e план, согласно которому измерения следует проводить по одному разу в каждой точке множества планирования. D-оптимальные планы будем обозначать через ξ_D . Выполним оценку эффективности применения предложенных в работе Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов на множествах планирования \mathbf{X}_2 и \mathbf{X}_3 [14,15]. При этом под ξ_Q в случае множества \mathbf{X}_2 будут пониматься Q-оптимальные планы, определяемые табл. 1, в то время как для множества \mathbf{X}_3 через ξ_Q будут обозначаться асимптотически Q-оптимальные планы (см. замечание 1). Из анализа (3.10) следует, что $d(\xi_e) = \sigma^2(h+1)$. Кроме того, из теоремы 8 следует, что при $J \rightarrow \infty$ на \mathbf{X}_3 $d(\xi_Q) = \sigma^2$. Данные сравнения планов ξ_Q с ξ_e и ξ_D на множествах планирования \mathbf{X}_2 и \mathbf{X}_3 приведены в табл. 2 и 3 соответственно.

Таблица 1. Данные сравнения планов ξ_L и ξ_Q на X_2

n	ξ	ε_0	ε_1	ε_2	ε_3	$\frac{d(\xi_L)}{d(\xi_Q)}$
3	ξ_L	-1	-0,44721	-	-	1,00075
	ξ_Q	-1	-0,43662	-	-	
4	ξ_L	-1	-0,65465	0	-	1,00105
	ξ_Q	-1	-0,64361	0	-	
5	ξ_L	-1	-0,76506	-0,28523	-	1,00112
	ξ_Q	-1	-0,75507	-0,27953	-	
6	ξ_L	-1	-0,83022	-0,46885	0	1,00111
	ξ_Q	-1	-0,82319	-0,46182	0	
7	ξ_L	-1	-0,87174	-0,59170	-0,20930	1,00108
	ξ_Q	-1	-0,86559	-0,58450	-0,20622	

Таблица 2. Данные сравнения планов ξ_Q с ξ_e и ξ_D на X_2

n	$\frac{d(\xi_e)}{d(\xi_Q)}$	$\frac{d(\xi_D)}{d(\xi_Q)}$	$\frac{\det \mathbf{M}^{-1}(\xi_Q)}{\det \mathbf{M}^{-1}(\xi_D)}$
3	1,33789	1,14471	1,00140
4	1,29281	1,14635	1,00296
5	1,26151	1,14371	1,00494
6	1,23865	1,14051	1,00491
7	1,22128	1,13701	1,00657

Таблица 3. Данные сравнения планов ξ_Q с ξ_e и ξ_D на X_3

n	$J = 50, m = 9$			$J = 100, m = 9$		
	$\frac{d(\xi_e)}{d(\xi_Q)}$	$\frac{d(\xi_D)}{d(\xi_Q)}$	$\frac{\det \mathbf{M}^{-1}(\xi_Q)}{\det \mathbf{M}^{-1}(\xi_D)}$	$\frac{d(\xi_e)}{d(\xi_Q)}$	$\frac{d(\xi_D)}{d(\xi_Q)}$	$\frac{\det \mathbf{M}^{-1}(\xi_Q)}{\det \mathbf{M}^{-1}(\xi_D)}$
3	1,43461	1,18755	1,02104	1,56793	1,27488	1,01452
4	1,29681	1,11966	1,27497	1,53447	1,28552	1,04497
5	1,33292	1,17869	1,06132	1,52065	1,30189	1,04597
6	1,31430	1,18452	1,07553	1,48031	1,29977	1,07332
7	1,26158	1,16881	1,07624	1,39408	1,261862	1,14754

Анализ данных табл. 2 и 3 показывает, что с ростом порядка регрессионной модели n уменьшается выигрыш (в смысле отношения $d(\xi_e)/d(\xi_Q)$) от применения планов ξ_Q вместо ξ_e , оставаясь при этом больше для планов, построенных на множестве X_3 . Кроме того, как и следовало ожидать, с ростом

параметра J возрастает выигрыш, получаемый от применения на множестве планирования X_3 асимптотически Q-оптимальных планов взамен ξ_e планам. Заметим также, что, поскольку, значения элементов информационной матрицы плана ξ_D непосредственно не зависят от структуры множества планирования, то отношение $d(\xi_D)/d(\xi_Q)$, вычисленное для планов на X_3 , оказывается меньше соответствующего отношения, вычисленного для планов на X_2 .

7. Выводы

Рассмотрены вопросы планирования полиномиальных регрессионных экспериментов, оптимальных по критерию минимума суммарной дисперсии погрешности оценивания функции регрессии на множестве планирования (Q-оптимальных). В частности решена задача синтеза Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов по построению рабочих характеристик решающих правил распознавания сигналов методом статистического моделирования.

По результатам выполненных исследований сделаны следующие выводы.

1. Доказана применимость класса полиномиальных моделей для аппроксимации зависимости $\bar{P}(v)$ средней вероятности ошибки распознавания сигналов от объема обучающей выборки v адаптивными решающими правилами распознавания многомерных стационарных случайных последовательностей. В частности показано, что для правила (2.2) зависимость $\bar{P}(v)$ допускает аппроксимацию многочленами малых степеней от v^{-1} .

