

В. С. ТРУСОВ

**ТЕОРИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТА**

В. С. ТРУСОВ

**ТЕОРИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТА**

Учебное пособие

**ИЗДАТЕЛЬСТВО ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
Томск—1983**

УДК 519.2(075.8)

Трусов В. С. Теория эксперимента. — Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1983. — 8,2 л. — 1 р. 20 к. 1500 экз. 1502000000.

Настоящая книга представляет собой учебное пособие по курсу «Теория эксперимента» в том виде и в том объеме, в котором он читается студентам факультета прикладной математики и кибернетики Томского государственного университета. Может использоваться в качестве учебного пособия по теории эксперимента также студентами физических и технических факультетов.

Рецензент — канд. физ.-мат. наук А. М. Кориков.

Редактор — канд. физ.-мат. наук Л. Е. Радюк.

Т $\frac{1502000000}{177(012)-82}$ 46—83

© Издательство Томского университета, 1983 г.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящее учебное пособие представляет собой конспект лекций по курсу «Теория эксперимента» для студентов факультета прикладной математики и кибернетики университета.

Этот курс читается студентам четвертого года обучения. К этому времени они изучили теорию вероятностей, математическую статистику, теорию случайных процессов. Теория эксперимента существенно опирается на эти курсы. Кроме того, в пособии значительно используется векторная и матричная алгебра. Однако с основными идеями теории может познакомиться и менее подготовленный читатель.

Так как автор не претендует на что-либо большее, чем учебное пособие, то он счел возможным не делать ссылок на источники, откуда взяты те или иные результаты. Тем не менее в конце книги помещен список основной литературы, которую автор использовал при подготовке курса.

ВВЕДЕНИЕ

I. Предмет математической теории эксперимента

Прежде чем заняться изучением теории планирования эксперимента, поставим задачи планирования эксперимента. Для этого необходимо уточнить смысл некоторых применяемых терминов.

В настоящее время нет единого определения эксперимента. Существующие обладают теми или иными недостатками. Определение, даваемое ниже, не претендует на общность; однако его нам вполне достаточно для развития теории, тем более что оно будет формализовано и уточнено после введения соответствующей терминологии.

Под *экспериментом* будем понимать совокупность действий, к которым приходится обращаться, чтобы задавать природе интересующие нас вопросы. Эту совокупность можно разложить на отдельные элементы, каждый из которых будем называть *опытом*.

Эксперименты проводятся над какими-то объектами, представляющими интерес для экспериментатора. Объект исследования может представлять собой реально существующий процесс или явление. В этом случае эксперименты проводятся в реальном масштабе времени и пространства. Эксперименты могут быть и модельными, когда в качестве объекта исследования выбрана та или иная модель (изменен масштаб, изменена природа объекта; например: математическое моделирование с помощью ЦВМ).

До появления работ по планированию эксперимента

всех исследователей в теоретическом плане занимала проблема эффективного использования результатов эксперимента. Например, в классической математической статистике получали наилучшие оценки параметров, наиболее мощные тесты проверки статистических гипотез и т. д. Однако можно поставить вопрос и о том, насколько эффективно поставлен сам эксперимент, насколько хорошо он спланирован. При этом необходимо учитывать, что планирование эксперимента и обработка экспериментальных данных — это две взаимосвязанные процедуры.

Планирование эксперимента заключается в выборе числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью.

Задачу планирования эксперимента решает *математическая теория эксперимента*.

Все решения и действия экспериментатора условно можно разбить на два типа: 1) основанные на подробном и скрупулезном изучении конкретного явления и 2) основанные на более общих свойствах, характерных целому множеству явлений и объектов.

Эти два типа действий экспериментатора объясняются наличием в нашем понимании эксперимента двух частей: эвристической и формализуемой. Если речь идет об эвристической части, то здесь успех определяется уровнем подготовки экспериментатора в конкретной области знаний, определяется дутьем экспериментатора.

Математическая теория эксперимента занимается изучением лишь формализуемой части эксперимента, и успех здесь целиком определяется разработанностью теории и уровнем подготовки экспериментатора в рамках этой теории. Следует отметить при этом, что формализуемая часть эксперимента довольно значительна и имеет тенденцию к расширению.

II. Модель

Как и любая другая теория, математическая теория эксперимента имеет дело не с реальным объектом, а с его моделью — математической моделью объекта исследования. Проблема выбора модели является очень важной для любой науки, так как самое точное решение задачи,

связанное с неправильно выбранной моделью, не раскрывает истинного положения вещей в реальной ситуации.

В то же время теория планирования эксперимента не решает задачу построения модели изучаемого явления. Решением этой проблемы занимаются специальные дисциплины с использованием глубоких знаний об объекте исследования. В рамках теории эксперимента возможны лишь те или иные приближения к решению этой задачи.

Прежде чем описывать модель объекта, рассмотрим более внимательно те условия, причины, называемые также факторами, которые влияют на результаты эксперимента. По характеру воздействия все факторы можно разбить на два подмножества: *регулируемые* и *нерегулируемые* факторы.

Регулируемые факторы — это конкретно существующие условия проведения эксперимента, контролируемые экспериментатором. В качестве регулируемых факторов могут выступать температура, давление, концентрация вещества, номер технологии в технологическом процессе и т. д. В каждом конкретном случае количество этих факторов и их числовые значения четко определены.

Сложнее обстоит дело с нерегулируемыми факторами. Это — неконтролируемые условия проведения опытов и описать их все невозможно, да в этом и нет необходимости. Нам достаточно выделить два типа таких факторов. Во-первых, имеются случайные нерегулируемые факторы, благодаря которым результаты эксперимента приобретают случайный характер. Во-вторых, могут существовать нерегулируемые, но связанные статистической зависимостью с регулируемыми факторы, приводящие к неслучайным, непредсказуемым смещениям наблюдений. Эти систематические ошибки можно устранить с помощью рандомизации неконтролируемых условий проведения опытов, о чем будет рассказано позже.

Таким образом, явное задание условий проведения эксперимента возможно лишь с помощью регулируемых факторов, которые будем в дальнейшем называть просто факторами или независимыми переменными. Подводя итог обсуждению, можно выдвинуть следующую модель изучаемого явления.

В качестве *объекта исследования* будем понимать «черный ящик» с $p+1$ входами и одним выходом (хотя имеется возможность обобщения, когда имеется несколь-

ко выходов). Входы x_1, x_2, \dots, x_p есть факторы или *независимые переменные*. С их помощью имеется возможность воздействовать на «черный ящик». Выход y назовем *параметром оптимизации*. На рис. 0.1 имеется выделенный вход n , которым условно обозначены все нерегулируемые условия проведения опытов. Благодаря этому входу величина y является случайным процессом, зависящим от переменных x_1, x_2, \dots, x_p .

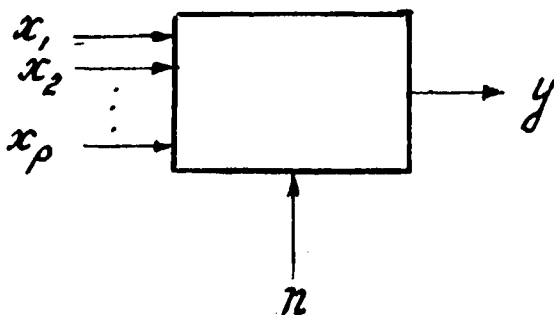


Рис. 0.1

Пространство с координатами x_1, x_2, \dots, x_p будем называть *факторным пространством* или *пространством независимых переменных*. Символом x обозначим точку в p -мерном факторном пространстве, или, что то же самое, p -мерный вектор-столбец:

$$x^T = [x_1, x_2, \dots, x_p],$$

где t — операция транспортирования.

Очевидно, что существуют принципиальные физические, экономические, технические и т. д. ограничения на интервалы варьирования факторов. Поэтому обозначим через Ω_x ту часть факторного пространства, которая удовлетворяет этим ограничениям, и имеет смысл рассматривать только такие точки x , которые принадлежат Ω_x .

Под *математической моделью* будем понимать уравнение, связывающее условное математическое ожидание выхода «черного ящика» с независимыми переменными

$$E(y|x) = \eta(x) = \eta(x_1, \dots, x_p), \quad (0.1)$$

где $E(y|x)$ — усреднение случайной величины y при условии, что вектор независимых переменных задан;

$\eta(\dots)$ — функция отклика, поверхность отклика, кривая регрессии, заданная на множестве Ω_x .

С учетом новой терминологии задачу планирования эксперимента можно сформулировать как выбор оптимального расположения точек в факторном пространстве, обеспечивающих получение наилучших в определенном смысле результатов исследования.

Это выбранное множество точек факторного пространства, в которых планируется ставить опыты, определяет план эксперимента. Если теперь под $x_i \in \Omega_x, i = \overline{1, N}$

$$x_i^T = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip}]$$

понимать условия проведения i -го опыта, то план из N опытов может быть представлен в виде следующей матрицы:

$$X = \begin{bmatrix} x_{11}x_{12}\dots x_{1p} \\ x_{21}x_{22}\dots x_{2p} \\ \dots\dots\dots \\ x_{N1}x_{N2}\dots x_{Np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_N^T \end{bmatrix}, \quad (0.2)$$

которая называется *матрицей планирования*. Некоторые из опытов могут проводиться в одинаковых условиях, т. е. некоторые из строк матрицы X совпадают друг с другом. Допуская, что число различных точек в факторном пространстве, вошедших в матрицу X , равно n , план эксперимента $E(N)$ можно представить в виде

$$E(N) = \left\{ \begin{array}{l} x_1, x_2, x_3, \dots, x_n \\ r_1, r_2, r_3, \dots, r_n \\ \sum_{i=1}^n r_i = N \end{array} \right\}, \quad (0.3)$$

где r_i — число опытов, которые необходимо провести в точке $x_i \in \Omega_x$.

III. Основные идеи и структура курса

Теория эксперимента насыщена математикой. Но принципиальная возможность постановки хорошего эксперимента заключена не в применении математики, а в потенциальных возможностях, заложенных в наших пред-

ставлениях об эксперименте. Применение математики помогает вскрыть эти возможности и поставить их на службу экспериментатора.

В теории эксперимента в основном используются две идеи. Одна из них состоит в *оптимальном использовании факторного пространства*, т. е. все разумные критерии оптимальности эксперимента зависят от плана $E(N)$, который, как видно из (0.3), определяется количеством и расположением выбранных для экспериментирования точек в факторном пространстве.

Вторая идея возникла из-за возможного присутствия неконтролируемых, но связанных статистической зависимостью с управляемыми факторами переменных. Как указывалось ранее, в этом случае могут оказаться непредсказуемые, неслучайные смещения поверхности отклика $\eta(x)$. Появление этих систематических ошибок является одним из самых неприятных эффектов. Идея борьбы с этим явлением состоит в создании таких условий проведения эксперимента, чтобы систематические ошибки превратить в случайные изменения величины y . При этом случайная компонента наблюдений y возрастает, но теперь появляется возможность применения аппарата теории вероятностей и математической статистики. Эта идея называется *рандомизацией* неконтролируемых условий проведения эксперимента.

Все сказанное выше можно сформулировать теперь в виде правила, согласно которому эксперимент необходимо рандомизировать по неконтролируемым условиям, но в то же время оптимально использовать контролируемые условия проведения опытов.

Задачи, решаемые теорией эксперимента, можно уложить в одну общую схему: на основании тех или иных соображений выдвигается математическая модель объекта исследования (их может быть несколько), затем на основании разумного критерия оптимальности находятся оптимальная стратегия эксперимента и оптимальный метод обработки наблюдений. Здесь возможны широкие вариации решений, связанные с многообразием моделей и критериев оптимальности.

В теории эксперимента можно условно выделить несколько основных направлений. В нашем курсе будут затронуты лишь некоторые. Одно из этих направлений — планирование эксперимента по *выяснению механизма явления*, или планирование *регрессионных экспериментов*.

Оно применяется тогда, когда необходимо найти оптимальный эксперимент для получения математической модели исследуемого объекта в заданной области факторного пространства. Задача получения математической модели здесь понимается в узком смысле, когда функция отклика (0.1) имеет лишь конечное число неизвестных параметров, которые необходимо оценить.

Другое направление — планирование *экстремальных экспериментов*, когда необходимо разработать такую стратегию эксперимента, которая позволила бы достаточно быстро прийти в область факторного пространства, где изучаемый процесс протекает оптимальным образом.

Следует отметить, что в этих затронутых направлениях, а также в некоторых других задачах, решаемых теорией, существенно используется метрика факторного пространства. Однако существуют задачи, при постановке и решении которых сознательно отказываются использовать эту метрику, или она не имеет смысла. Это задачи с дискретными факторами. Для решения задач с такими ограничениями в теории эксперимента существует раздел, который называется *дисперсионным анализом*. Он также включен в наш курс.

ЛИНЕЙНЫЙ РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

§ 1. МНК-оценки при равноточных некоррелированных наблюдениях

I. Обсудим теперь вопрос о методе обработки экспериментальных данных, потому что, как указывалось во введении, качество планирования и качество обработки в конечном счете связаны друг с другом. Мы должны выбрать достаточно хороший метод оценивания параметров модели изучаемого явления. Сначала получим алгоритм оценивания—метод наименьших квадратов при некоторых ограничениях на модель, затем часть из этих ограничений ослабим и в результате алгоритм будет иметь достаточную универсальность. В дальнейшем оценки параметров методом наименьших квадратов будем называть МНК-оценками.

II. Конкретизируем наши представления о модели (0.1). Предположим, что функция $\eta(x)$ известна с точностью до m неизвестных параметров $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$ в виде линейной формы

$$\eta(x, \theta) = \sum_{j=1}^m f_j(x) \theta_j, \quad (1.1)$$

где $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$ —набор известных функций; x —точка факторного пространства, представляющая собой p -мерный вектор-столбец, причем $x \in \Omega_x$, где p —размерность факторного пространства; Ω_x —множество возможных значений вектора x .

