На правах рукописи

Гученко Роман Александрович

ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ДЛЯ ДИСКРИМИНАЦИИ РЕГРЕССИОННЫХ МОДЕЛЕЙ

Специальность 01.01.07 —
вычислительная математика

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2017

Работа выполнена на кафедре статистического моделирования математико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного университета.

Научный руководитель:	**Мелас Вячеслав Борисович**, доктор физико-математических наук, профессор
Официальные оппоненты:	**Кошкин Геннадий Михайлович**, доктор физико-математических наук, профессор, Томский государственный университет, профессор кафедры теоретической кибернетики
	Сипин Александр Степанович, доктор физико-математических наук, доцент, Вологодский государственный университет, профессор кафедры прикладной математики
Ведущая организация:	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

Защита состоится «__» ____________ 201_г. в __ часов на заседании диссертационного совета Д 212.232.49 на базе Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский пр., д. 28, ауд. 405.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке им. М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9 и на сайте: `https://disser.spbu.ru/files/disser2/disser/JdbBcV29JB.pdf`.

Автореферат разослан «__» ____________ 201_г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук, профессор Чурин Ю.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Математическая теория планирования эксперимента предоставляет методологию для оптимального выбора условий проведения наблюдений при практических исследованиях, которая позволяет получать результаты, касающиеся числовых характеристик регрессионных моделей для изучаемых явлений, с заданной степенью статистической погрешности при наименьших затратах. Название этому направлению в науке дала книга «The Design of Experiments» знаменитого английского статистика Р. Фишера. Базовый аппарат теории был разработан во второй половине прошлого века в трудах Дж. Элфвинга, Дж. Кифера, Дж. Вольфовица, К. Рао, В. Стаддена, В.В. Федорова, Г. Уинна и других авторов. Целью планирования является нахождение (приближенного) плана эксперимента — дискретной вероятностной меры, заданной на множестве всех возможных условий проведения измерений, оптимальной с точки зрения некоторого заранее заданного критерия.

Большинство работ по оптимальному планированию экспериментов посвящено планам для оценивания неизвестных параметров регрессионных моделей. В этом случае предполагается, что функция регрессии задана с точностью до неизвестных параметров, которые необходимо оценить с некоторой точки зрения оптимально посредством выбора условий для проведения измерений. Примерами оптимальных планов для оценивания параметров являются D-оптимальные планы, минимизирующие объем доверительного эллипсоида для оценок неизвестных параметров в предположении о независимости, гомоскедастичности и нормальной распределенности случайных ошибок измерения, или E-оптимальные планы, минимизирующие в том же эллипсоиде длину максимальной оси. Однако при проведении прикладных исследований в различных областях знаний нередко возникает ситуация, когда вид регрессионной модели с точностью до параметров не известен a priori до проведения эксперимента, но тем не менее у экспертов есть несколько гипотез о возможном виде модели. В этом случае проводят эксперимент специального вида — дискриминационный эксперимент, планируемый таким образом, чтобы по его результатам можно было оптимально относительно некоторого критерия проверить гипотезу об истинном виде исследуемой регрессионной модели. Самыми популярными критериями, используемыми для решения задач дискриминации, являются критерий T-оптимальности, введенный в работах Аткинсона и Федорова, и различные его обобщения.

Критерий T-оптимальности для дискриминации двух конкурирующих моделей предполагает наличие априорно заданного фиксированного значения параметров для одной из моделей. Это его свойство называется локальностью. Современная статистическая практика требует нахождения планов, устойчивых относительно некорректного выбора фиксированного вектора параметров, таких как байесовские оптимальные планы, где вместо точечного фиксированного значения параметров берется некоторое распределение. Явный вид опорных точек и весов даже для локального T-оптимального плана получен в литературе только в случае дискриминации полиномиальных моделей, отличающихся на один или на два порядка. Отыскание же байесовских планов в явном виде обычно не представляется возможным. Для численного нахождения дискриминационных планов обычно используют различные варианты алгоритма, предложенного Аткинсоном и Федоровым. В случае байесовских планов применение этого алгоритма становится проблематичным. Данная диссертационная работа посвящена разработке эффективных численных алгоритмов для нахождения дискриминационных планов, а также нахождению T-оптимальных планов в явном виде для некоторых специальных пар регрессионных моделей.

Степень разработанности темы. Первые работы по планированию дискриминационных экспериментов появились в начале 70-х годов прошлого века и были связаны с дискриминацией вложенных моделей, когда одна модель является частным случаем другой при определенных значениях параметров. Так в [1] для дискриминации между двумя вложенными полиномами при стандартных предположениях об ошибках было предложено искать план, доставляющий минимум объему доверительного эллипсоида для тех параметров более общей модели, которые не входят в менее общую.

