УДК 519.2

В.В.Федоров
(Московский университет)

СВОЙСТВА ОПТИМАЛЬНЫХ ПЛАНОВ РЕГРЕССИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В СИНГУЛЯРНЫХ СЛУЧАЯХ

Рассмотрим регрессионную задачу с некоррелированными наблюдениями

$$y_i = \theta^T f(x) + \varepsilon_i \ , \ E\varepsilon_i \equiv 0 \ , \ E\varepsilon_i^2 \equiv 1 \ , \ \theta \in R_m \ .$$

При реализации эксперимента по плану ξ дисперсионная (ковариационная) матрица $D(\hat{\theta})$ наилучших несмещенных оценок $\hat{\theta}$ равна $D(\hat{\theta}) = N^{-1} M(\xi)$, где N - суммарное число наблюдений,

$$M(\xi) = \int_X f(x) f^T(x) \xi(dx),$$

X - компактная область (область действия).

Задача планирования (поиска оптимального плана) заключается в решении [3] экстремальной задачи

$$\xi^* = \operatorname{Arg} \inf_{\xi} \Psi [M(\xi)] \ . \qquad (I)$$

В регулярном случае ($rank\ M(\xi^*) = m$) задача (I) достаточно хорошо изучена. При сингулярных же оптимальных планах ($rank\ M(\xi^*) < m$) она доставляет немало хлопот, требуя специальных подходов.

Пусть далее, если не оговорено иное, $\Psi[M(\xi)] = l^T \cdot M^-(\xi) l$, где $l \in R_m$, A^- означает псевдообратную (в смысле Мура-Пенроуза) матрицу к A. Величина $l^T M^-(\xi) l$ равна дисперсии линейной комбинации $l^T\theta$, если последняя оцениваема [2] при плане ξ. Именно для этого критерия оптимальности Кифер [4] обратил внимание на сложность соответствующей проблемы оптимального планирования. В упомянутой работе показано, в частности, что стандартная формулировка теоремы эквивалентности (по существу, теоремы о необходимых и достаточных условиях оптимальности плана) непригодна в сингулярных случаях. Выпишем для удобства эту теорему.

Т е о р е м а I. Необходимым и достаточным условием оптимальности плана ξ^* при $rank M(\xi^*) = m$ является выполнение неравенства

$$[f^T(x) M^{-1}(\xi) l]^2 \le l^T M^{-1}(\xi) l \ .$$

Если $\int_{X'} \xi(dx) > 0$, то найдется такая точка $x \in X'$, что

$$[f^T(x)M^{-1}(\xi)l]^2 = l^T M^{-1}(\xi) l .$$

Доказательство теоремы I опирается на простую идею о том, что для выпуклого функционала (а $lM^{-1}(\xi)l$ – выпуклый по M или ξ) необходимым и достаточным условием является возрастание $l^T M^{-1}(\xi)l$ при движении по любому направлению $\xi = (1-\alpha)\xi^* + \alpha\xi_1$. В формальном плане при доказательстве используется формула

$$\left.\frac{\partial M^{-1}(\xi)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=0+} = M^{-1}(\xi^*) - M^{-1}(\xi^*)M(\xi_1)M^{-1}(\xi^*) , \tag{2}$$

откуда

$$\left.\frac{\partial l^T M^{-1}(\xi) l}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=0+} = l^T M^{-1}(\xi^*)l - l^T M^{-1}(\xi^*)M(\xi_1)M^{-1}(\xi^*)l . \tag{3}$$

К сожалению, формула (2) не имеет места ($M^-(\xi^*)$ – недифференцируема) при $rank\, M(\xi^*) < m$. В то же время функционал $l^T M^-(\xi^*)l$ имеет производную по любому направлению ξ .

Л е м м а I. Возможны представления:

а) $$\left.\frac{\partial}{\partial\alpha} l^T M^-(\xi)l\right|_{\alpha=0+} = l^T M^-(\xi^*)l - \inf_k g^T(\xi^*,k)M^-(\xi_1)g(\xi^*,k) , \tag{4}$$

где $$g(\xi,k) = l^T M^-(\xi) + k^T[I - M(\xi)M^-(\xi)]$$

б) $$\left.\frac{\partial}{\partial\alpha} l^T M^-(\xi)l\right|_{\alpha=0+} = l^T M^-(\xi^*)l - l^T M^-(\xi^*)M(\xi_1)M^-(\xi^*)l +$$
$$+ l^T M^-(\xi^*)M(\xi_1)\Delta(\xi^*)[\Delta(\xi^*)M(\xi_1)\Delta(\xi^*)]^-\Delta(\xi^*)M(\xi_1)M^-(\xi^*)l , \tag{5}$$

где $\Delta(\xi) = I - M^-(\xi)M(\xi)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Формулы (4) или (5) можно получить, если воспользоваться хорошо известным [5] представлением

$$l^T M^- l = \sup_h [2l^T h - h^T M h] ,$$

результатами о дифференцировании функций типа $\sup \Phi[h,l]$ ([I], гл. II), и тем фактом, что при оценивании линейной комбинации $l^T\theta$ имеет место равенство $M(\xi^*)M^-(\xi^*)l = l$. Нетрудно проверить, что при $rank\, M(\xi^*) = m$ формулы (4) и (5) переходят в (2).

Т е о р е м а 2. Необходимым и достаточным условием оптимальности плана ξ^* является выполнение неравенства

$$l^T M^-(\xi^*)l \geq \inf_k g^T(\xi^*,k)M^-(\xi)g(\xi^*,k)$$

или
$$l^T M^-(\xi^*) l \geqslant l^T M^-(\xi^*) M(\xi) M^-(\xi^*) l -$$
$$- l^T M^-(\xi^*) M(\xi) \Delta(\xi^*) [\Delta(\xi^*) M(\xi) \Delta(\xi^*)]^- \Delta(\xi^*) M(\xi) M^-(\xi^*) l \qquad (6)$$

для любого плана ξ, определенного на X, причем для $\xi = \xi^*$ в соотношении (6) имеет место равенство.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Рассуждения практически те же, что и в регулярном случае ([3], § 4, 5). Необходимо лишь вместо формулы (2) использовать формулы (4) или (5). Существенным является тот факт, что в регулярном случае

$$\sup_{\xi} l^T M^{-1}(\xi^*) M(\xi) M^{-1}(\xi^*)$$

обязательно может достигаться на множестве планов с одной опорной точкой, в то время как в сингулярном случае это, вообще говоря, не так.

Л и т е р а т у р а

1. П ш е н и ч н ы й Б.П. Необходимые и достаточные условия экстремума. М., Наука, 1969.

2. Р а о С.Р. Линейные статистические методы и их применение. М., Наука, 1968.

3. У с п е н с к и й А.Б., Ф е д о р о в В.В. Вычислительные аспекты метода наименьших квадратов при анализе и планировании регрессионных экспериментов. Изд-во МГУ, 1975.

4. Kiefer J. Optimum Designs in Regression Problems II.- Ann. Math. Stat., 1961, 32, 298-325.

5. Whittle P. Some General Points in the Theory of Optimal Ecperimental Design.-JRSS (B), 1973, 35, 123-130.