Введем вектор-столбец $f(x)$ функций $f_j(x)$, $j=\overline{1, m}$

$$f^T(x) = [f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)]$$

и вектор-столбец θ параметров θ_j , $j=\overline{1, m}$

$$\theta^T = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m].$$

Тогда в векторной форме (1.1) примет вид

$$\eta(x, \theta) = f^T(x)\theta = \theta^T f(x).$$

Пусть, согласно матрице планирования X (0.2), в точках x_1, x_2, \dots, x_n факторного пространства произведены независимые измерения y_1, y_2, \dots, y_n . Вектор-столбец этих величин обозначим через y . Обозначим через F следующую матрицу:

$$F = [F_{ij}] = [f_j(x_i)], \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, m}, \quad (1.2)$$

имеющую n строк и m столбцов. Тогда в матричном виде можно записать

$$E(y/x) = \eta(x, \theta) = F\theta. \quad (1.3)$$

Так как в нашем курсе вектор x всегда неслучаен, то путаницы не произойдет, если в дальнейшем мы будем писать $E(y)$ вместо $E(y/x)$.

Пусть матрица ковариаций наблюдений или, что то же самое, дисперсионная матрица случайного вектора y существует и имеет вид

$$D(y) = E(y - F\theta)(y - F\theta)^T = \sigma^2 I_n, \quad (1.4)$$

где I_n — единичная матрица порядка n .

Выражение (1.4) имеет место, когда все наблюдения некоррелированы и дисперсия наблюдений одинакова и равна σ^2 для всех $x \in \Omega_x$.

III. Будем искать оценки параметров $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$, минимизируя сумму квадратов разностей между наблюдениями и их математическими ожиданиями:

$$Q(\theta) = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^m F_{ij} \theta_j \right)^2 = (y - F\theta)^T (y - F\theta). \quad (1.5)$$

Докажем, что минимум $Q(\theta)$ достигается при θ , удовлетворяющем уравнению:

$$\cdot (F^T F)\theta = F^T y, \quad (1.6)$$

которое называется нормальным уравнением. Пусть $\hat{\theta}$ — любое решение (1.6). Тогда

$$\begin{aligned} (y - F\theta)^T (y - F\theta) &= [y - F\hat{\theta} + F(\hat{\theta} - \theta)]^T [y - F\hat{\theta} + \\ &+ F(\hat{\theta} - \theta)] = (y - F\hat{\theta})^T (y - F\hat{\theta}) + (\hat{\theta} - \theta)^T F^T F (\hat{\theta} - \theta) \geq \end{aligned}$$

$$\geq (y - F\hat{\theta})^T (y - F\hat{\theta}). \quad (1.7)$$

В (1.7) использовалось нормальное уравнение (1.6), а также очевидное неравенство

$$\begin{aligned} (\hat{\theta} - \theta)^T F^T F (\hat{\theta} - \theta) &= [F(\hat{\theta} - \theta)]^T [F(\hat{\theta} - \theta)] = \\ &= \|F(\hat{\theta} - \theta)\|^2 \geq 0, \end{aligned}$$

где символом $\|\alpha\|$ обозначена длина или норма вектора α .

Минимум в (1.5) достигается при $\hat{\theta}$ и одинаков для всех решений $\hat{\theta}$ уравнения (1.6).

В дальнейшем нам понадобится следующее утверждение.

Лемма 1. Векторные пространства, порожденные столбцами матриц F и FF^T , совпадают. Ранги матриц F FF^T равны.

Доказательство. Пусть α — вектор-столбец, такой, что $\alpha^T F = 0$, где справа — вектор нулей. Тогда $\alpha^T FF^T = 0$.

Обратно: из равенства $\alpha^T FF^T = 0$ следует $\alpha^T FF^T \alpha = (\alpha^T F)(\alpha^T F)^T = 0$, откуда $\alpha^T F = 0$.

Следовательно, вектор, ортогональный к столбцам матрицы F , ортогонален к столбцам матрицы FF^T . Отсюда непосредственно следует первое утверждение леммы. Второе утверждение при этом выполняется автоматически. ■

Пусть r — ранг матриц F и FF^T . Если $r = m$, то решение уравнения (1.6) единственно и имеет вид

$$\hat{\theta} = (F^T F)^{-1} F^T y. \quad (1.8)$$

Обозначим через $D(\hat{\theta})$ матрицу ковариаций оценок (1.8) и вычислим ее. С учетом (1.3), (1.8) можно записать

$$\begin{aligned} \hat{\theta} - \theta &= (F^T F)^{-1} F^T y - (F^T F)^{-1} F^T F \theta = \\ &= (F^T F)^{-1} F^T (y - E(y)), \end{aligned}$$

После чего несложно получить выражение для дисперсионной матрицы

$$\begin{aligned} D(\hat{\theta}) &= E(\hat{\theta} - \theta)(\hat{\theta} - \theta)^T = (F^T F)^{-1} F^T E[(y - E(y))(y - E(y))^T] \\ &F(F^T F)^{-1} = (F^T F)^{-1} F^T D(y) F (F^T F)^{-1}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Подставляя в (1.9) выражение (1.4), окончательно получим

$$D(\hat{\theta}) = \sigma^2 (F^T F)^{-1}. \quad (1.10)$$

Если же ранг матрицы FF^T меньше размерности этой матрицы $r < m$, то матрица $F^T F$ вырождена и нормальное уравнение (1.6) имеет множество решений. Однако и в этом случае можно записать решение в явном виде, используя аппарат обобщенных обратных матриц. Общий вид вектора оценок (1.8) и матрицы ковариаций (1.10) останется прежним, лишь матрица $(F^T F)^{-1}$ заменится на обобщенную обратную матрицу.

IV. Нормальное уравнение можно получить и из геометрической интерпретации. Пусть $y \in R_n$, где R_n — n -мерное линейное пространство. Обозначим через L_r линейное подпространство ($L_r \subset R_n$), образованное вектор-столбцами F_i матрицы F , имеющей ранг r . Очевидно, что n -мерный вектор

$$F\theta = \sum_{i=1}^m F_i \theta_i$$

принадлежит пространству L_r , т. к. является линейной комбинацией столбцов матрицы F .

Рассмотрим теперь вектор $y - F\theta$. Векторы y , $F\theta$, $y - F\theta$ для удобства рассмотрения изображены на рис. 1.1. Из (1.5) нетрудно записать

$$Q(\theta) = (y - F\theta)^T (y - F\theta) = \|y - F\theta\|^2.$$

Из алгебры векторов известно, да это видно и из рис. 1.1, что квадрат нормы вектора $y - F\theta$ минимален, если он ортогонален пространству L_r , при этом $F\hat{\theta}$ есть проекция вектора y на L_r . Обозначим эту проекцию через $F\hat{\theta} : Pr_{L_r}$, $y = F\hat{\theta}$.

Проекция вектора y на L_r единственна, значит $F\hat{\theta}$ всегда существует. Таким образом, показали, что

$$(y - F\hat{\theta}) \perp L_r.$$

В силу ортогональности векторов $y - F\hat{\theta}$, $F\hat{\theta}$ заключаем, что $y - F\hat{\theta} \in L_{n-r}$, где L_{n-r} есть ортогональное дополнение L_r в R_n , т. е.

$$L_{n-r} \perp L_r, L_{n-r} \oplus L_r = R_n,$$

где \oplus — ортогональная сумма пространств. Очевидно также, что вектор $y - F\hat{\theta}$ есть проекция вектора y на L_{n-r} , т. е. $P_{L_{n-r}} y = y - F\hat{\theta}$.

Поскольку $(y - F\hat{\theta}) \perp L_r$, а $F_i \in L_r$, то

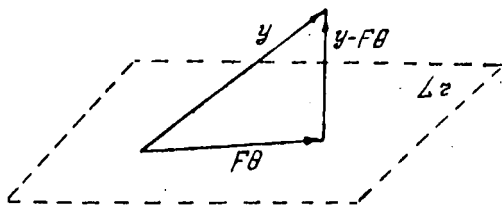


Рис. 1.1

$$F_i^T (y - F\hat{\theta}) = 0, \quad i = \overline{1, m}. \quad (1.11)$$

Запишем (1.11) в матричном виде

$$F^T (y - F\hat{\theta}) = 0$$

откуда

$$F^T y = F^T F \hat{\theta}.$$

Получили снова нормальное уравнение. Подчеркнем еще раз, что при $r < m$ имеем множество решений нормального уравнения, однако при этом $F\hat{\theta}$ — всегда единственно.

§ 2. Свойства МНК-оценок

1. Введем полезное обобщение параметров линейной модели, оцениваемых с помощью метода наименьших квадратов. Рассмотрим величину

$$\psi = \sum_{i=1}^m C_i \theta_i, \quad (1.12)$$

которая является линейной функцией неизвестных параметров с известными коэффициентами C_1, C_2, \dots, C_m .

Пусть C — вектор-столбец, $C^T = [C_1, \dots, C_m]$. Тогда в векторной форме (1.12) имеет вид

$$\psi = C^T \theta. \quad (1.13)$$

Будем искать оценку величины ψ в классе линейных функций. Вообще говоря, не при любых значениях вектора C существует линейная несмещенная оценка. Поэтому выделим класс функций (1.13), с которыми мы будем работать.

Определение 1. Параметрическая функция ψ называется *функцией, допускающей оценку*, или *оцениваемой*, если существует линейная несмещенная оценка, т. е. если существует неслучайный вектор $a^T = [a_1, \dots, a_n]$ такой, что равенство

$$E(\hat{\psi}) = E(a^T y) = \psi \quad (1.14)$$

выполняется тождественно при любых значениях θ .

Теорема 1. Параметрическая функция $\psi = C^T \theta$ оцениваема тогда и только тогда, когда $C \in L_r$, где L_r — пространство, образованное столбцами матрицы F , или в эквивалентной форме, когда $C^T \theta$ — одна и та же для всех решений нормального уравнения.

Доказательство. Пусть $\psi = C^T \theta$ — оцениваема. Покажем, что $C \in L_r$. Из (1.3), (1.14) имеем

$$\psi = E(a^T y) = a^T F \theta = C^T \theta$$

или $a^T F = C^T$. В результате получили, что $C = F^T a$, т. е. вектор C есть линейная комбинация столбцов матрицы F , т. е. $C \in L_r$.

Пусть теперь $C \in L_r$, т. е. вектор C есть линейная комбинация столбцов матрицы FF^T , т. е. $C = F^T F \lambda$, где λ — некоторый вектор. Тогда для любого решения $\hat{\theta}$, удовлетворяющего нормальному уравнению, получим

$$C^T \hat{\theta} = \lambda^T F^T F \hat{\theta} = \lambda^T F^T y.$$

Следовательно, оценка $C^T \hat{\theta}$ — одна и та же для всех $\hat{\theta}$, линейна по y и $E(\lambda^T F^T y) = \lambda^T F^T F \theta = C^T \theta$.

Пусть теперь $C^T \hat{\theta}$ одинакова для всех θ . Возьмем произвольный вектор $\lambda = L_{n-r} \perp L_r$, т. е.

$$F^T F \lambda = 0. \quad (1.15)$$

Вычтем из нормального уравнения (1.6) уравнение (1.15).
Получим

$$F^T F(\hat{\theta} - \lambda) = F^T y,$$

т. е. вектор $\bar{\theta} = \hat{\theta} - \lambda$ также служит решением нормального уравнения. Следовательно, учитывая наше первоначальное допущение, запишем

$$0 = C^T \hat{\theta} - C^T \bar{\theta} = C^T (\hat{\theta} - \bar{\theta}) = C^T \lambda. \quad (1.16)$$

Из (1.16) видно, что векторы C и λ ортогональны. Так как вектор λ произволен, то $C \in L_r$. ■

Теорема 2. Если функция $\psi = C^T \hat{\theta}$ оцениваема, то $C^T \hat{\theta}$ имеет минимальную дисперсию в классе линейных несмещенных оценок $\tilde{\psi}$.

Доказательство. Пусть $C^T \hat{\theta}$ оцениваема, тогда $C \in L_r$, т. е. $C = F^T F \lambda$ при некотором λ . Отсюда с учетом (1.6)

$$\hat{\psi} = C^T \hat{\theta} = \lambda^T F^T F \hat{\theta} = \lambda^T F^T y.$$

Если $\tilde{\psi} = b^T y$ любая несмещенная оценка ψ , то $E(\tilde{\psi}) = b^T E(y) = b^T F \hat{\theta} = C^T \hat{\theta}$, откуда $C^T = b^T F = \lambda^T F^T F$.

Покажем, что $D(\tilde{\psi}) \geq D(\hat{\psi})$, где $D(\tilde{\psi})$ — дисперсия оценки $\tilde{\psi}$; $D(\hat{\psi})$ — дисперсия оценки $\hat{\psi}$. Можем записать

$$\begin{aligned} D(\tilde{\psi}) &= D(b^T y) = D((b^T y - \lambda^T F^T y) + \lambda^T F^T y) = \\ &= D(b^T y - \lambda^T F^T y) + D(\lambda^T F^T y) = D(b^T y - \lambda^T F^T y) + D(\hat{\psi}). \end{aligned} \quad (1.17)$$

В (1.17) учли равенство нулю ковариации векторов $(b^T - \lambda^T F^T) y$ и $\lambda^T F^T y$, так как

$$\begin{aligned} E[(b^T - \lambda^T F^T) y - E((b^T - \lambda^T F^T) y)][\lambda^T F^T y - E(\lambda^T F^T y)]^T &= \\ &= (b^T - \lambda^T F^T) E(y y^T) F \lambda = \sigma^2 (b^T - \lambda^T F^T) F \lambda = \\ &= \sigma^2 (b^T F - \lambda^T F^T F) \lambda = \sigma^2 (C^T - C^T) \lambda = 0. \end{aligned}$$

Так как дисперсия неотрицательна, то из (1.17) окончательно получаем

$$D(\hat{\psi}) \leq D(\tilde{\psi}). \blacksquare$$

Изучим теперь подробнее случай, когда нормальное уравнение имеет единственное решение.

Теорема 3. Все линейные параметрические функции оцениваемы тогда и только тогда, когда $r=m$.

Доказательство. Если $r=m$, то нормальное уравнение имеет единственное решение. В этом случае

для всякого C оценка $\hat{\psi} = C^T \hat{\theta}$ единственна.