Другой критерий оптимальности, T-критерий, применимый для решения задачи о дискриминации двух конкурирующих регрессионных моделей в случае независимых нормально распределенных гомоскедастичных ошибок, не предполагающий вложенности этих моделей, был введен в [2]. В этой же работе был предложен численный алгоритм для нахождения

T-оптимальных планов. Критерий T-оптимальности тесно связан с задачей наилучшей чебышёвской аппроксимации. Наиболее полно соответствующие результаты изложены в [3], а в [4] они использованы для получения в явном виде T-оптимальных планов для дискриминации двух полиномиальных моделей, отличающихся на два порядка.

Базовый критерий T-оптимальности имеет ряд существенных ограничений. Одно из ограничений заключается в требовании о нормальности и гомоскедастичности ошибок наблюдения. На случай дискриминации двух моделей при нормальных гетероскедастичных ошибках T-критерий был обобщен в [5]. В [6] был предложен критерий KL-оптимальности, основанный на расстояниях Кульбака–Лейблера и связанный с тестом отношения правдоподобия, не требующий нормальности и пригодный для дискриминации двух произвольных конкурирующих моделей для плотностей ошибок. Критерии из работ [2] и [5] являются частными случаями KL-критерия. В [7] был введен полу-параметрический критерий, в котором функции регрессии для всех конкурирующих моделей и закон распределения ошибок для одной из них считаются известными, а закон распределения для оставшейся модели получается как решение специальной задачи вариационного исчисления. Другое ограничение T-критерия состоит в количестве сравниваемых моделей. Авторы оригинальной работы предложили в [8] вариант его обобщения на случай дискриминации произвольного количества конкурирующих моделей. Симметричная версия T-критерия для дискриминации многих моделей, T_P-критерий, а также численный алгоритм для нахождения оптимальных планов, основанный на многомерной чебышёвской аппроксимации, были введены в [9]. Еще одно ограничение T-критерия — зависимость от априорных значений для параметров одной из моделей, может быть компенсировано с помощью байесовского подхода, обсуждавшегося еще в [2].

Цели и задачи работы. Целью диссертации является исследование различных критериев оптимальности для дискриминации конкурирующих регрессионных моделей, а также разработка эффективных алгоритмов для численного нахождения соответствующих оптимальных планов. Для достижения поставленной цели необходимо было сформулировать и решить следующие задачи:

1. Использовать аппарат теории чебышёвской аппроксимации для нахождения в явном виде T-оптимальных планов в случае дискриминации полиномиальных моделей и моделей, отличающихся от полиномиальных добавлением простого дробно-рационального слагаемого.
2. Предложить метод построения байесовских T_P-оптимальных планов для дискриминации нескольких моделей, преодолевающий недостатки метода Аткинсона и Федорова.
3. Обобщить этот метод на случай байесовских KL_P-оптимальных планов.
4. Исследовать полу-параметрические критерии оптимальности и их связь с классическими критериями, разработать эффективные алгоритмы для численного нахождения соответствующих оптимальных планов.

Научная новизна. Все результаты, представленные в диссертационной работе, являются новыми.

Теоретическая и практическая ценность работы. Результаты работы имеют теоретическую ценность и могут быть использованы при планировании реальных экспериментов. В частности, на второй фазе клинических исследований для установления вида зависимости эффекта препарата от дозы, а также для дискриминации моделей аналитической химии, описывающих прошедшую реакцию.

Методология и методы исследования. В работе применяются методы теории аппроксимации, функционального анализа, математической статистики, вариационного исчисления и общие методы теории планирования эксперимента. Численные примеры выполнены с использованием статистического пакета R.

Положения, выносимые на защиту.

1. В явном виде получены T-оптимальные планы для дискриминации полиномиальных моделей и аналогичных моделей, содержащих дополнительное дробно-рациональное слагаемое.
2. Предложен метод построения байесовских T_P-оптимальных планов путем их сведения к локально оптимальным планам. Разработан двухэтапный алгоритм для нахождения локальных T_P-оптимальных планов, состоящий в чередовании обновления носителя плана и оптимизации по его весам. Доказана сходимость этого алгоритма. Для оптимизации по весам предложено две эффективные численные процедуры. Проведено сравнение наибо-

лее часто используемого в литературе алгоритма с разработанным алгоритмом, выявившее значительное преимущество последнего.

3. Сформулирован байесовский критерий KL_P-оптимальности и теорема эквивалентности для него. Результаты, касающиеся байесовских T_P-оптимальных планов, обобщены на случай байесовских KL_P-оптимальных планов.
4. Предложен эффективный метод численного нахождения полу-параметрических оптимальных планов. Доказаны две теоремы, связывающие полупараметрические критерии с критерием T-оптимальности.

Степень достоверности и апробация результатов. Правильность T-оптимальных планов, выведенных аналитически во второй главе, подтверждается численными результатами. Все планы, полученные численно, были проверены на оптимальность с помощью теорем эквивалентности. Для утверждений, доказанных диссертантом, в работе представлены полные доказательства; для остальных утверждений приведены ссылки на доказательства.