2. Дано общее решение задачи непрерывного Q-оптимального планирования полиномиальных регрессионных экспериментов произвольного порядка. Получены выражения, позволяющие для любого заданного набора точек плана определить такие значения соответствующих им вероятностей, при которых дисперсия выборочной функции регрессии принимает свое минимальное значение. Показано, что задача Q-оптимального планирования может быть решена в два этапа. На первом этапе определяется расположение точек оптимального плана, а затем вычисляются соответствующие этим точкам значения вероятностей. Данный подход вдвое сокращает размерность оптимизационной задачи, решаемой в ходе Q-оптимального планирования.

3. Показано, что задачу Q-оптимального планирования можно трактовать как задачу выпуклой оптимизации в линейном пространстве, составленном из всевозможных линейных комбинаций интерполяционных коэффициентов Лагранжа, а также функции, значения которой тождественно равны единице.

4. Уточнено решение задачи Q-оптимального планирования на множестве $X = [-1, 1]$ для полиномиальной регрессии порядков $n = 3 - 7$. В [2, стр. 155] предлагается выбирать спектр Q-оптимального плана так, чтобы он совпадал со спектром D-оптимального плана. Однако, в ходе проведенных исследований было установлено, что такие планы не являются строго оптимальными, хотя и обеспечивают значения величины дисперсии выборочной функции регрессии близкие к минимальным.

Для случая кубического регрессионного эксперимента аналитически обоснован Q-оптимальный план на множестве $X = [-1, 1]$. Кроме того, численно, с использованием метода Нелдера-Мида, были найдены точки Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов порядка $4 \leq n \leq 7$ на множестве $X = [-1, 1]$.

5. Введено понятие асимптотически Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов на множестве планирования X_3 . Показано, что при $J \gg 1$ такие планы обеспечивают значения Q-критерия близкие к оптимальным. Данные планы могут быть использованы в качестве начального приближения в процедурах численной оптимизации, применяемых для определения расположения точек Q-оптимального плана на X_3 .

Практическая значимость работы состоит в том, что применение синтезированных в работе Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов позволяет повысить точность построения рабочих характеристик решающих правил распознавания сигналов методом статистического моделирования.

Дальнейшие исследования предполагается посвятить разработке численных методов построения Q-оптимальных планов полиномиальных регрессионных экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента – М.: Наука, 1987. – 320с.
2. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента (планирование регрессионных экспериментов) – М.: Наука, 1971. – 312с.
3. Круг Г.К., Сосулин Ю.А., Фатуев В.А. Планирование эксперимента в задачах идентификации и экстраполяции. – М.: Наука, 1977. – 208с.
4. Melas V.V. Functional approach to optimal experimental design. – New York: Springer Science+Business Media, 2006. – 336p.
5. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика: исследование зависимостей. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 487с.
6. Румшицкий Л.З. Математическая обработка результатов эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 192с.
7. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ, 3-е изд.: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2007. – 912с.
8. Грауэрт Г., Либ И., Фишер В. Дифференциальное и интегральное исчисление. – М.: Мир, 1971. – 680с.
9. Омельченко А.В. Анализ влияния объема обучающей выборки на вероятность ошибки распознавания сигналов адаптивными решающими правилами // Прикладная радиоэлектроника. – 2006. – т.5, №3. – С.359-365.
10. Справочник по теории вероятностей и математической статистике / В.С. Королюк, Н.И. Портенко, А.В. Скороход, А.Ф. Турбин. – М.: Наука, 1985. – 640с.
11. Фомин Я.А., Тарловский Г.Р. Статистическая теория распознавания образов. – М.: Радио и связь, 1986. – 264с.

12. Hoel P.G., Levine A. Optimal spacing and weighting in polynomial prediction // *Ann. Math. Stat.* – 1964. – Vol. 35, № 4. – P.1553-1560.
13. Федоров А.В., Омельченко А.В. Планирование эксперимента при построении характеристик решающих правил распознавания сигналов. // *Материалы 17-й международной конференции «СВЧ техника и телекоммуникационные технологии» (КрыМиКо'2007)*. Севастополь: Вебер, 2007. – С.354-355.
14. Федоров А.В., Омельченко А.В. Эффективность планов полиномиального регрессионного эксперимента // *Материалы 1-й международной конференции «Интегрированные интеллектуальные робототехнические комплексы» (ИИРТК-2008)*. Киев: НАУ, 2008. – С.244-246.
15. Fedorov A.V., Omelchenko A.V. Criteria to design a polynomial regression experiment // *Proceedings of the 3-rd international conference on computer science and information technologies (CIST'2008)*. Lviv.: Vezha&Co, 2008. – P.24 - 26.
16. Fedorov A.V., Omelchenko A.V. Q-optimal design for polynomial regression experiments // *Тезисы докладов научно-технической конференции с международным участием «Компьютерное моделирование в наукоемких технологиях» (КМНТ-2010)*. Харьков: ХНУ им. Каразина, 2010. – С.319-323.
17. Fedorov A.V., Omelchenko A.V. Designs for polynomial regression experiments to construct operating characteristics of decision rules of signals recognition, // *Proceedings of the V-th international scientific and technical conference (CSIT 2010)*. Lviv: Vezha&Co, 2010 – P. 9-11.
18. Fedorov A.V., Omelchenko A.V. Q-optimal designing for polynomial regression experiment in problems of signals recognition decision rules research // *Тезисы докладов международной конференции «Современные проблемы математики и ее приложения в естественных науках и информационных технологиях» (Тараповские чтения 2011)*. Харьков: Вировец А. П. «Апостроф», 2011. – С.215.