Пусть теперь $\psi = C^T \theta$ — оцениваема, причем $C \in L_m$. Докажем, что $r=m$. По определению оцениваемой параметрической функции имеем

$$E(\hat{\psi}) = E(a^T y) = a^T F^T \theta,$$

откуда $C^T = a^T F^T$. Это значит, что вектор C является линейной комбинацией столбцов F_i матрицы F , т. е. если $F_i \in L_r$, то и $C \in L_r$. Чтобы это удовлетворить, необходимо положить $r=m$. \blacksquare

Из теоремы следует, что при $r < m$ некоторые параметрические функции не могут быть несмещенно оценены. Такие функции будем называть неопределяемыми или скрытыми.

Следствие. Наилучшей линейной оценкой поверхности отклика $\eta(x, \theta) = f^T(x) \cdot \theta$ в произвольной точке x является

$$\hat{\eta} = f^T(x) \hat{\theta} \quad (1.18)$$

с дисперсией

$$D(\hat{\eta}) = d(x) = f^T(x) D(\hat{\theta}) f(x). \quad (1.19)$$

Величину $\sqrt{d(x)}$ называют коридором ошибок.

Доказательство. Равенство (1.18) получается сразу, если в теореме 3 положить $C = f(x)$. (1.19) получим из следующей цепочки равенств, учтя, что $\hat{\eta}$ — скалярная несмещенная оценка

$$D(\hat{\eta}) = E((\hat{\eta} - \eta)(\hat{\eta} - \eta)^T) = E[f^T(x)(\hat{\theta} - \theta)(\hat{\theta} - \theta)^T f(x)] =$$

$$=f^T(x)E[(\hat{\Theta}-\Theta)(\hat{\Theta}-\Theta)^T]f(x)=f^T(x)D(\hat{\Theta})f(x). \blacksquare$$

II. Рассмотрим задачу оценивания s параметрических функций, допускающих оценку:

$$\psi_i = C_i^T \Theta, \quad i = \overline{1, s},$$

где $C_i = i$ -й вектор-столбец.

Пусть $\psi_i = C_i^T \hat{\Theta}$, $i = \overline{1, s}$ их индивидуальные МНК-оценки.

Составим вектор $\psi^T = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_s]$ и матрицу $C = [C_1, \dots, C_s]$. Тогда в матричном виде можно записать

$$\psi = C^T \Theta, \quad \hat{\psi} = C^T \hat{\Theta}.$$

Ранее было показано что векторы $C_i \in L_r$, где r — ранг матрицы FF^T . Следовательно, для любого s вектор ψ , являющийся линейной комбинацией векторов C_i , также принадлежит пространству L_r . Пусть далее A — матрица ковариаций $\hat{\psi}$. Обозначим через $\text{Sp} A$ — сумму диагональных элементов матрицы и $|A|$ — детерминант матрицы. Тогда имеет место следующее оптимальное свойство оценок наименьших квадратов.

Теорема 4. Пусть $\tilde{\psi}_i = g_i^T y$ — любые несмещенные оценки функций ψ_i , $i = \overline{1, s}$ и B — матрица ковариаций этих оценок. Тогда $(B - A)$ — неотрицательно определенная матрица, в частности $\text{Sp} B \geq \text{Sp} A$, $|B| \geq |A|$, $B_{ii} \geq A_{ii}$.

Доказательство. Введем произвольный вектор $b^T = [b_1, \dots, b_s]$. Рассмотрим линейную параметрическую функцию $\eta = b^T \psi$. Ее можно оценить двумя способами:

$$\hat{\eta} = b^T \hat{\psi}; \quad \tilde{\eta} = b^T \tilde{\psi}. \quad (1.20)$$

Поскольку η — функция, допускающая оценку, то по теореме 2

$$D(\hat{\eta}) \leq D(\tilde{\eta}). \quad (1.21)$$

Из (1.20) нетрудно получить

$$D(\hat{\eta}) = b^T A b; \quad D(\tilde{\eta}) = b^T B b. \quad (1.22)$$

Тогда из (1.21), (1.22) будем иметь

$$b^T A b \leq b^T B b$$

или

$$b^T (B - A) b \geq 0.$$

Поскольку b — произвольный вектор, заключаем, что $(B - A)$ — неотрицательно определенная матрица, откуда непосредственно следует, что $\text{Sp } B \geq \text{Sp } A$, $|B| \geq |A|$, $B_{ii} \geq A_{ii}$. ■

Следствие 1. МНК-оценки параметров θ имеют наименьшую дисперсию в классе линейных несмещенных оценок. Положим в предыдущей теореме $r = s = m$, $C = I_m$, где I_m — единичная матрица порядка m . Тогда

$$\psi = \theta, \hat{\psi} = \hat{\theta}, \tilde{\psi} = \tilde{\theta}$$

и матрицы ковариаций A и B есть матрицы ковариаций оценок $\hat{\theta}$ и $\tilde{\theta}$, которые обозначим $D(\hat{\theta})$ и $D(\tilde{\theta})$ соответственно:

$$A = D(\hat{\theta}); \quad B = D(\tilde{\theta}_i).$$

Тогда из теоремы следует, что $D(\tilde{\theta}) - D(\hat{\theta})$ — неотрицательно определенная матрица. В частности, для дисперсий оценок параметра θ_i имеем

$$D(\hat{\theta}_i) \leq D(\tilde{\theta}_i). \quad (1.23)$$

Следствие 2. Наилучшие линейные оценки, являясь наилучшими в пространстве параметров θ , одновременно являются наилучшими, т. е. минимизируют $d(x)$ и $Q(\theta)$ и в пространстве результат измерения — контролируемые переменные.

Доказательство. Следствие 2 непосредственно вытекает из следствия 1 настоящей теоремы и следствия теоремы 3.

III. Выясним свойства вектора $y = F\hat{\theta}$ и его взаимоотношения с $\hat{\psi} = C^T \hat{\theta}$, где ψ — оцениваемая функция. Предварительно докажем два вспомогательных утверждения.

Лемма 2. Ортогональное преобразование сохраняет некоррелируемость случайных величин, имеющих одинаковую дисперсию.

Доказательство. Пусть имеем случайный вектор $y \in R_n$, $\text{cov}(y) = \sigma^2 I_n$. Другой случайный вектор z связан с вектором y следующим линейным соотношением:

$$z = Ay, \quad (1.24)$$

где A — матрица ортогонального преобразования. Тогда с учетом (1.24) будем иметь

$$\text{cov}(z) = E(z - E(z))(z - E(z))^T = AE(y - E(y))(y - E(y))^T A^T = \sigma^2 AA^T = \sigma^2 I_n. \blacksquare \quad (1.25)$$

Лемма 3. Проекция случайного вектора с некоррелированными компонентами с одинаковыми дисперсиями на ортогональные линейные подпространства некоррелированы.

Доказательство. Пусть случайный вектор $y \in R_n$, $D(y) = \sigma^2 I_n$, $L_r \subset R_n$, $L_s \subset R_n$, $L_r \perp L_s$. Докажем, что векторы $\text{Pr}_{L_r} y$ и $\text{Pr}_{L_s} y$ некоррелированы. Обозначим через (e_1, \dots, e_r) ортонормированный базис в L_r , через $(e_{r+1}, \dots, e_{r+s})$ — ортонормированный базис в L_s и через (e_{r+s+1}, \dots, e_n) — ортонормированный базис в L_{n-r-s} . Можем записать

$$y = \sum_{i=1}^n (y^T e_i) e_i; \quad \text{Pr}_{L_r} y = \sum_{i=1}^r (y^T e_i) e_i, \quad \text{Pr}_{L_s} y = \sum_{i=r+1}^{r+s} (y^T e_i) e_i.$$

Перейдем от случайного вектора y к вектору z с помощью ортогональной матрицы A , i -я строка которой есть вектор e_i из ортонормированного базиса. Тогда для i -й составляющей вектора z имеем

$$z_i = \sum_j A_{ij} y_j = y^T e_i.$$

Из построения видно, что первые r компонент вектора z являются проекцией вектора y на L_r , следующие s компонент — проекцией вектора y на L_s и последние $n - r - s$ компонент — проекцией вектора y на L_{n-r-s} . Согласно лемме 2 эти три проекции вектора y некоррелированы между собой, причем $Dz_i = \sigma^2$. \blacksquare

Теорема 5. 1. Среднее значение вектора $y - \hat{F}\hat{\theta}$ равно нулю.

2. Вектор $y - \hat{F}\hat{\theta}$ и $C^T \hat{\theta}$ — некоррелированы.

3. Матрица ковариаций вектора $y - F\hat{\theta}$ представляется в виде разности

$$D(y - F\hat{\theta}) = D(y) - D(F\hat{\theta}). \quad (1.26)$$

$$4. E(Q(\hat{\theta})) = (n-r)\sigma^2 \quad \text{и} \quad s^2 = \frac{1}{n-r} Q(\hat{\theta}) \quad (1.27)$$

есть несмещенная оценка σ^2 .

Доказательство. При доказательстве п. 1 учтем, что столбцы матрицы F принадлежат пространству L_r , следовательно, согласно теореме 1 функция $F\hat{\theta}$ — оцениваема, т. е. (1.14):

$$E(F\hat{\theta}) = F\theta.$$

После этого запишем

$$E(y - F\hat{\theta}) = E(y) - E(F\hat{\theta}) = F\theta - F\theta = 0. \quad (1.28)$$

При доказательстве п. 2 воспользуемся утверждением теоремы 1 о том, что $C \in L_r$. Следовательно, всегда найдется некоторый вектор λ , что $C = F'\lambda$, откуда $C\hat{\theta} = \lambda'F\hat{\theta} \in L_r$. Далее учтем, что векторы $y - F\hat{\theta}$, $F\hat{\theta}$ — ортогональны, т. к. они принадлежат взаимноортогональным подпространствам L_{n-r} и L_r соответственно. Следовательно, ортогональны и $y - F\hat{\theta}$, $\lambda'F\hat{\theta}$. Теперь из леммы 3 непосредственно следует некоррелируемость векторов $y - F\hat{\theta}$ и $C\hat{\theta}$, т. е.

$$\text{cov}(y - F\hat{\theta}, C\hat{\theta}) = 0. \quad (1.29)$$

Утверждение п. 2 выполняется и в более общем случае, когда C — матрица. Доказательство аналогичное. При доказательстве п. 3 учтем (1.29) для $C' = F$

$$\text{cov}(y - F\hat{\theta}, F\hat{\theta}) = 0.$$

Тогда будем иметь

$$\begin{aligned} D(y) &= D((y - F\hat{\theta}) + F\hat{\theta}) = D(y - F\hat{\theta}) + D(F\hat{\theta}) + \\ &+ 2 \text{cov}(y - F\hat{\theta}, F\hat{\theta}) = D(y - F\hat{\theta}) + D(F\hat{\theta}), \end{aligned}$$

т. е. получим (1.26).

Чтобы доказать п.4, воспользуемся следующим представлением, которое получено из геометрической интерпретации

$$y - F\hat{\theta} = \text{Pr}_{L_{n-r}} y; \quad F\hat{\theta} = \text{Pr}_{L_r} y; \quad L_r \perp L_{n-r}.$$

Все условия леммы 3 выполнены, поэтому можем записать

$$Q(\hat{\theta}) = \|y - F\hat{\theta}\|^2 = \sum_{i=r+1}^n z_i^2, \quad (1.30)$$

откуда, учитывая некоррелируемость z_i , получим окончательно (1.27). Из (1.27) можно получить несмещенную оценку параметра σ^2

$$s^2 = \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-r} Q(\hat{\theta}). \quad \blacksquare \quad (1.31)$$

§ 3. Законы распределения МНК-оценок и их функций

Пусть y — n -мерный случайный вектор, распределенный по нормальному закону со средним $F\theta$ и матрицей ковариаций $\sigma^2 I_n$. Предположение нормальности вектора y делает некоторые из утверждений теорем более сильными.

1. Для гауссовских случайных величин МНК-оценки совпадают с оценками максимального правдоподобия. Это сразу можно обнаружить, если записать многомерную плотность распределения y

$$p(y) = \left(\frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \right)^n \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (y - F\theta)^T (y - F\theta) \right\},$$

которую, согласно процедуре максимального правдоподобия, необходимо максимизировать по неизвестным параметрам θ . Поэтому к тем свойствам МНК-оценок, которые были перечислены выше, добавляются соответствующие свойства оценок максимального правдоподобия.

2. Несложно показать, что оценки неизвестных параметров являются соответствующими функциями достаточных статистик. Тогда несмещенные оценки

максимального правдоподобия обладают минимальной дисперсией и теорема 2 приобретает более сильное звучание: если функция $\psi = C^T \hat{\theta}$ оцениваема, то $C^T \hat{\theta}$ имеет минимальную дисперсию в классе несмещенных оценок $\hat{\theta}$.

Взяв $C = I_m$, получим аналогичное утверждение для оценок самих параметров θ . Из теории оценивания известно, что нижней границей дисперсионной матрицы является матрица, обратная информационной, и они совпадают при эффективном оценивании. Свойство эффективности оценок $\hat{\theta}$ нами показано. Следовательно, на основании (1.10) запишем

$$D(\hat{\theta}) = \sigma^2 M^{-1}, \quad M = F^T F, \quad (1.32)$$

где M — информационная матрица.

3. Заметим далее, что $y - F\hat{\theta}$, $C^T \hat{\theta}$ являются линейными функциями гауссовских случайных величин. Это значит, что и сами эти величины распределены по нормальному закону с соответствующими средними и матрицами ковариации.

Учтем теперь, что для гауссовских случайных величин понятия некоррелируемости и независимости эквивалентны.

4. Тогда утверждение 2 теоремы 5 звучит также сильнее:

Векторы $y - F\hat{\theta}$ и $C^T \hat{\theta}$ независимы.

Получим теперь законы распределения некоторых полезных функций $y - F\hat{\theta}$ и $C^T \hat{\theta}$.

5. Из (1.30) видно, что $\frac{1}{\sigma^2} Q(\hat{\theta})$ является суммой квадратов случайных величин, распределенных по нормальному закону с единичной дисперсией. Поэтому случайная величина $\frac{1}{\sigma^2} Q(\hat{\theta})$ имеет распределение χ^2 с $(n-r)$ степенями свободы.