Основные результаты диссертационной работы докладывались на семинаре кафедры статистического моделирования математико-механического факультета СПбГУ. Исследования по теме диссертации были частично поддержаны грантами СПбГУ (проект 6.38.435.2015) и РФФИ (проект 17-01-00161).

Публикации на тему диссертации. Основные результаты диссертации изложены в трех работах [11], [12], [13], которые опубликованы в журналах, индексируемых системой Scopus.

Вклад диссертанта в совместные работы. Вторая глава основана на работе [11], в которой все результаты и основной текст принадлежат диссертанту. Постановка задачи и текст вводной секции принадлежат соавтору. Третья глава основана на работе [12], в которой метод сведения байесовских планов к локально оптимальным, алгоритм 3.2, секция про метод оптимизации по весам, основанный на квадратичном программировании, теорема 3.3 и все численные результаты принадлежат диссертанту. Постановка задачи, итоговый английский текст и остальные теоремы принадлежат соавторам. Четвертая глава основана на работе [13], в которой адаптация алгоритма из предыдущей работы на случай KL_P-оптимальных планов и все численные результаты принадлежат диссертанту. Постановка задачи, итоговый английский текст и все остальные результаты принадлежат соавторам. Пятая глава основана на работе, выполненной во время визита диссертанта в Рурский университет Бохума совместно с Х. Детте, В.Б. Меласом и В.К. Вонгом. Теоремы 15, 17 и 18, лемма 4, а также все численные результаты принадлежат диссертанту.

Структура работы. Работа состоит из введения, пяти глав, заключения, библиографии, списка рисунков и списка таблиц. Общий объем — 119 страниц, включая 9 рисунков и 14 таблиц. Библиография содержит 37 наименований.

Содержание работы.

Во введении аргументирована актуальность темы диссертации, приведен обзор соответствующей литературы, определены цели и задачи работы, обоснована их научная ценность.

Первая глава является обзорной. В ней сформулирована задача планирования эксперимента для дискриминации регрессионных моделей, описано ее место в математической статистике и в теории планирования эксперимента, приведен критерий T-оптимальности из [2], а также дан детальный обзор связанных с ним результатов. Планом эксперимента называется дискретная вероятностная мера ξ, заданная на некотором компактном множестве планирования $\mathcal{X}$. Пусть даны две конкурирующие регрессионные модели $\eta_1(x,\theta_1)$ и $\eta_2(x,\theta_2)$, определенные на $\mathcal{X}$. План называется T-оптимальным для дискриминации $\eta_1(x,\theta_1)$ и $\eta_2(x,\theta_2)$, если он доставляет максимум величине

$$T_{1,2}(\xi) = \inf_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_{\mathcal{X}} \left[\eta_1(x,\overline{\theta}_1) - \eta_2(x,\theta_2)\right]^2 \xi(dx),$$

где $\overline{\theta}_1$ — это некоторый фиксированный вектор априорно заданных параметров для первой модели, а Θ_2 — множество возможных параметров для второй модели. Критерий связан с нижней границей для мощности χ^2-теста при проверке простой гипотезы о том, что верна первая модель с фиксированными параметрами $\overline{\theta}_1$, против сложной альтернативы о том, что верна вторая модель при каких-то значениях параметров из Θ_2. Нахождение аналитических представлений для точек и весов T-оптимальных планов является трудной минимаксной задачей, которая решена в литературе только для случая дискриминации двух полиномиальных моделей, отличающихся на один или на два порядка, поэтому для получения T-оптимальных планов обычно используют численные алгоритмы. В работе [3] было доказано, что задача нахождения T-оптимального плана связана с задачей чебышёвской аппроксимации в том смысле, что опорные точки оптимального плана являются точками максимума функции, представляющей из себя квадрат разности между регрессионной моделью из нулевой гипотезы и ее наилучшей чебышёвской аппроксимации альтернативной моделью.

Во второй главе в явном виде получены T-оптимальные планы для дискриминации полиномиальных моделей и моделей, отличающихся от полиномиальных добавлением дробно-рационального слагаемого. Для пары конкурирующих моделей

$$\eta_1(x,\theta_1) = \sum_{i=0}^{m} \theta_{1,i} x^i + \frac{1}{x-a}, \qquad \eta_2(x,\theta_2) = \sum_{i=0}^{m} \theta_{2,i} x^i, \tag{1}$$

заданных на промежутке $x \in [-1,1]$ при $a > 1$, применив результат из [3] и известные факты из теории аппроксимации удалось доказать, что опорные точки T-оптимального плана являются корнями полиномов специального вида.