6. Далее, если $\psi = C^T \hat{\theta}$ — скалярная оцениваемая функция, то

$$= \frac{(\hat{\psi} - \psi) \frac{1}{\sqrt{D(\hat{\psi})}}}{\sqrt{\frac{1}{\sigma^2(n-r)} Q(\hat{\theta})}} = \frac{(\hat{\psi} - \psi) \frac{1}{\sqrt{D(\hat{\psi})}}}{\sqrt{\frac{S^2}{\sigma^2}}} \quad (1.33)$$

имеет распределение Стьюдента с $(n-r)$ степенями свободы, т. к. является отношением случайной величины, распределенной по нормальному закону с нулевым средним и единичной дисперсией к случайной величине, квадрат которой имеет χ^2 -распределение с $(n-r)$ степенями свободы. Докажем вспомогательное утверждение

Лемма 4. Если k -мерный вектор z распределен по нормальному закону с нулевым средним и матрицей ковариаций $\sigma^2 D_z$, то $z^T D_z^{-1} z$ имеет χ^2 -распределение с k степенями свободы.

Доказательство. Всегда найдется ортогональное преобразование A , переводящее вектор z в вектор y с матрицей ковариации $\sigma^2 I_k$, т. е. $z = Ay$:

$$\sigma^2 D_z = E(zz^T) = AE(yy^T)A^T = \sigma^2 AA^T,$$

откуда $D_z = AA^T$. Далее можем записать

$$\frac{1}{\sigma^2} z^T D_z^{-1} z = \frac{1}{\sigma^2} (A^{-1}z)^T A^{-1}z = \frac{1}{\sigma^2} y^T y = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^k y_i^2,$$

откуда следует утверждение леммы. ■

7. Рассмотрим теперь случай, когда ψ -вектор в k -мерном пространстве, т. е. $\psi = C^T \theta$, где C -соответствующая матрица ранга k . Тогда имеем

$$\hat{\psi} = C^T \hat{\theta}; \quad E(\hat{\psi}) = \psi; \quad D(\hat{\psi}) = \sigma^2 D_\psi.$$

Применяя лемму 4, получаем, что величина $(\hat{\psi} - \psi)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi} - \psi)$ имеет χ^2 -распределение с k степенями свободы.

8. Применяя утверждение 4 настоящего параграфа, получаем, что случайная величина

$$F = \frac{(\hat{\psi} - \psi)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi} - \psi) \frac{1}{k}}{\frac{1}{\sigma^2(n-r)} Q(\hat{\theta})} \quad (1.34)$$

имеет распределение Фишера-Снедекора с k , $n-r$ степенями свободы, т. к. (1.34) есть отношение двух независимых случайных величин, имеющих χ^2 -распределение.

§ 4. Некоторые обобщения МНК-оценок

I. Рассмотрим МНК-оценки при коррелированных наблюдениях. Пусть

$$E(y) = F\theta; \quad D(y) = \sigma^2 G, \quad (1.35)$$

где G — известная неособенная матрица; σ^2 — неизвестный множитель. Необходимо получить МНК-оценки параметров θ .

Чтобы воспользоваться теорией МНК-оценок при некоррелированных равноточных наблюдениях, перейдем от величин y к величинам z той же размерности, имеющих матрицу ковариаций $D(z) = \sigma^2 I_N$, т. е.

$$y = Az. \quad (1.36)$$

Этот прием мы уже использовали при доказательстве леммы 4, где показано, что матрица A должна удовлетворять уравнению

$$G = AA^T. \quad (1.37)$$

Из (1.37) следует, что A — неособенная, т. к. G — неособенная матрица. Из (1.36) будем иметь

$$z = A^{-1}y. \quad (1.38)$$

Если обозначить

$$A^{-1}F = F_z, \quad (1.39)$$

то среднее значение вектора z связано с вектором θ соотношением

$$E(z) = A^{-1}E(y) = A^{-1}F\theta = F_z\theta. \quad (1.40)$$

Следовательно, нашу задачу привели к виду, рассмотренному ранее, разве лишь вместо y и F везде необходимо писать z и F_z соответственно. В частности, будем иметь (1.5):

$$Q(\theta) = (z - F_z\theta)^T (z - F_z\theta) \quad (1.41)$$

и нормальное уравнение (1.6)

$$F_z^T F_z \theta = F_z^T z. \quad (1.42)$$

Возвращаясь от величин z , F_z к величинам y , F по формулам (1.36), (1.39) с учетом (1.37), получим следующие выражения:

$$M = F_z^T F_z = F^T A^T A^{-1} F = F^T G^{-1} F; \quad (1.43)$$

$$F_z^T z = F^T A^T A^{-1} y = F^T G^{-1} y. \quad (1.44)$$

(1.41), (1.42) примут вид

$$Q(\theta) = (y - F\theta)^T G^{-1} (y - F\theta); \quad (1.45)$$

$$F^T G^{-1} F \theta = F^T G^{-1} y. \quad (1.46)$$

Если ранг матрицы F равен максимально возможному, то из (1.46)

$$\hat{\theta} = M^{-1} Y, \quad Y = F^T G^{-1} y, \quad D(\hat{\theta}) = \sigma^2 M^{-1}. \quad (1.47)$$

Все свойства МНК-оценок, полученные в предыдущих параграфах, целиком переносятся на рассматриваемый случай.

II. В дальнейшем нас будет интересовать случай, когда G -диагональная матрица с элементами

$$\sigma^2 G_{ij} = \delta_{ij} \sigma_i^2, \quad (1.48)$$

где δ_{ij} —символ Кронекера

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j; \\ 1 & i = j \end{cases}$$

σ_i^2 —дисперсия наблюдения y_i в точке $x_i \in \Omega_x$. Введем обозначения

$$\frac{\sigma^2}{\sigma_i^2} = \lambda_i = \lambda(x_i). \quad (1.49)$$

Тогда элементы матрицы G^{-1} будут иметь вид

$$G_{ij}^{-1} = \frac{\sigma^2}{\sigma_i^2} \delta_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}. \quad (1.50)$$

Учитывая (1.2), (1.50) из (1.43), (1.47), получим

$$M_{ij} = \sum_{kl} F_{kl} G_{kl}^{-1} F_{ij} = \sum_k \lambda_k F_{kl} F_{kj} = \sum_k \lambda_k f_i(x_k) f_j(x_k);$$

$$Y_i = \sum_{kl} F_{kl} G_{kl}^{-1} y_l = \sum_l \lambda_k f_l(x_k) y_k$$

или в матричном виде

$$M = \sum_{k=1}^N M(x_k); \quad M(x_k) = \lambda_k f(x_k) f^T(x_k); \quad (1.51)$$

$$Y = \sum_{k=1}^N \lambda_k f(x_k) y_k. \quad (1.52)$$

Аналогично можно получить

$$Q(\theta) = \sum_{k=1}^N \lambda_k (y_k - f^T(x_k) \theta)^2. \quad (1.53)$$

III. Рассмотрим теперь МНК-оценки при повторных экспериментах. Пусть в точке x_i факторного пространства проведено r_i наблюдений $y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ir_i}$. Покажем, что для оценивания параметров достаточно накопить величины

$$y_i = \frac{1}{r_i} \sum_{k=1}^{r_i} y_{ik}. \quad (1.54)$$

Действительно, обозначая через N число всех наблюдений в n опытах: $N = \sum_{i=1}^n r_i$, будем иметь из (1.51) (1.52) с учетом (1.54)

$$\begin{aligned} Y &= \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{r_i} \lambda_i f(x_i) y_{ik} = \sum_{i=1}^n r_i \lambda_i \left(\frac{1}{r_i} \sum_{k=1}^{r_i} y_{ik} \right) f(x_i) = \\ &= \sum_{i=1}^n r_i \lambda_i y_i f(x_i); \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$M = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{r_i} \lambda_i f(x_i) f^T(x_i) = \sum_{i=1}^n r_i \lambda_i f(x_i) f^T(x_i). \quad (1.56)$$

Формулы (1.55), (1.56) позволяют разгрузить память вычислительной машины, вводя в нее лишь нужную информацию.

§ 5. МНК-оценки при ограничениях на параметры

I. Найдем МНК-оценки, удовлетворяющие следующей системе линейных уравнений:

$$H^T \Theta = \xi_0, \quad (1.57)$$

где вектор ξ_0 и матрица H заданы, причем ранг матрицы H есть $r - q$. Общее решение уравнения (1.57) можно записать в виде

$$\Theta = \beta_0 + B \cdot \beta, \quad (1.58)$$

где β_0 — частное решение (1.57); $B \cdot \beta$ — общее решение однородного уравнения $H^T \Theta = 0$; $B - m \times q$ — матрица ранга q ; β — произвольный вектор; $\beta \in L_q$.

Поскольку β — произвольный вектор, то, подставляя (1.58) в (1.57), убеждаемся, что $H^T B = 0$. Подставим полученное решение в (1.3). Будем иметь

$$E(y) = F \Theta = F(\beta_0 + B \beta),$$

откуда

$$E(y - F \beta_0) = F B \beta. \quad (1.59)$$

Пусть $y - F \beta_0 = z$. Тогда $E(z) = F B \beta$, причем $Dz = \sigma^2 I_n$, т. е. снова имеем метод наименьших квадратов линейной модели с независимыми равноточными наблюдениями с той лишь разницей, что везде в предыдущих формулах необходимо заменить величины $y, F, \Theta, \hat{\Theta}, r$ на $z, F B, \beta, \hat{\beta}, q$ соответственно. Вместо (1.5) будем иметь

$$Q_q(\beta) = (z - F B \beta)^T (z - F B \beta). \quad (1.60)$$

Минимум (1.60) достигается при β , удовлетворяющем нормальному уравнению:

$$(B^T F^T F B) \beta = B^T F^T z. \quad (1.61)$$

Отметим при этом, что подпространство L_q образовано столбцами матрицы $F B$, являющимися линейными комбинациями столбцов матрицы F , образующих L_r . Следовательно $L_q \subset L_r$.

II. Рассмотрим геометрическую интерпретацию этой задачи. Для простоты обозначим

$$\eta = F \Theta; \quad \eta_q = F(\beta_0 + B \beta).$$

Поскольку матрицы F, B имеют ранги r, q соответственно, причем $r > q$, то ранг матрицы $F \cdot B$, равный минимальному из рангов матриц, входящих в произведение, равен q . Отсюда следует, что $\eta \in L_r, \eta_q \in L_q$, причем

$L_q \subset L_r \subset R_n$. Рассуждая далее точно так же, как и при рассмотрении геометрической интерпретации в § 1, получим совокупность векторов, изображенную на рис. 1.2. Как видно из рисунка, имеем пространство R_n и совокупность подпространств $L_r, L_{n-r}, L_q, L_{n-q}, L_{r-q}$, причем $L_r \perp L_{n-r}, L_q \perp L_{n-q}, L_q \perp L_{r-q}, L_q \oplus L_{r-q} = L_r$,

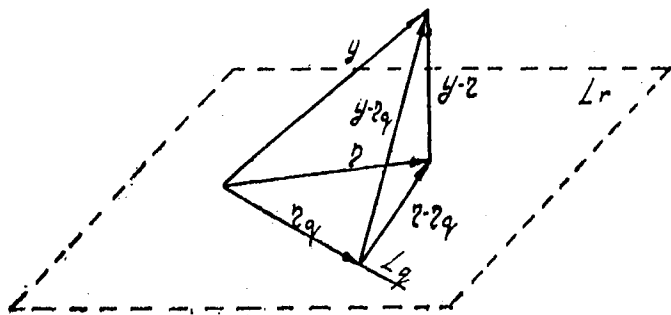


Рис. 1.2

$L_q \oplus L_{n-q} = R_n, L_r \oplus L_{n-r} = R_n$. Вектор y из R_n можно разложить на два вектора, принадлежащие двум ортогональным подпространствам:

$$y = (y - \hat{\eta}) + \hat{\eta},$$

где $\hat{\eta} = \text{Pr}_{L_r} y, y - \hat{\eta} = \text{Pr}_{L_{n-r}} y$.

Аналогично $y = (y - \hat{\eta}_q) + \hat{\eta}_q$, где $\hat{\eta}_q = \text{Pr}_{L_q} y, y - \hat{\eta}_q = \text{Pr}_{L_{n-q}} y$.

В свою очередь, вектор $\hat{\eta}$ из L_r также можно разложить на два вектора

$$\hat{\eta} = (\hat{\eta} - \hat{\eta}_q) + \hat{\eta}_q,$$

где $\hat{\eta} - \hat{\eta}_q = \text{Pr}_{L_{r-q}} \hat{\eta}; \hat{\eta}_q = \text{Pr}_{L_q} \hat{\eta}$.

Из этих рассуждений особо подчеркнем важный для будущего факт, что векторы $y - \hat{\eta}, \hat{\eta} - \hat{\eta}_q, \hat{\eta}_q$ являются проекциями вектора y на взаимно ортогональные подпространства L_{n-r}, L_{r-q}, L_q . Отметим также, что

$$\begin{aligned} \|y\|^2 &= \|y - \hat{\eta}\|^2 + \|\hat{\eta} - \hat{\eta}_q\|^2 + \|\hat{\eta}_q\|^2; \\ \|y - \hat{\eta}_q\|^2 &= \|y\|^2 - \|\hat{\eta}_q\|^2. \end{aligned} \quad (1.62)$$

III. **Теорема 6.** 1. При условии (1.57) среднее значение векторов $y - \hat{\eta}$, $y - \hat{\eta}_q$, $\hat{\eta} - \hat{\eta}_q$ равно нулю.

2. Векторы $y - \hat{\eta}$, $\hat{\eta}_q$, $\hat{\eta} - \hat{\eta}_q$ некоррелированы.

3. Матрица ковариаций вектора y имеет вид

$$D(y) = D(y - \hat{\eta}) + D(\hat{\eta} - \hat{\eta}_q) + D(\hat{\eta}_q), \quad (1.63)$$

$$4. \|\hat{\eta} - \hat{\eta}_q\|^2 = Q_q(\hat{\beta}) - Q(\hat{\theta}). \quad (1.64)$$

$$5. \|\hat{\eta} - \hat{\eta}_q\| = \frac{1}{\sigma^2} (\hat{\xi} - \xi_0)^T D_{\hat{\xi}}^{-1} (\hat{\xi} - \xi_0), \quad (1.65)$$

где $\sigma^2 \cdot D_{\hat{\xi}}$ — матрица ковариаций вектора $\hat{\xi} = H^T \hat{\theta}$.

$$6. E(Q(\hat{\theta})) = (n - r) \sigma^2, \quad E(Q_q(\hat{\beta})) = (n - q) \sigma^2. \quad (1.66)$$

Доказательство. При доказательстве п. 1. учтем, что $\eta = F\theta$, $\eta_q = F(\beta_0 + B \cdot \beta)$ — оцениваемые функции, т. е. по (1.14) $E(\hat{\eta}) = \eta$, $E(\hat{\eta}_q) = \eta_q$, причем $\eta = \eta_q$, т. к. (1.58) выполняется. Отсюда несложно получить $E(y - \hat{\eta}) = 0$, $E(y - \hat{\eta}_q) = 0$, $E(\hat{\eta} - \hat{\eta}_q) = 0$.

При доказательстве п. 2 воспользуемся тем, что $y - \hat{\eta}$, $\hat{\eta} - \hat{\eta}_q$, $\hat{\eta}_q$ являются проекциями вектора y на ортогональные подпространства L_{n-r} , L_{r-q} , L_q соответственно. Применяя лемму 3, доказываем некоррелируемость этих векторов.

Утверждение п. 3 следует непосредственно из п. 2.

При доказательстве п. 4 необходимо воспользоваться (1.62) и тем, что $\|y - \hat{\eta}\|^2 = Q(\hat{\theta})$, $\|y - \hat{\eta}_q\|^2 = Q_q(\hat{\beta})$.

При доказательстве п. 5 учтем, что решение задачи поиска минимума функции $(y - F\theta)^T (y - F\theta) = Q(\theta)$ по параметрам θ при ограничении $H^T \theta = \xi_0$ можно получить, используя неопределенные множители Лагранжа:

$$\frac{\partial Q(\theta)}{\partial \theta} + \lambda \frac{\partial H^T \theta}{\partial \theta} = 0. \quad (1.67)$$

Беря в (1.67) производные по θ_i , в матричном виде запишем систему уравнений относительно векторов θ и λ

$$F^T F \theta + H \lambda = F^T y. \quad (1.68)$$

Обозначим через θ^* , λ^* решение уравнения (1.68). Пусть $\xi = H^T \theta$. МНК-оценка вектора ξ возможна лишь тогда, когда столбцы матрицы H принадлежат пространству L_r (теорема 1). Следовательно, всегда найдется матрица C , что

$$H = F^T F C. \quad (1.69)$$

Тогда, вычитая из (1.68) нормальное уравнение (1.6)

$$F^T F \theta = F^T y, \quad (1.70)$$

которому удовлетворяет $\hat{\theta}$, получим

$$F^T F (\hat{\theta} - \theta^*) = H \lambda^* = F^T F C \lambda^*. \quad (1.71)$$

Учитывая, что $\hat{\theta} - \theta^* \in L_r$, из (1.71) следует

$$\hat{\theta} - \theta^* = C \lambda^*. \quad (1.72)$$

Найдем матрицу ковариации оценки $\hat{\xi} = H^T \hat{\theta} = C^T F^T F \hat{\theta}$.

С учетом (1.70) запишем $\hat{\xi} = C^T F^T y$.

Тогда

$$\begin{aligned} D_{\hat{\xi}} &= E[C^T F^T (y - F \theta)(y - F \theta)^T F C] = \\ &= \sigma^2 D_{\xi} = \sigma^2 C^T F^T F C. \end{aligned} \quad (1.73)$$

Далее запишем с учетом наших обозначений и (1.72)

$$\begin{aligned} \|\hat{\eta} - \hat{\eta}_q\|^2 &= \|F \hat{\theta} - F \theta^*\|^2 = (\hat{\theta} - \theta^*)^T F^T F (\hat{\theta} - \theta^*) = \\ &= \lambda^{*T} C^T F^T F C \lambda^* = \frac{1}{\sigma^2} \lambda^{*T} D_{\xi} \lambda^*. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Для нахождения λ^* вычтем из (1.68) уравнение $H^T \theta^* = \xi_0$, предварительно умножив (1.68) на C^T . Получим

$$(C^T F^T F - H^T) \theta^* + C^T H \lambda^* = C^T F^T y - \xi_0.$$

Откуда с учетом (1.69)

$$C^T H \lambda^* = \hat{\xi} - \xi_0, \quad (1.75)$$

Подставляя вместо H выражение (1.69), из (1.75) будем иметь

$$\hat{\xi} - \xi_0 = C^T F^T F C \lambda^* = \frac{1}{\sigma^2} D_{\xi} \lambda^*,$$

откуда

$$\lambda^* = D\xi^{-1}(\hat{\xi} - \xi_0). \quad (1.76)$$

Подставляя (1.76) в (1.74), получим окончательно доказываемое утверждение (1.65).

Утверждение п. 6 доказывается точно так же, как и п. 4 теоремы 5, т. е., воспользовавшись леммой 3, можно записать

$$Q(\hat{\Theta}) = \sum_{i=r+1}^n z_i^2, \quad Q_q(\hat{\beta}) = \sum_{i=q+1}^n z_i^2, \quad (1.77)$$

где z_i — некоррелированы с дисперсией σ^2 . Усредняя (1.77), получим утверждение 6. ■

IV. Пусть теперь y нормально распределен со средним $F\Theta$ и матрицей ковариаций $\sigma^2 I_n$. Тогда к утверждениям теоремы 6 добавится ряд новых.

Векторы $y - \hat{\eta}$, $y - \hat{\eta}_q$, $\hat{\eta} - \hat{\eta}_q$ нормально распределены, т. к. это линейные функции y .

2. Векторы $y - \hat{\eta}$, $\hat{\eta} - \hat{\eta}_q$, $\hat{\eta}_q$ — независимы, т. к. они некоррелированы и нормально распределены.

3. Величины $\frac{1}{\sigma^2} \|\hat{\eta} - \hat{\eta}_q\|^2$, $\frac{1}{\sigma^2} Q(\hat{\Theta})$, $\frac{1}{\sigma^2} Q_q(\hat{\beta})$ имеют χ^2 -распределение с $r - q$, $n - r$, $n - q$ степенями свободы соответственно. Доказать это можно, если учесть (1.77), а также на основании 4 теоремы 6:

$$\|\hat{\eta} - \hat{\eta}_q\|^2 = \sigma^2 \sum_{i=q+1}^r z_i^2, \quad (1.78)$$

т. е. имеем три величины, каждая из которых является суммой независимых гауссовских величин с единичной дисперсией и нулевым средним значением. Число степеней свободы определяется числом слагаемых в (1.77), (1.78). Если (1.58) не выполняется, то все равно

$\frac{1}{\sigma^2} \|\hat{\eta} - \hat{\eta}_q\|^2$, $\frac{1}{\sigma^2} Q(\hat{\Theta})$, $\frac{1}{\sigma^2} Q_q(\hat{\beta})$ имеют нецентральное χ^2 -распределение с теми же степенями свободы.

4. Величина

$$F = \frac{\frac{1}{\sigma^2} (Q_q(\hat{\beta}) - Q(\hat{\Theta}))(n - r)}{Q(\hat{\Theta})(r - q)} \quad (1.79)$$

имеет распределение Фишера-Снедекора с $r-q$, $n-r$ степенями свободы. Заметим, что в (1.79) имеем отношение двух независимых случайных величин, имеющих распределение χ^2 с $(r-q)$ и $(n-r)$ степенями свободы.

§ 6. Проверка гипотез и интервальное оценивание

1. Если закон распределения вектора u известен, то кроме точечных оценок, рассмотренных ранее, можно найти и интервальные оценки и решать задачи проверки статистических гипотез. Как и ранее, считаем, что u — n -мерный случайный вектор, распределенный по нормальному закону со средним $F\theta$ и матрицей ковариаций $\sigma^2 I_n$.

Пусть ψ —вектор в k -мерном пространстве—линейная параметрическая функция, т. е. $\psi=C^T\theta$, где C —соответствующая матрица ранга k ; $\hat{\psi}$ —МНК-оценка; $\sigma^2 \cdot D_\psi$ —матрица ковариаций оценки $\hat{\psi}$. Гипотеза H_0 состоит в равенстве вектора ψ некоторому заданному ψ_0 . Если гипотеза H_0 неверна, то скорее всего отклонения $\hat{\psi}-\psi_0$ от нуля велики. Рассмотрим величину модифицированного отклонения

$$(\hat{\psi}-\psi_0)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi}-\psi_0).$$

Учитывая форму записи квадратичной формы через соответствующий след матрицы:

$$a^T B a = \text{Sp} a^T B,$$

имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} E(\hat{\psi}-\psi_0)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi}-\psi_0) &= \frac{1}{k} \text{Sp} E[(\hat{\psi}-\psi_0)(\hat{\psi}-\psi_0)^T] D_\psi^{-1} = \\ &= \frac{1}{k} \text{Sp} E[(\hat{\psi}-\psi) + (\psi-\psi_0)][(\hat{\psi}-\psi) + \\ &+ (\psi-\psi_0)]^T D_\psi^{-1} = \frac{1}{k} \text{Sp} E(\hat{\psi}-\psi)(\hat{\psi}-\psi)^T D_\psi^{-1} + \\ &+ \frac{1}{k} \text{Sp}(\psi-\psi_0)(\psi-\psi_0)^T D_\psi^{-1} = \end{aligned}$$

$$= \frac{\sigma^2}{k} \text{Sp} D_\psi D_\psi^{-1} + \frac{1}{k} (\psi - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\psi - \psi_0) = \sigma^2 + \\ + \frac{1}{k} (\psi - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\psi - \psi_0). \quad (1.80)$$

В (1.80) через ψ обозначено истинное значение параметрической функции. Соотношение (1.80) равно σ^2 , только когда $\psi = \psi_0$, т. е. при гипотезе H_0 .

Так как матрица D_ψ неотрицательно определена, то $(\psi - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\psi - \psi_0) > 0$ и (1.80) превосходит σ^2 тогда и только тогда, когда гипотеза H_0 неверна. С другой стороны, $E\left(\frac{1}{n-r} Q(\Theta)\right) = \sigma^2$ безотносительно к истинному значению неизвестных параметров Θ . Поэтому у отношения

$$F = \frac{(\hat{\psi} - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi} - \psi_0) / k}{Q(\Theta) / (n-r)} = \frac{(\hat{\psi} - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi} - \psi_0)}{k S^2} \quad (1.81)$$

числитель в среднем превосходит знаменатель, когда гипотеза H_0 неверна и величина превышения зависит от $\frac{1}{k} (\psi - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\psi - \psi_0)$. Таким образом, большие значения статистики F указывают на нарушение гипотезы H_0 . Если выбрать $F_{\alpha, k, n-r}$ из условия

$$P(F > F_{\alpha, k, n-r}) = \alpha,$$

то критерием

$$F = \frac{(\hat{\psi} - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi} - \psi_0)}{k S^2} > F_{\alpha, k, n-r} \quad (1.82)$$

можно пользоваться для проверки гипотезы H_0 с уровнем значимости α .

Для вычисления F можно воспользоваться другой процедурой с использованием утверждений 4, 5 теоремы 6. Учитывая, что

$$(\hat{\psi} - \psi_0)^T D_\psi^{-1} (\hat{\psi} - \psi_0) = Q_q(\hat{\beta}) - Q(\hat{\Theta}), \quad (1.83)$$

(1.81) запишем в виде

$$\frac{[Q_a(\hat{\beta}) - Q(\hat{\theta})](n-r)}{kQ(\hat{\theta})}. \quad (1.84)$$

Соотношение (1.84) важно потому, что дает явное выражение числителя статистики F из (1.81), используемое в дисперсионном анализе.

II. Получим теперь совместные доверительные интервалы для величин ψ .

Лемма 5. Для любых двух векторов-столбцов x , y и положительно определенной матрицы $A = B^T B$

$$y^T A^{-1} y = \max_x \frac{(x^T y)^2}{x^T A x}. \quad (1.85)$$

Равенство достигается при линейной зависимости между векторами.

Доказательство. При доказательстве используем неравенство Коши-Буняковского для двух вещественных векторов

$$(v^T u)^2 \leq (v^T v)(u^T u), \quad (1.86)$$

где равенство достигается при линейной зависимости между векторами u и v . Обозначая $u = B^{-1} y$, $v = Bx$, получим из (1.86)

$$(x^T y) \leq (y^T A^{-1} y)(x^T A x),$$

откуда

$$\frac{(x^T y)^2}{x^T A x} \leq (y^T A y). \quad (1.87)$$

Учитывая, что при линейной зависимости между векторами u и x в (1.87) остается лишь знак равенства, получим при максимизации левой и правой части (1.87) по x формулу (1.85). ■

Теорема 7.

$$P\{|u^T(\hat{\psi} - \psi)| \leq s\sqrt{kF_{\alpha, k, n-r} u^T D_{\psi} u}\} = 1 - \alpha \quad (1.88)$$

для всех векторов $u \in L_k$.

Доказательство. Положим в (1.85) $y = \hat{\psi} - \psi$, $A = D_{\psi}$, тогда

$$\frac{(\hat{\psi} - \psi)^T D_{\psi}^{-1} (\hat{\psi} - \psi)}{ks^2} = \frac{1}{ks^2} \max_u \frac{[u^T (\hat{\psi} - \psi)]^2}{u^T D_{\psi} u}. \quad (1.89)$$

Из (1.82) следует, что

$$P \left\{ \frac{(\hat{\Psi} - \Psi)^T D_{\Psi}^{-1} (\hat{\Psi} - \Psi)}{k s^2} \leq F_{\alpha, k, n-r} \right\} = 1 - \alpha.$$

Откуда с учетом (1.89) получим

$$F \left\{ \max_u \frac{[u^T (\hat{\Psi} - \Psi)]^2}{u^T D_{\Psi} u} \leq s^2 k F_{\alpha, k, n-r} \right\} = 1 - \alpha. \quad (1.90)$$

Из (1.90) сразу получаем доказываемое утверждение. ■

Из (1.88) следует, что для отдельно взятой функции $u^T \Psi$

$$P \left\{ |u^T (\hat{\Psi} - \Psi)| \leq s \sqrt{k F_{\alpha, k, n-r} u^T D_{\Psi} u} \right\} \geq 1 - \alpha. \quad (1.91)$$

Глава II

ПЛАНИРОВАНИЕ РЕГРЕССИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Этот тип планирования возникает в случае, когда необходимо выяснить поведение изучаемого объекта в целом, т. е. необходимо найти такую функцию, которая определяет связь между выходом „черного ящика“ и входными величинами. Эта задача называется иногда задачей поиска математической модели изучаемого процесса, задачей по выяснению механизма явлений и т. д.