Теорема 1. *T-оптимальный план для дискриминации моделей (1) сосредоточен в $(m+2)$-х точках из отрезка $[-1,1]$, причем точки ± 1 принадлежат плану при любом m, а опорные точки из интервала $(-1,1)$ являются корнями полиномов*

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= U_m(x) - 2\alpha U_{m-1}(x) + \alpha^2 U_{m-2}(x), && m \geq 2, \\ \Psi_2(x) &= \left(\alpha^2 - 1\right) T_m(x) + \left(2\alpha - x - \alpha^2 x\right) U_{m-1}(x), && m \geq 1, \end{aligned}$$

где $\alpha = a - \sqrt{a^2 - 1}$, а $T_m(x)$ и $U_m(x)$ — это полиномы Чебышёва степени m первого и второго рода соответственно.

Корни полиномов из этой теоремы, а значит и опорные точки соответствующего плана, могут быть найдены для небольших m в явном виде. Аналогичный результат можно получить для двух других пар конкурирующих моделей

$$\eta_1(x,\theta_1) = \sum_{i=0}^{m} \theta_{1,i} x^i + \frac{1}{x^2 - a}, \qquad \eta_2(x,\theta_2) = \sum_{i=0}^{m} \theta_{2,i} x^i; \tag{2}$$

$$\eta_1(x,\theta_1) = \sum_{i=0}^{m} \theta_{1,i} x^i + \frac{x}{x^2 - a}, \qquad \eta_2(x,\theta_2) = \sum_{i=0}^{m} \theta_{2,i} x^i; \tag{3}$$

заданных на промежутке $x \in [-1,1]$ при $a > 1$.

Теорема 2. *T-оптимальные планы для дискриминации моделей (2) и (3) сосредоточены в $(m+2)$-х точках. Если m — нечетное, то опорные точки из интервала $(-1,1)$ плана для моделей (2) совпадают с корнями полиномов*

$$\Psi_1(x) = U_m(x) - 2\alpha^2 U_{m-2}(x) + \alpha^4 U_{m-4}(x), \qquad m \geq 4,$$
$$\Psi_2(x) = 2x\left(\alpha^4 - 1\right) T_{m-1}(x) + \left(\alpha^4 + 2\alpha^2 + 1 - 2x^2[\alpha^4 + 1]\right) U_{m-2}(x), \quad m \geq 2,$$

а если m — четное, то это верно для моделей (3). Точки ± 1 принадлежат оптимальному плану при любом m. Здесь $\alpha = a - \sqrt{a^2 - 1}$.

Глава завершается двумя примерами. В первом примере T-оптимальный план для дискриминации EMAX-модели и квадратичной модели на промежутке $[0,500]$ находится в явном виде с помощью теоремы 1. Во втором примере для тех же моделей численно находится робастный план, оптимальный с точки зрения стандартизированного критерия

$$T_{\text{SB}}(\xi) = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^{h} \frac{T_{1,2}(\xi,\theta_1^{(i)})}{\sup_\zeta T_{1,2}(\zeta,\theta_1^{(i)})},$$

где $\theta_1^{(i)}$ — это различные значения для фиксированных параметров первой модели. Численные алгоритмы для нахождения планов дискриминации подробно обсуждаются в третьей главе работы. Вычисления в этом примере могут быть существенно упрощены, так как $\sup_\zeta T_{1,2}(\zeta,\theta_1^{(i)})$ равен квадрату величины наилучшего приближения для соответствующей задачи чебышёвской аппроксимации. Изложение в этой главе опирается на материал из работы [11].

В третьей главе предложен метод для численного построения байесовских T_P-оптимальных планов. У стандартного критерия T-оптимальности есть несколько существенных ограничений. В частности, он позволяет сравнить только две модели и он является локальным, то есть зависит от фиксированного априорного значения параметров одной из моделей. Для дискриминации нескольких моделей в работе [9] был введен критерий T_P-оптимальности. Пусть имеется ν конкурирующих регрессионных моделей $\{\eta_i(x,\theta_i)\}_{i=1}^{\nu}$, $x \in \mathcal{X}$, $\theta_i \in \Theta_i$. План называется T_P-оптимальным для дискриминации $\{\eta_i(x,\theta_i)\}_{i=1}^{\nu}$, если он доставляет максимум величине

$$T_P(\xi) = T_P(\xi, \overline{\theta}_1, \ldots, \overline{\theta}_\nu) = \sum_{i,j=1}^{\nu} p_{i,j} \inf_{\theta_{i,j} \in \Theta_j} \int_{\mathcal{X}} \Big[\eta_i(x,\overline{\theta}_i) - \eta_j(x,\theta_{i,j})\Big]^2 \xi(dx), \quad (4)$$