Считаем далее, что выполняются предположения о виде среднего значения наблюдений (1.3) и о ковариационной матрице (1.35), (1.48).

§ 1. Сравнение экспериментов. Функция потерь

I. При планировании эксперимента исходят из соответствующего критерия оптимальности. Чтобы задаться этим критерием, необходимо уметь сравнивать различные эксперименты. Для этого уточним и формализуем понятие эксперимента, о котором говорилось во введении, зафиксировав условия проведения опытов и результаты наблюдений. Обозначим через $E^{(j)}$ j -й эксперимент.

Определение 1. Экспериментом $E^{(j)}$ будем называть совокупность матрицы планирования $X^{(j)}$, матрицы ковариаций наблюдений $D(y^{(j)})$ и самого вектора наблюдений $y^{(j)}$.

При определении эксперимента возможны некоторые вариации. В частности, матрицу планирования в определении 1 вполне можно заменить планом эксперимента (0.3), т. к. между ними существует взаимно-

однозначное соответствие, а матрицу ковариаций наблюдений в наших условиях можно заменить дисперсиями наблюдений, т. к. компоненты вектора y , по предположению, некоррелированы.

Эксперимент $E^{(1)}$ отличен от эксперимента $E^{(2)}$, если хотя бы одна из величин, входящих в определение, при $j=1$ отлична от соответствующей величины при $j=2$. Будем считать, что эксперимент $E^{(j)}$ предпочтительнее эксперимента $E^{(2)}$, если значения оценок $\hat{\Theta}$ (или $\hat{\eta}(x)$) эксперимента $E^{(1)}$ „ближе“ к истинным значениям Θ (или $\eta(x)$), чем для эксперимента $E^{(2)}$.

Введем меру близости оценок к истинным значениям. При вычислении расстояния между оценкой и истинным значением будем опираться на матрицу ковариаций оценок параметров, которую для эксперимента $E^{(j)}$ обозначим

$$D(E^{(j)}) = D(\hat{\Theta}(E^{(j)})),$$

где $\hat{\Theta}(E^{(j)})$ — оценка параметров в эксперименте $E^{(j)}$.

Обозначим через $L[D(E^{(j)})]$ меру близости между оценкой $\hat{\Theta}(E^{(j)})$ и истинным значением Θ . Таким же образом будем обозначать расстояние между оценкой поверхности отклика $\hat{\eta}(x, E^{(j)})$, полученной из эксперимента $E^{(j)}$, и истинным значением этой функции $\eta(x)$, т. к. в конечном итоге свойства оценок $\hat{\eta}(x, E^{(j)})$ определяются свойствами оценок $\hat{\Theta}(E^{(j)})$.

Функционал $L[D(E^{(j)})]$ можно определить различным способом. Перечислим некоторые формы задания функционала.

$$1. L[D(E^{(j)})] = |D(E^{(j)})|, \quad (2.1)$$

где вертикальными скобками обозначен детерминант матрицы. Эта форма основана на понятии обобщенной дисперсии при оценке параметров $\hat{\Theta}$, которая равна определителю дисперсионной матрицы оценок $\hat{\Theta}$.

$$2. L[D(E^{(j)})] = \text{Sp } D(E^{(j)}). \quad (2.2)$$

Здесь в качестве меры близости выбран след матрицы, который равен сумме дисперсий оценок параметров Θ .

$$3. L[D(E^{(j)})] = \max_i D_{ii}(E^{(j)}), \quad i = \overline{1, m}. \quad (2.3)$$

Выражение (2.3) в особых пояснениях не нуждается.

4. Если в 1)–3) вместо $D(E^{(j)}) = D(\hat{\Theta}(E^{(j)}))$ везде поставить

$$D(L^T \hat{\Theta}(E^{(j)})) = L^T D(E^{(j)}) L, \quad (2.4)$$

где L — линейное преобразование, то получим вид функционала, более общий по сравнению с 1)–3). В частности, если $L = Im$, то будем иметь 1)–3) в чистом виде. Если $L = [I, 0]$, $I < m$, где 0 — матрица нулей размерности $l \times (m-l)$, то будем иметь выражения 1)–3), касающиеся лишь части параметров $\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_l$, представляющих интерес для экспериментатора, и т. д.

Выражения 1)–4) основаны непосредственно на дисперсионной матрице $D(\hat{\Theta})$. Однако можно ввести расстояния, основанные на дисперсии оценки поверхности отклика $d(x, \hat{\eta}) = d(x, E^{(j)})$.

$$5. L[D(E^{(j)})] = \max_{x \in Z} d(x, E^{(j)}). \quad (2.5)$$

$$6. L[D(E^{(j)})] = \int_Z d(x, E^{(j)}) dx. \quad (2.6)$$

Обычно различают следующие случаи:

а) область Z совпадает с областью Ω_x , где возможны измерения (задача интерполяции);

б) область Z не имеет общих точек с областью Ω_x (задача экстраполяции);

в) область Z является частью области Ω_x .

II. Сравнить эксперименты, основываясь только на конечных результатах, не совсем правильно. При сравнении необходимо учитывать, какой ценой эти результаты достигнуты. Введем затраты τ , под которыми будем понимать время, деньги, материальные средства и т. д., затраченные на проведение эксперимента. Теперь введем функцию потерь $R(E^{(j)})$ эксперимента, учитывающую как затраты τ , так и качество оценивания $L[D(E^{(j)})]$ в виде

$$R(E^{(j)}) = \tau + kL[D(E^{(j)})], \quad (2.7)$$

где k — нормирующая константа.

Теперь уже более конкретно можно сказать, что если

$R(E^{(1)}) < R(E^{(2)})$, то $E^{(1)}$ предпочтительнее $E^{(2)}$.

Если в опыте i произведено r_i наблюдений и стоимость каждого наблюдения равна c , то $\tau = cN$, где $N = \sum_{i=1}^n r_i$ — число всех наблюдений. При этом функция потерь приобретает вид

$$R(E^{(j)}) = cN + kL[D(E^{(j)})]. \quad (2.8)$$

В общем случае (функция $\eta(x, \Theta)$ — произвольная) функция потерь зависит от всех характеристик эксперимента $E^{(j)}$. Однако при линейной параметризации ($\eta(x, \Theta) = \Theta^T f(x)$) функция потерь зависит только от величин $r_i, x_i, i = \overline{1, n}$ и не зависит ни от результатов измерений y , ни от истинных значений параметров Θ . Действительно, с учетом (1.56) запишем

$$D(E^{(j)}) = \sigma^2 M^{-1}; \quad M = \sum_{i=1}^n r_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i).$$

Поскольку функционалы (2.1) — (2.6) зависят лишь от элементов матрицы $D(E^{(j)})$ и функций $f(x)$, то функция потерь зависит только от значений $r_i, x_i, i = \overline{1, n}$.

§ 2. План эксперимента. Центральные планы. Непрерывные нормированные планы

1. Сформулируем в виде определения понятие плана эксперимента, данное во введении.

Определение 2. Совокупность величин

$$\begin{aligned} x_1, x_2, \dots, x_n; \\ r_1, r_2, \dots, r_n; \\ \sum_{i=1}^n r_i = N \end{aligned} \quad (2.9)$$

называется планом $E(N)$ эксперимента. Совокупность точек x_1, x_2, \dots, x_n называется спектром плана.

План (2.9) иначе называется точным планом эксперимента. Как указывалось во введении, матрица плана X и план $E(N)$ эксперимента взаимнооднозначны. Можно найти центр плана $x_0 \in \Omega_x$

$$x_0^T = [x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0p}]$$

по формуле

$$x_{0j} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ij},$$

если задана матрица плана, или

$$x_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n r_i x_i \quad (2.10)$$

в векторном виде, если задан план $E(N)$.

Определение 3. Планирование называется центральным, или, что то же самое, план называется центральным, если центр плана расположен в начале координат.

Согласно определению 3 $x_0 = 0$. Очевидно, что всякий план

$$\tilde{E}(N) = \left\{ \begin{array}{c} \bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n \\ r_1, r_2, \dots, r_n \\ \sum_{i=1}^n r_i = N \end{array} \right\}$$

путем замены переменных $x_i = \bar{x}_i - \bar{x}_0$, где $\bar{x}_0 = N^{-1} \sum_{i=1}^n r_i \bar{x}_i$, может быть преобразован в центральный план $E(N)$.

И, наконец, о размерности переменных. Реальные факторы являются размерными величинами. Иметь дело с такими переменными довольно неудобно. Существуют способы, как перейти к безразмерным факторам. Все они связаны с масштабированием факторов. Пусть, например, размерный фактор \bar{x}_i , $i = \overline{1, p}$ принимает значения $\bar{x}_{i\min} \leq \bar{x}_i \leq \bar{x}_{i\max}$. Сделав простейшую замену переменных:

$$x_i = \frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i0}}{\Delta_i}; \quad \Delta_i = \frac{\bar{x}_{i\max} - \bar{x}_{i\min}}{2}; \quad \bar{x}_{i0} = \frac{\bar{x}_{i\max} + \bar{x}_{i\min}}{2}, \quad (2.11)$$

получаем безразмерные факторы x_i , центр эксперимента находится в начале координат ($x_0 = 0$), область Ω_x

имеет стандартный вид и определяется неравенствами $-1 \leq x_i \leq 1$, $i = \overline{1, p}$.

Таким образом, в дальнейшем будем считать, что факторы — безразмерные и планы — центральные.

Определение 4. Нормированным планом $\varepsilon(N)$ называется точный план, заданный совокупностью величин:

$$\begin{aligned} x_1, x_2, \dots, x_n; \\ p_1, p_2, \dots, p_n; \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1, \quad p_i = \frac{r_i}{N}.$$

Поскольку функция потерь зависит теперь не от всего эксперимента, а лишь от его плана, то в дальнейшем будем обозначать ее $R(E(N))$ или $R(\varepsilon(N))$.

Элементы информационной матрицы $M(E(N))$ можно выразить непосредственно через величины p_i , ($i = \overline{1, n}$) и N :

$$M(E(N)) = N \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i),$$

или

$$M(E(N)) = NM(\varepsilon(N)), \quad (2.13)$$

где

$$M(\varepsilon(N)) = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i) \quad (2.14)$$

есть информационная матрица нормированного плана. Из (2.13) следует, что

$$D(E(N)) = N^{-1} D(\varepsilon(N)); \quad D(\varepsilon(N)) = \sigma^2 M^{-1}(\varepsilon(N)).$$

Для заданного нормированного плана $\varepsilon(N)$ функция потерь имеет вид

$$R[N, \varepsilon(N)] = Nc + kN^{-m} |D(\varepsilon(N))|; \quad (2.15)$$

для случая (2.1) и в остальных случаях

$$R(N, \varepsilon(N)) = N \cdot c + kN^{-1} L[D(\varepsilon(N))], \quad (2.16)$$

где функционал $L[\dots]$ определяется одной из формул (2.2)–(2.6) с соответствующей заменой в них $D(\varepsilon^{(j)})$ на $D(\varepsilon(N))$. Обобщение на случай, когда интерес представляет лишь часть параметров ($l < m$), очевидно.

II. Построив функцию потерь, мы свели планирование эксперимента к некоторой экстремальной задаче, а именно—к поиску минимума функции потерь по N и $\epsilon(N)$:

$$\min_{N, \epsilon(N)} R[H, \epsilon(N)] = R[N^*, \epsilon^*(N)]. \quad (2.17)$$

Решение данной задачи принципиально возможно, но объем вычислений чрезвычайно быстро растет с увеличением числа неизвестных параметров и размерности факторного пространства. При некоторых дополнительных предположениях решение задачи (2.17) существенно упрощается.

Пусть N настолько велико, что функцию потерь можно рассматривать как непрерывную по N . Введем понятие непрерывного нормированного плана.

Определение 5. Непрерывным нормированным планом ϵ называется совокупность величин:

$$\begin{aligned} & x_1, x_2, \dots, x_n; \\ & p_1, p_2, \dots, p_n; \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1, \quad 0 < p_i \leq 1.$$

Из определения непрерывного нормированного плана видно, что он, в отличие от нормированного плана, не зависит от общего числа N наблюдений. При сравнении (2.18) с (2.12) замечаем, что для плана ϵ величины p_i могут изменяться непрерывно в интервале $[0, 1]$, а для плана $\epsilon(N)$ эти величины могут изменяться дискретно с величиной дискрета $\frac{1}{N}$. В связи с этим нормированные планы $\epsilon(N)$ иногда называют дискретными планами.

В наиболее общем случае множество точек спектра плана (2.18) может совпадать с множеством всех точек, принадлежащих некоторой замкнутой области Ω_x . При этом непрерывный нормированный план будет характеризоваться некоторой мерой $\xi(x)$, заданной в области действия Ω_x и удовлетворяющей условиям:

$$\int_{\Omega_x} d\xi(x) = 1; \quad \xi(x) \geq 0; \quad x \in \Omega_x.$$

Обобщая (2.14) на данный случай, можно записать

$$M(\varepsilon) = \int_{\Omega_x} \lambda(x) f(x) f^T(x) d\xi(x). \quad (2.19)$$

В случае непрерывной меры (2.19) примет вид

$$M(\varepsilon) = \int_{\Omega_x} \lambda(x) f(x) f^T(x) p(x) dx, \quad \int_{\Omega_x} p(x) dx = 1. \quad (2.20)$$

Для чисто дискретного случая (мера сосредоточена в конечном числе точек) функцию $p(x)$ иногда удобно считать равной

$$p(x) = \sum_{i=1}^n p_i \delta(x - x_i),$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. Функцию $p(x)$ будем называть функцией распределения затрат.