где $p_{i,j} \geq 0$, $p_{i,i} = 0$ — это веса, задающие значимость каждого попарного сравнения, а $\overline{\theta}_i$ — это фиксированные параметры для соответствующих моделей; $i, j = 1, \ldots, \nu$. Ввиду зависимости от $\overline{\theta}_i$ критерий T_P-оптимальности также является локальным. Одним из способов компенсации локальности критерия является введение его байесовской версии, где вместо фиксированного значения параметров используется фиксированное априорное распределение. План называется байесовским T_P-оптимальным для дискриминации $\{\eta_i(x,\theta_i)\}_{i=1}^{\nu}$, если он доставляет максимум величине

$$T_P^{\mathrm{B}}(\xi) = \sum_{i,j=1}^{\nu} p_{i,j} \int_{\Theta_i} \inf_{\theta_{i,j} \in \Theta_j} \int_{\mathcal{X}} \Big[\eta_i(x,\lambda_i) - \eta_j(x,\theta_{i,j})\Big]^2 \xi(dx) \mathcal{P}_i(d\lambda_i), \quad (5)$$

где каждая мера $\mathcal{P}_i$ задает априорное распределение на Θ_i для параметров θ_i модели $\eta_i(x,\theta_i)$, $i = 1, \ldots, \nu$. Байесовский критерий (5) можно легко свести к локальному критерию (4), взяв распределения $\mathcal{P}_i$ дискретными, что соответствует приближению интегралов по априорным распределениям конечными суммами на сетках из Θ_i. Критерий (5) с дискретными $\mathcal{P}_i$ — это локальный T_P-критерий вида (4) с той лишь разницей, что он предусматривает гораздо бо́льшее количество сравнений между различными функциями η_i и η_j, чем критерий (4), причем одни и те же пары η_i и η_j могут входить в критерий по нескольку раз с разными значениями фиксированных параметров для i-й модели.

Таким образом, для численного нахождения байесовских планов необходим эффективный алгоритм для нахождения локальных планов с большим количеством сравнений. Будем считать, что множества Θ_i компактны и каждая модель $\eta_i(x,\theta_i)$ непрерывна по x и дифференцируема по θ_i, а также что для любого плана ξ, для которого $T_P(\xi) > 0$, и для любых i и j, таких что соответствующий вес $p_{i,j} \neq 0$, $\inf_{\theta_{i,j}\in\Theta_j}$ в (4) достигается в единственной точке $\widehat{\theta}_{i,j} = \widehat{\theta}_{i,j}(\xi)$ во внутренности множества Θ_j. Введем функцию $\Psi(x,\xi) = \sum_{i,j=1}^{\nu} p_{i,j}\big[\eta_i(x,\overline{\theta}_i) - \eta_j(x,\widehat{\theta}_{i,j}(\xi))\big]^2$.

В качестве базового алгоритма для построения локальных планов в работе берется версия алгоритма Аткинсона–Федорова из [2], адаптированная для нахождения T_P-оптимальных планов.

Алгоритм 1. *Пусть ξ_0 — некоторый начальный план, а $(\alpha_s)_{s=0}^{\infty}$ — положительная вещественная последовательность, удовлетворяющая условиям $\lim_{s\to\infty}\alpha_s = 0$, $\sum_{s=0}^{\infty}\alpha_s = \infty$, $\sum_{s=0}^{\infty}\alpha_s^2 < \infty$. Тогда для $s = 0,1,\ldots$ поочередно выполняем два шага:*

(1) Находим точку $x_{s+1} = \arg\max_{x\in\mathcal{X}}\Psi(x,\xi_s)$,

(2) Вычисляем новый план $\xi_{s+1} = (1-\alpha_s)\xi_s + \alpha_s\xi(x_{s+1})$.

Сходимость этого алгоритма может быть доказана аналогично сходимости алгоритма из [2]. Величина $T_P(\xi)/\sup_\zeta T_P(\zeta)$ называется T_P-эффективностью плана. Если план ξ^* является T_P-оптимальным, а план ξ — нет, то по теореме эквивалентности существует $\dot{x} \in \mathcal{X}$, такой что $\Psi(\dot{x},\xi) > T_P(\xi^*)$. Из этого соотношения следует, что эффективность можно оценить снизу с помощью величины $T_P(\xi)/\max_{x\in\mathcal{X}}\Psi(x,\xi)$, которая может быть вычислена на каждой итерации. Критерий остановки — достижение алгоритмом заданной нижней границы эффективности. Алгоритм 1 порождает последовательность планов ξ_s с постоянно возрастающим количеством опорных точек. В финальном плане ξ_m его можно сократить с помощью кластеризации или через нахождение экстремумов функции $\Psi(x,\xi_m)$, но с увеличением числа точек в носителе ξ_s во время итерационного процесса бороться гораздо сложнее. Для достижения заданной нижней границы эффективности может потребоваться несколько сотен итераций, что влечет большую сложность при вычислении в критерии (4) оптимальных значений $\widehat{\theta}_{i,j} = \arg\inf_{\theta_{i,j}\in\Theta_j}\int_{\mathcal{X}}\big[\eta_i(x,\overline{\theta}_i) - \eta_j(x,\theta_{i,j})\big]^2\xi(dx)$.