III. Задание меры $\xi(x)$ или функции $p(x)$ полностью описывает план ε . Очевидно, что при $N \gg n$

$$\min_{N, \varepsilon(N)} R(N, \varepsilon(N)) \approx \min_{N, \varepsilon} R(N, \varepsilon). \quad (2.21)$$

Найдем минимум правой части (2.21) при заданном ε и $L(\varepsilon) = |D(\varepsilon)|$. С учетом (2.15) получим

$$\frac{\partial R(N, \varepsilon)}{\partial N} = c - mk N^{-(m+1)} |D(\varepsilon)| = 0.$$

Оптимальное число N наблюдений соответствует корню (точнее, одному из ближайших к нему целых чисел) этого уравнения

$$N^* = \left[\frac{mk |D(\varepsilon)|}{c} \right]^{\frac{1}{m+1}}. \quad (2.22)$$

Если учесть теперь (2.16), то

$$N^* = \left[\frac{kL |D(\varepsilon)|}{c} \right]^{1/2}. \quad (2.23)$$

Поставляя (2.22), (2.23) в (2.15), (2.16) соответственно, получим

$$R(\varepsilon) = (kmc^m)^{\frac{1}{m+1}} (1 + m^{-1}) |D(\varepsilon)|^{\frac{1}{m+1}}; \quad (2.24)$$

$$R(\varepsilon) = 2k^{1/2} c^{\frac{1}{2}} [L |D(\varepsilon)|]^{1/2}. \quad (2.25)$$

Из (2.24), (2.25) видно, что функция потерь при любом N является строго возрастающей функцией от $|D(\epsilon)|$ или $L[D(\epsilon)]$. Следовательно, ее минимальное значение достигается при таком непрерывном нормированном плане, который минимизирует $|D(\epsilon)|$ или, соответственно, $L[D(\epsilon)]$. Значение $\min |D(\epsilon)|$ или $\min L[D(\epsilon)]$ не зависит от N . Этот простой, но весьма важный в дальнейшем факт следует непосредственно из определения 5 непрерывного нормированного плана.

Таким образом, планирование эксперимента в рассматриваемом случае сводится к отысканию плана ϵ^* , минимизирующего $|D(\epsilon)|$ или одну из величин $L[D(\epsilon)]$, и последующему вычислению оптимального числа измерений N^* .

За большинством планов, минимизирующих ту или иную нормированную величину (2.1)–(2.6), в литературе по планированию эксперимента укрепились собственные названия. Например, планы, минимизирующие величину определителя $|D(\epsilon)|$, называются *D-оптимальными*; планы, минимизирующие $\max_x d(x, \epsilon) = \max_x f^T(x)D(\epsilon)f(x)$ — *минимаксными* или *G-оптимальными*; минимизирующие среднюю нормированную дисперсию $m^{-1} \text{Sp} D(\epsilon)$ — *A-оптимальными*; минимизирующие $D_{ii}(\epsilon)$ — *минимаксными в пространстве параметров*.

В нашем курсе будут рассматриваться *D-оптимальные* и *G-оптимальные* планы. В курсе лекций также будут еще разобраны ортогональные и ротатабельные планы. Они вытекают из не столь четких критериев оптимальности, но позволяют достаточно просто и эффективно ставить эксперимент и обрабатывать наблюдения.

§ 3. Основные свойства информационной матрицы

Как было показано в предыдущем параграфе, качество планирования определяется дисперсионной матрицей оценок параметров $\hat{\theta}$, которая, в свою очередь, зависит от информационной матрицы, и изучение ее свойств, поэтому, является нашей ближайшей задачей.

Прежде чем рассматривать свойства информационной матрицы, приведем некоторые полезные определения.

Будем обозначать через S_n евклидово n -мерное пространство векторов $s^T = [s_1, s_2, \dots, s_n]$.

Определение 6. Множество S называется *выпуклым*, если любая точка

$$s = (1-\alpha)s_1 + \alpha s_2,$$

где

$$s_1 \in S, s_2 \in S \text{ и } 0 \leq \alpha \leq 1,$$

принадлежит этому множеству.

В частности, множество S^* точек s^*

$$s^* = \sum_{i=1}^k \alpha_i s_i,$$

где

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i = 1, s_i \in S (i = \overline{1, k}, k = 1, 2, \dots)$$

является выпуклым множеством, т. к.

$$(1-\alpha)s_1^* + \alpha s_2^* = (1-\alpha) \sum \alpha_i^{(1)} s_i + \alpha \sum \alpha_i^{(2)} s_i = \sum \alpha_i s_i = s^*,$$

где

$$\alpha_i = (1-\alpha)\alpha_i^{(1)} + \alpha\alpha_i^{(2)}.$$

Определение 7. Множество S^* называется *выпуклой оболочкой* множества S .

Примеры выпуклых оболочек даны на рис. 2.1.

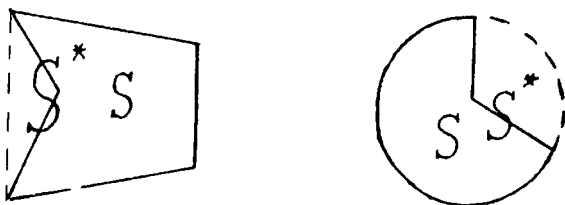


Рис. 2.1

Теорема Каратеодори. Всякую точку s^* в выпуклой оболочке S^* любого подмножества S n -мерного пространства можно представить в виде

$$S^* = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i S_i,$$

где

$$\alpha_i \geq 0, \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i = 1; s_i \in S.$$

Доказательство теоремы опущено.

Сформулируем и докажем теперь некоторые свойства информационной матрицы.

Свойство 1. Для любого плана ε информационная матрица $M(\varepsilon)$ — положительно полуопределенная.

Для доказательства достаточно показать, что для симметричной матрицы $M(\varepsilon)$ и любого вектора z с действительными компонентами квадратичная форма

$$z^T M(\varepsilon) z \geq 0.$$

Умножим выражение (2.19)

$$M(\varepsilon) = \int_{\Omega_x} \lambda(x) f(x) f^T(x) d\xi(x)$$

слева и справа соответственно на z^T и z . Тогда

$$\begin{aligned} z^T M(\varepsilon) z &= \int_{\Omega_x} z^T \lambda(x) f(x) f^T(x) z d\xi(x) = \\ &= \int_{\Omega_x} [z^T \sqrt{\lambda(x)} f(x)]^2 d\xi(x) \geq 0. \end{aligned}$$

Таким образом, информационная матрица положительно полуопределена.

Свойство 2. Матрица $M(\varepsilon)$ — особенная ($|M(\varepsilon)| = 0$), если спектр плана ε содержит меньше, чем m точек (m — число неизвестных параметров).

Если число точек плана конечно, то

$$M(\varepsilon) = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i).$$

Докажем, что ранг r_M информационной матрицы удовлетворяет соотношению

$$r_M \leq n.$$

Вспользуемся следующими сведениями из линейной алгебры: если A, B, C — матрицы соответствующих раз-

мерностей, а r_A, r_B, r_C — их ранги, то $r_C \leq r_A + r_B$, если $C = A + B$; $r_C \leq \min(r_A, r_B)$, если $C = A \cdot B$.

Теперь нетрудно видеть, что ранг вектора $f(x_i)$ равен единице, ранг матрицы $f(x_i) f^T(x_i)$ равен единице, а ранг информационной матрицы не больше суммы рангов матриц $p_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i)$, т. е.

$$r_M \leq n.$$

Если $n < m$, то $r_M < m$ и, следовательно, матрица $M(\varepsilon)$ — особенная.

Свойство 3. Множество матриц $M(\varepsilon)$, соответствующее всем возможным нормированным планам, является выпуклым.

Пусть ε_1 и ε_2 — два произвольных нормированных плана, заданных на множестве Ω_x . Пусть каждый из этих планов характеризуется соответственно мерой $\xi_1(x)$ и мерой $\xi_2(x)$. Тогда под линейной комбинацией этих планов

$$\varepsilon = (1 - \alpha)\varepsilon_1 + \alpha\varepsilon_2$$

подразумевается нормированный план с мерой

$$\xi(x) = (1 - \alpha)\xi_1(x) + \alpha\xi_2(x).$$

Легко проверить, опираясь непосредственно на определение информационной матрицы (2.19), что матрица

$$M = (1 - \alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2) \quad (2.26)$$

также является информационной матрицей нормированного плана ε , заданного на Ω_x , т. е. принадлежит рассматриваемому множеству

$$\begin{aligned} M &= (1 - \alpha) \int_{\Omega_x} \lambda(x) f(x) f^T(x) d\xi_1(x) + \\ &+ \alpha \int_{\Omega_x} \lambda(x) f(x) f^T(x) d\xi_2(x) = \\ &= \int_{\Omega_x} \lambda(x) f(x) f^T(x) d\xi(x). \end{aligned}$$

Отсюда и из определения 6 выпуклого множества следует, что множество информационных матриц, соответствующих непрерывным нормированным планам, заданных на Ω_x , выпукло.

Свойство 4. Для любого плана ε всегда найдется план $\tilde{\varepsilon}$, спектр которого содержит не более чем $\frac{m(m+1)}{2}$ +

+1 точек и информационная матрица которого $M(\epsilon)$ совпадает с информационной матрицей $M(\epsilon)$ плана ϵ .

Так как информационная матрица симметрична, то она полностью описывается $\frac{m(m+1)}{2}$ элементами, т. е. каждой информационной матрице можно сопоставить вектор размерности $\frac{m(m+1)}{2}$. Непосредственно из определения информационной матрицы следует, что множество векторов, определяющих информационные матрицы $M(\epsilon)$, где ϵ —произвольные нормированные планы, являются выпуклой оболочкой множества, состоящего из векторов, соответствующих информационным матрицам $M(\epsilon(x))$, где спектр плана $\epsilon(x)$ состоит из единственной точки x , т. к. $M(\epsilon) = \sum_{i=1}^n M(\epsilon(x_i)) \cdot p_i$. Отсюда и из теоремы Каратеодори вытекает утверждение 4.

Свойство 4 особенно важно с практической точки зрения. Оно говорит о том, что для любого плана эксперимента ϵ с числом точек, превышающим $n = \frac{(m+1)m}{2} + 1$, и информационной матрицей $M(\epsilon)$ всег-

да можно найти план $\tilde{\epsilon}$ с числом точек, меньшим или равным n , который при тех же затратах будет иметь информационную матрицу $M(\tilde{\epsilon}) = M(\epsilon)$. Иными словами, для плана ϵ всегда найдется план с меньшим числом точек, но эквивалентный ему в смысле (2.1) и (2.6). Таким образом, распределение измерений больше, чем в $n = \frac{(m+1)m}{2} + 1$ точках, никакой выгоды с математико-статистической точки зрения принести не может.

§ 4. Эквивалентность D -оптимальных и минимаксных планов

Вообще говоря, не существует универсальных оптимальных планов, которые удовлетворяли бы всем критериям оптимальности.

Но некоторые из критериев оптимальности оказыва-

ются тесно связанными между собой и для них удастся построить единые оптимальные планы. Обсудим связь между D -оптимальными и минимаксными планами. Эти критерии сравнивают результаты эксперимента в разных пространствах — в пространстве параметров и в пространстве результат измерения — контролируемые переменные. Поэтому существование планов, одновременно оптимальных по каждому из этих критериев, является удобным для экспериментатора.

При $p_i = r_i N^{-1}$, где r_i, N — целые, не удастся получить общих выводов по этому вопросу. При переходе к непрерывным планам, которые являются хорошим приближением к действительности при больших N , можно утверждать, что минимаксные и D -оптимальные планы эквивалентны для случая равноточных измерений, т. е. при $\lambda(x) = 1$.

Для доказательства этого фундаментального утверждения нам потребуются следующие вспомогательные утверждения.

Лемма 1. Пусть информационная матрица произвольного плана ϵ неособенная. Тогда:

1. Взвешенная сумма дисперсий оценки поверхности отклика $d(x, \epsilon)$, взятая по всем точкам плана ϵ , равна числу неизвестных параметров m

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) d(x_i, \epsilon) = m,$$

в более общем случае

$$\int_{\Omega_x} \lambda(x) d(x, \epsilon) d\xi(x) = m.$$

2. Минимальное значение $\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \epsilon)$ не может быть меньше m

$$\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \epsilon) \geq m.$$

Доказательство. 1. При доказательстве первого утверждения используем следующее соотношение для вектора a и квадратной матрицы B :

$$a^T B a = \text{Sp}(B a a^T),$$

которое проверяется при поэлементной записи. В частности, для дисперсий оценки поверхности отклика $d(x, \epsilon)$ имеем

$$d(x, \varepsilon) = f^T(x)M^{-1}(\varepsilon)f(x) = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon)f(x)f^T(x), \quad (2.27)$$

откуда

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon)d\xi(x) &= \int_{\Omega_x} \lambda(x)f^T(x)M^{-1}(\varepsilon)f(x)d\xi(x) = \\ &= \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon) \int_{\Omega_x} \lambda(x)f(x)f^T(x)d\xi(x) = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon)M(\varepsilon) = \\ &= \text{Sp } I_m = m. \end{aligned}$$

2. По теореме о среднем из утверждения 1 доказываемой леммы можно записать

$$\int_{\Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon)d\xi(x) = d^* \int_{\Omega_x} d\xi(x) = d^* = m,$$

где

$$\min_x \lambda(x)d(x, \varepsilon) \leq d^* \leq \max_x \lambda(x)d(x, \varepsilon).$$

Поэтому

$$\max_x \lambda(x)d(x, \varepsilon) \geq m. \blacksquare$$

При формулировке следующей леммы необходимо ввести понятие выпуклой и вогнутой функций.

Определение 8. Если S — выпуклое множество, то числовая функция, определенная на S , называется выпуклой, если для всех $s_1, s_2 \in S$ и всех α , удовлетворяющих условию $0 < \alpha < 1$:

$$f[(1-\alpha)s_1 + \alpha s_2] \leq (1-\alpha)f(s_1) + \alpha f(s_2),$$

и называется вогнутой, если

$$f[(1-\alpha)s_1 + \alpha s_2] > (1-\alpha)f(s_1) + \alpha f(s_2).$$

Если эти неравенства являются строгими при $s_1 \neq s_2$, $0 < \alpha < 1$, то функция f называется соответственно строго выпуклой или строго вогнутой.

Лемма 2. Функция $\ln |M(\varepsilon)|$, где $M(\varepsilon)$ — информационная матрица плана ε , является строго вогнутой функцией от матрицы $M(\varepsilon)$.

Доказательство. Для доказательства утверждения используем теорему о вогнутости определителя симметричной положительно определенной матрицы.