Для нахождения локальных T_P-оптимальных планов предлагается следующая альтернатива алгоритму 1.

Алгоритм 2. *Пусть ξ_0 — некоторый начальный план. Тогда для $s = 0,1,\ldots$ поочередно выполняем два шага:*

(1) Пусть $\mathcal{S}_{[s]}$ — носитель плана ξ_s. Находим множество $\mathcal{E}_{[s]}$ всех локальных максимумов функции $\Psi(x,\xi_s)$ на $\mathcal{X}$ и полагаем $\mathcal{S}_{[s+1]} = \mathcal{S}_{[s]} \cup \mathcal{E}_{[s]}$.
(2) Пусть $\xi = \{\mathcal{S}_{[s+1]}, \omega\}$ — план с носителем $\mathcal{S}_{[s+1]}$ и весами ω. Находим T_P-оптимальный план в классе всех планов с носителем $\mathcal{S}_{[s+1]}$, то есть находим вектор $\omega_{[s+1]}$, доставляющий максимум функции

$$g(\omega) = T_{\mathrm{P}}(\{\mathcal{S}_{[s+1]},\omega\}) = \sum_{i,j=1}^{\nu} p_{i,j} \inf_{\theta_{i,j}\in\Theta_j} \sum_{x\in\mathcal{S}_{[s+1]}} \left[\eta_i(x,\overline{\theta}_i) - \eta_j(x,\theta_{i,j})\right]^2 w_x,$$

где w_x — вес в точке $x \in \mathcal{S}_{[s+1]}$. Убираем из $\mathcal{S}_{[s+1]}$ точки, которым в оптимальном векторе весов $\omega_{[s+1]}$ соответствуют нули, и получаем новый носитель, который также обозначаем $\mathcal{S}_{[s+1]}$; ξ_{s+1} определяем как план с носителем $\mathcal{S}_{[s+1]}$ и соответствующими ненулевыми весами из $\omega_{[s+1]}$.

На первом шаге алгоритма 2 вместо одного из глобальных максимумов функции $\Psi(x,\xi_s)$ к носителю промежуточного плана добавляются все ее локальные максимумы. Это делается из эвристических соображений. Накапливания точек в носителе промежуточного плана не происходит благодаря удалению точек с нулевыми весами в конце второго шага, причем доказан следующий результат о числе точек, веса которых не являются нулевыми:

Теорема 3. *В конце каждой итерации алгоритма 2 число точек в носителе $\mathcal{S}_{[s+1]}$ плана ξ_{s+1} не превосходит максимального числа корней уравнения $\Psi(x,\xi_{s+1}) = c$, где $c \in [0, \max_{x\in\mathcal{X}} \Psi(x,\xi_{s+1})]$.*

Наиболее вычислительно затратным является второй шаг алгоритма, где во время поиска максимума по ω при каждом вычислении функции $g(\omega)$ необходимо также находить $\inf_{\theta_{i,j}\in\Theta_j}$, $i,j = 1,\ldots,\nu$. Для эффективной оптимизации по весам на втором шаге в работе предложены две численные процедуры. Первая процедура основана на линеаризации функции $g(\omega)$ по параметрам $\theta_{i,j}$ и сведении оптимизационной задачи к квадратичному программированию. Вторая процедура представляет из себя специализированный градиентный метод. Для алгоритма 2 доказан следующий результат о сходимости:

Теорема 4. *Пусть $\{\xi_s\}_{s\geq 0}$ — последовательность планов, порождаемая алгоритмом 2. Тогда $\lim_{s\to\infty} T_P(\xi_{s+1}) = T_P(\xi^*)$, где ξ^* — T_P-оптимальный.*

Оставшаяся часть главы посвящена численным примерам построения байесовских T_P-оптимальных планов, в которых демонстрируется преимущество предложенного алгоритма над базовым. Один из построенных T_P-оптимальных планов для дискриминации моделей зависимости эффекта лекарства от дозы предусматривает 246 попарных сравнений конкурирующих регрессионных моделей. В работе [9] для аналогичных моделей строились планы, предусматривающие не более 6 попарных сравнений. Также численные эксперименты показали, что алгоритм 2 быстрее алгоритма 1 от 60 до 100 раз в зависимости от количества попарных сравнений в критерии. Изложение в этой главе опирается на материал из работы [12]. Алгоритм 2 реализован в пакете [10] для языка R.

В четвертой главе все результаты, полученные для байесовских T_P-оптимальных планов, обобщены на случай байесовских KL_P-оптимальных планов. Критерий T-оптимальности предполагает нормальную распределенность случайных ошибок наблюдения, а следовательно и результатов измерений. В [6] был предложен критерий KL-оптимальности, основанный на расстояниях Кульбака–Лейблера, не требующий нормальности и подходящий для дискриминации двух произвольных конкурирующих моделей для плотностей отклика. Пусть у нас имеется ν конкурирующих плотностей $\{f_i(y,x,\theta_i)\}_{i=1}^{\nu}$. По аналогии с байесовской версией критерия T_P-оптимальности в этой главе вводится байесовская версия критерия KL_P-оптимальности:

$$\mathrm{KL}_P^{\mathrm{B}}(\xi) = \sum_{i,j=1}^{\nu} p_{i,j} \int_{\Theta_i} \inf_{\theta_{i,j}\in\Theta_j} \int_{\mathcal{X}} I_{i,j}(x,\theta_i,\theta_{i,j})\xi(dx)\mathcal{P}_i(d\theta_i), \qquad (6)$$

где $I_{i,j}(x,\theta_i,\theta_{i,j}) = \int f_j(y,x,\theta_{i,j}) \log\left[f_j(y,x,\theta_{i,j})/f_i(y,x,\theta_i)\right] dy$ — это расстояние Кульбака–Лейблера между плотностями f_j и f_i. Для критерия (6) сформулирована теорема эквивалентности и адаптированы алгоритмы 1 и 2. В качестве примеров численно построены байесовские KL_P-оптимальные планы для конкурирующих лог-нормальных плотностей. Изложение в данной главе опирается на материал из работы [13], алгоритмы реализованы в пакете [10].

Пятая глава посвящена нахождению так называемых полу-параметрических KL-оптимальных планов. Рассматривается случай дискриминации двух конкурирующих плотностей. В работах по планированию дискриминационных экспериментов, как правило, исследуется ситуация, когда конкурирующие модели, определяемые парой из функции регрессии и закона распределения для случайных ошибок, известны с точностью до параметров. В работе [7] был предложен полу-параметрический критерий оптимальности для планирования дискриминационных экспериментов, обобщающий критерий KL-оптимальности из [6], суть которого заключается в том, что функции регрессии для всех конкурирующих моделей и закон распределения ошибок для одной из них считаются известными, а закон распределения для оставшейся модели получается как решение специальной оптимизационной задачи с ограничениями. В главе рассматривается два критерия из [7]:

$$K_{(a)}(\xi,\overline{\theta}_1) = \inf_{\theta_2\in\Theta_2} \int_X \inf_{f_2\in\mathcal{F}_{2,x,\theta_2}} I_{1,2}(x, f_1,f_2, \overline{\theta}_1, \theta_2)\, \xi(dx), \tag{7}$$

$$K_{(b)}(\xi,\overline{\theta}_1) = \inf_{\theta_2\in\Theta_2} \int_X \inf_{f_1\in\mathcal{F}_{1,x,\overline{\theta}_1}} I_{1,2}(x, f_1,f_2, \overline{\theta}_1, \theta_2)\, \xi(dx), \tag{8}$$

где $I_{1,2}(x, f_1,f_2, \overline{\theta}_1, \theta_2) = \int f_1(y, x, \theta_1) \log\left[f_1(y,x,\theta_1)/f_2(y,x,\theta_2)\right] dy$ и

$$\mathcal{F}_{2,x,\theta_2} = \Big\{ f_2 : \int f_2(y,x,\theta_2)dy = 1, \int y f_2(y,x,\theta_2)dy = \eta_2, \mathcal{S}_{f_2,\theta_2,x} = \mathcal{S}_{f_1,\overline{\theta}_1,x} \Big\},$$

$$\mathcal{F}_{1,x,\overline{\theta}_1} = \Big\{ f_1 : \int f_1(y,x,\overline{\theta}_1)dy = 1, \int y f_1(y,x,\overline{\theta}_1)dy = \eta_1, \mathcal{S}_{f_1,\overline{\theta}_1,x} = \mathcal{S}_{f_2,\theta_2,x} \Big\},$$

а $\mathcal{S}_{f_j,\theta_j,x} = \big\{ y \mid f_j(y,x,\theta_j) > 0 \big\}$, $j = 1, 2$. Здесь $\eta_1 = \eta_1(x,\overline{\theta}_1)$ и $\eta_2 = \eta_2(x,\theta_2)$ обозначают заданные функции для средних соответствующих плотностей. Будем предполагать, что обе плотности непрерывны по x и дифференцируемы по параметрам. Планы, максимизирующие (7) и (8), называются полу-параметрическими $KL_{(a)}$- и $KL_{(b)}$-оптимальными соответственно. В работе [7] задачи нахождения $\inf_{f_2\in\mathcal{F}_{2,x,\theta_2}}$ и $\inf_{f_1\in\mathcal{F}_{1,x,\overline{\theta}_1}}$ были сведены к решению систем из двух нелинейных уравнений со сложной областью определения для функций из систем. В данной главе доказана теорема, которая сводит эти оптимизационные задачи к решению одного нелинейного уравнения на отрезке, что позволяет существенно упростить численное нахождение оптимальных полу-параметрических планов. Для обоих критериев сформулированы теоремы эквивалентности. Также доказаны две теоремы, связывающие полу-параметрические критерии с T-критерием. Обозначим среднее и дисперсию плотности $f_i(y,x,\theta_i)$ как $\eta_i(x,\theta_i)$ и $v_i^2(x,\theta_i)$.

Теорема 5. *Пусть $f_1(y,x,\overline{\theta}_1) = g(y - \eta_1(x,\overline{\theta}_1))$ в критерии (7), где функция g — симметричная плотность, заданная на конечном интервале $[-a,a]$. Тогда T-оптимальный план также является полу-параметрическим $KL_{(a)}$-оптимальным планом.*

Теорема 6. *Пусть $f_2(y,x,\theta_2)$ — это плотность нормального распределения со средним $\eta_2(x,\theta_2)$ и дисперсией $v_2^2(x,\theta_2)$ в критерии (8). Тогда наилучшая аппроксимация $f_1^*(y,x,\overline{\theta}_1)$, полученная как $\inf_{f_1 \in \mathcal{F}_{1,x,\overline{\theta}_1}}$, будет плотностью нормального распределения со средним $\eta_1(x,\overline{\theta}_1)$ и дисперсией $v_2^2(x,\theta_2)$ и оптимальный план, доставляющий максимум выражению*

$$\inf_{\theta_2 \in \Theta_2} \int_{\mathcal{X}} \frac{[\eta_1(x,\overline{\theta}_1) - \eta_2(x,\theta_2)]^2}{v_2^2(x,\theta_2)} \xi(dx),$$

также будет полу-параметрическим $KL_{(b)}$-оптимальным планом. Последнее утверждение верно также и в обратную сторону.

В оставшейся части главы построены численные примеры для таких конкурирующих моделей плотностей, для которых полу-параметрические оптимальные планы не совпадают с T-оптимальными.

В заключении перечислены основные результаты диссертации.

Цитированная литература

1. *Stigler S.* Optimal experimental design for polynomial regression // J. Am. Stat. Assoc. — 1971. — Vol. 66. — P. 311–318.

2. *Atkinson A. C.*, *Fedorov V. V.* The designs of experiments for discriminating between two rival models // Biometrika. — 1975. — Vol. 62. — P. 57–70.

3. *Dette H.*, *Titoff S.* Optimal discrimination designs // Ann. Stat. — 2009. — Vol. 37, no. 4. — P. 2056–2082.

4. *Dette H.*, *Melas V.*, *Shpilev P.* T-optimal designs for discrimination between two polynomial models // Ann. Stat. — 2012. — Vol. 40, no. 1. — P. 188–205.

5. *Ucinski D.*, *Bogacka B.* T-Optimum Designs for Multiresponse Dynamic Heteroscedastic Models // Proceedings of the 7th International Workshop on Model-Oriented Design and Analysis (Heeze, The Netherlands) / ed. by A. Di Bucchianico, H. Läuter, H. P. Wynn. — Springer, 06/2004. — P. 191–199.

6. *López-Fidalgo J.*, *Tommasi C.*, *Trandafir P. C.* An optimal experimental design criterion for discriminating between non-normal models // J. Royal Stat. Soc., Series B. — 2007. — Vol. 69. — P. 231–242.

7. *Otsu T.* Optimal experimental design criterion for discriminating semi-parametric models // J. Stat. Plan. Inference. — 2008. — Vol. 138. — P. 4141–4150.

8. *Atkinson A. C.*, *Fedorov V. V.* Optimal design: Experiments for discriminating between several models // Biometrika. — 1975. — Vol. 62. — P. 289–303.

9. *Braess D.*, *Dette H.* Optimal discriminating designs for several competing regression models // Ann. Stat. — 2013. — Vol. 41, no. 2. — P. 897–922.

10. *Guchenko R.* rodd: Optimal Discriminating Designs. — 2016. — `http://CRAN.R-project.org/package=rodd`. R package version 0.2-1.

Публикации по теме диссертации

11. *Гученко Р. А.*, *Мелас В. Б.* T-оптимальные планы для дискриминации дробно-рациональных и полиномиальных моделей // Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. — 2017. — Т. 4(62), № 2. — С. 208–219.

12. *Dette H.*, *Melas V. B.*, *Guchenko R.* Bayesian T-optimal discriminating designs // Annals of Statistics. — 2015. — Vol. 43, no. 5. — P. 1959–1985.

13. *Dette H.*, *Guchenko R.*, *Melas V. B.* Efficient computation of Bayesian optimal discriminating designs // Journal of Computational and Graphical Statistics. — 2017. — Vol. 26, no. 2. — P. 424–433.