Если матрицы A и B положительно определены, то

$$|(1-\alpha)A + \alpha B| \geq |A|^{1-\alpha} |B|^\alpha, \quad (2.28)$$

причем равенство имеет место, если только $A=B$.

Ранее было показано, что множество матриц $M(\varepsilon)$ — выпуклое множество. Поэтому, используя (2.28), получим

$$|M| = |(1-\alpha)M_1 + \alpha M_2| > |M_1|^{1-\alpha} |M_2|^\alpha, \quad (2.29)$$

где

$$M_1 = M_2.$$

Логарифмируя левую и правую части неравенства (2.29), получим выражение, доказывающее лемму:

$$\ln |M| > (1-\alpha) \ln |M_1| + \alpha \ln |M_2|. \quad \blacksquare$$

Лемма 3. Пусть имеется два плана ε_1 и ε_2 с информационными матрицами $M(\varepsilon_1)$ и $M(\varepsilon_2)$. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\varepsilon)| = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon) [M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)],$$

где $M(\varepsilon)$ — информационная матрица плана

$$\varepsilon = (1-\alpha)\varepsilon_1 + \alpha\varepsilon_2, \quad 0 \leq \alpha \leq 1.$$

Доказательство. Основано на формуле, получающейся при нахождении производной логарифма определителя неособенной матрицы A по параметру

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \ln |A| = \text{Sp } A^{-1} \frac{\partial A}{\partial \lambda}, \quad (2.30)$$

где $\frac{\partial A}{\partial \lambda}$ — матрица производных от элементов матрицы A .

Соотношение (2.30) можно получить, если определитель матрицы A представить в виде

$$\begin{aligned} |A| &= \sum (-1)^{-k} A_{1k_1} A_{2k_2} \cdots A_{mk_m} = \\ &= \sum (-1)^k \prod_{i=1}^m A_{ik_i}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

где k_1, \dots, k_m пробегает все $m!$ перестановок из чисел $-1, 2, \dots, m$; k — число инверсий в каждой перестановке.

Взяв производную от логарифма выражения (2.31), после несложных преобразований получаем (2.30). Используя (2.29) с учетом (2.26), будем иметь

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\varepsilon)| = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon) \frac{\partial M(\varepsilon)}{\partial \alpha} =$$

$$= \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon)[M(\varepsilon_2) - M(\varepsilon_1)]. \blacksquare$$

Теорема 1 (теорема эквивалентности).

Следующие утверждения:

1. план ε^* максимизирует $|M(\varepsilon)|$ (минимизирует $|D(\varepsilon)|$);

2. план ε^* минимизирует $\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon)$;

3. $\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon^*) = m$ — эквивалентны между собой.

Информационные матрицы всех планов, удовлетворяющих $1 \rightarrow 3$, совпадают между собой. Любая линейная комбинация планов, удовлетворяющих $1 \rightarrow 3$, также удовлетворяет $1 \rightarrow 3$.

Доказательство.

1. Покажем, что из 1 следует 2. Пусть план ε^* максимизирует $|M(\varepsilon)|$.

Рассмотрим план, соответствующий линейной комбинации плана ε^* и некоторого произвольного плана ε :

$$\tilde{\varepsilon} = (1 - \alpha)\varepsilon^* + \alpha\varepsilon.$$

Согласно лемме 3

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\tilde{\varepsilon})| \Big|_{\alpha=0} &= \text{Sp } M^{-1}(\tilde{\varepsilon})[M(\varepsilon) - M(\varepsilon^*)] \Big|_{\alpha=0} = \\ &= \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*)[M(\varepsilon) - M(\varepsilon^*)] = \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*)M(\varepsilon) - m. \end{aligned}$$

Так как план ε^* максимизирует $|M(\varepsilon)|$, то

$$\left. \frac{\partial \ln |M(\tilde{\varepsilon})|}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} \leq 0.$$

Предполагая, что спектр плана ε состоит из одной точки, с учетом (2.27) получим

$$\begin{aligned} \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*)M(\varepsilon(x)) - m &= \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*)\lambda(x)f(x)f^T(x) - m = \\ &= -\lambda(x)f^T(x)M^{-1}(\varepsilon^*)f(x) - m = \lambda(x)d(x, \varepsilon^*) - m \leq 0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Но из леммы 1

$$\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon) \geq m. \quad (2.33)$$

Объединяя (2.33), (2.32), получаем следующее выражение:

$$\lambda(x)d(x, \varepsilon^*) \leq m \leq \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon), \quad (2.34)$$

из которого непосредственно [следует

$$\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon^*) \leq m \leq \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon). \quad (2.35)$$

Из (2.35) непосредственно вытекает, что D -оптимальный план ε^* является и минимаксным

$$\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon^*) = \min \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon) = m. \quad (2.36)$$

2. Пусть теперь верно утверждение 2 теоремы, т. е. план ε^* минимизирует $\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon)$. Необходимо доказать, что он D -оптимальный.

Пусть план ε^* — не D -оптимальный; тогда, в силу строгой вогнутости $\ln |M(\varepsilon)|$, найдется такой план ε , что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |(1-\alpha)M(\varepsilon^*) + \alpha M(\varepsilon)| \Big|_{\alpha=0} &= \\ &= \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*)M(\varepsilon) - m > 0. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Но согласно свойству 4 информационной матрицы любой план можно представить в виде суперпозиции $\frac{m(m+1)}{2} + 1$ планов $\varepsilon(x_i)$, содержащих одну точку в спектре с матрицами $M(\varepsilon(x_i)) = \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i) (i=1, 2, \dots, \frac{m(m+1)}{2} + 1)$. Поэтому, не ограничивая общности, можно считать, что ε состоит из конечного числа точек. Тогда с учетом (2.27)

$$\begin{aligned} \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*)M(\varepsilon) - m &= \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) \text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*) f(x_i) f^T(x_i) - m = \\ &= \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) d(x_i, \varepsilon^*) - m. \end{aligned}$$

Из (2.36) следует, что для минимаксных планов ε^* $\lambda(x) d(x, \varepsilon^*) \leq m$, тогда

$$\text{Sp } M^{-1}(\varepsilon^*)M(\varepsilon) - m = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) d(x_i, \varepsilon^*) - m \leq m \sum_{i=1}^n p_i - m = 0. \quad (2.38)$$

Неравенства (2.37), (2.38) противоречивы, следовательно, ε^* — D -оптимальный план.

3. Докажем теперь эквивалентность утверждений 1 и 3, 2 и 3.

Из эквивалентности утверждений 1 и 2 и выражения (2.36) следует, что для D -оптимальных и минимаксных планов утверждение 3 выполняется. Теперь допустим, что утверждение 3 выполняется

$$\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon^*) = m. \quad (2.39)$$

Из (2.39) и утверждения 2 леммы 1 можем записать

$$m = \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon^*) \leq \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon),$$

откуда следует, что ε^* — минимаксный, а следовательно, и D -оптимальный план.

4. Пусть планы ε_1 и ε_2 с информационными матрицами $M(\varepsilon_1)$ и $M(\varepsilon_2)$ являются D -оптимальными и $M(\varepsilon_1) \neq M(\varepsilon_2)$. Рассмотрим информационную матрицу, соответствующую композиции планов ε_1 и ε_2 :

$$M(\varepsilon) = (1 - \alpha)M(\varepsilon_1) + \alpha M(\varepsilon_2).$$

Согласно лемме 2:

$$\ln |M(\varepsilon)| > (1 - \alpha) \ln |M(\varepsilon_1)| + \alpha \ln |M(\varepsilon_2)|. \quad (2.40)$$

Но по определению D -оптимального плана

$$|M(\varepsilon_1)| = |M(\varepsilon_2)| = |M(\varepsilon)|. \quad (2.41)$$

Нетрудно видеть, что (2.40) и (2.41) не противоречат друг другу, если

$$M(\varepsilon_1) = M(\varepsilon_2) = M(\varepsilon), \quad (2.42)$$

т. е. информационные матрицы планов, удовлетворяющих 1 → 3, совпадают между собой. Кроме того, из (2.42) следует, что линейная комбинация планов, удовлетворяющих 1 → 3, также удовлетворяет 1 → 3. ■

Эта теорема играет важную роль в построении математического аппарата планирования. Из нее, в частности, следует, что при $\lambda(x) \equiv 1$ минимаксные непрерывные планы эквивалентны непрерывным D -оптимальным планам. Поэтому, доказав какое-либо свойство для D -оптимального плана, мы можем быть уверены в справедливости этого свойства для минимаксного плана, и наоборот. Теорема эквивалентности является основной и при поиске самих D -оптимальных планов. Эта теорема

также дает очень простой способ проверки D -оптимальности плана. Для этого достаточно проверить, что функция $\lambda(x)d(x, \varepsilon)$ не превышает m . При этом весьма полезным оказывается следующее следствие теоремы.

Следствие. В точках оптимального плана ε^* функция $\lambda(x)d(x, \varepsilon^*)$ достигает своего максимального значения m .

Предположим противное, т. е. согласно (2.34):

$$\lambda(x)d(x, \varepsilon^*) < m, \quad (2.43)$$

где x — одна из точек плана ε^* . Просуммируем левую и правую части неравенства (2.43) по всем точкам плана ε^* с весами p_i

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i, \varepsilon^*) < \sum_i p_i m = m.$$

Но по лемме 1

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i, \varepsilon^*) = m. \quad (2.44)$$

Получили противоречие, следовательно:

$$\lambda(x)d(x, \varepsilon^*) = m \quad (2.45)$$

в точках оптимального плана ε^* .

Это следствие удобно тем, что при проверке плана на оптимальность позволяет ограничиться проверкой выполнения равенства (2.45) только для точек плана $x_i (i=1, n)$ вместо проверки неравенства (2.34) во всей области Ω_x .

Отметим, что выполнение равенства (2.45) в точках D -оптимального плана является условием необходимым, но не достаточным.

§ 5. Свойства D -оптимальных планов

Рассмотрим некоторые полезные свойства D -оптимальных планов.

Обычно желательно, чтобы оптимальные планы обладали возможно большим спектром свойств инвариантности. Например, для экспериментатора очень удобно, когда оптимальный план инвариантен относительно перехода от одного критерия оптимальности к другому. Примером инвариантности подобного рода

может служить эквивалентность непрерывных D -оптимальных и минимаксных планов ($\lambda(x)=1$). Чрезвычайно заманчива перспектива построения планов, которые были бы оптимальны не только для заданного набора функций $f^T(x)=[f_1(x), f_2(x)\cdots f_m(x)]$, но и для возможно более широкого семейства наборов функций $\tilde{f}^T(x)=[\tilde{f}_1(x), \tilde{f}_2(x), \dots, \tilde{f}_m(x)]$. Исследуем, в какой степени D -оптимальные планы удовлетворяют указанному свойству инвариантности.

Теорема 2. Пусть L —некоторое невырожденное ($|L| \neq 0$) линейное преобразование

$$L\varphi(x)=f(x), \quad \varphi=L^{-1}f, \quad (2.46)$$

тогда план ε^* , D -оптимальный относительно набора $f(x)$, является D -оптимальным относительно набора $\varphi(x)$.

Доказательство. Пусть для некоторого плана ε имеем дисперсионную матрицу $D(\varepsilon)$ при $\eta(x, \Theta)=\Theta^T f(x)$.

Регрессионную функцию $\eta(x, \Theta)$ можно записать также в виде

$$\eta(x, \Theta)=\Theta^T f(x)=t^T \varphi(x)=t^T L^{-1} f(x), \quad (2.47)$$

где t —набор параметров, соответствующий набору функций $\varphi(x)$.

Так как равенство (2.47) имеет место при любом x , то

$$t=L^T \Theta.$$

Согласно (2.4)

$$D(\hat{t}, \varepsilon)=L^T D(\hat{\Theta}, \varepsilon)L$$

или

$$|D(\hat{t}, \varepsilon)|=|L|^2 |D(\hat{\Theta}, \varepsilon)|. \quad (2.48)$$

Минимизируя обе части (2.48) по ε , получим

$$\min |D(\hat{t}, \varepsilon)|=|L|^2 \min |D(\hat{\Theta}, \varepsilon)|=|L|^2 |D(\hat{\Theta}, \varepsilon^*)|,$$

т. е.

$$\min |D(\hat{t}, \varepsilon)|=|D(\hat{t}, \varepsilon^*)|,$$

что и требовалось доказать. ■

Иногда теорему 2 удобнее использовать в несколько иной форме

Теорема 3. D -оптимальные планы инвариантны относительно любого невырожденного линейного преобразования оцениваемых параметров

$$t = C_1 \Theta, |C| \neq 0. \quad (2.49)$$

Чтобы перейти от (2.49) к (2.46), достаточно положить $C = L^T$.

В теореме 2 показано, что D -оптимальные планы инвариантны относительно преобразований (2.46). Существуют преобразования, относительно которых D -оптимальные планы, не являясь инвариантными, преобразуются по простым правилам.

Теорема 4. Пусть контролируемые переменные x преобразуются по закону

$$z = Z(x),$$

где Z — невырожденное в области Ω_x взаимно однозначное преобразование

$$\left| \frac{D(z)}{D(x)} \right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial z_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial z_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial z_1(x)}{\partial x_k} \\ \frac{\partial z_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial z_2(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial z_2(x)}{\partial x_k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial z_k(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial z_k(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial z_k(x)}{\partial x_k} \end{vmatrix} \neq 0$$

и пусть ϵ_x^* — D -оптимальный план для регрессионной функции $\eta(x, \Theta) = \Theta^T f(x)$ с функцией распределения затрат $p(x)$, определенной на Ω_x . Тогда функция распределения затрат D -оптимального плана ϵ_z^* регрессионной функции $\eta(z, \Theta) = \Theta^T \varphi(z)$ равна

$$p(z) = \left| \frac{D(x)}{D(z)} \right| p(x). \quad (2.50)$$

При дискретном спектре план ϵ_z^* связан с планом ϵ_x^* следующим образом:

$$\epsilon_z^* = \begin{cases} z_1 = Z(x_1); z_2 = Z(x_2); \dots; z_n = Z(x_n); \\ p_{z_1} = p_{x_1}; p_{z_2} = p_{x_2}; \dots; p_{z_n} = p_{x_n}. \end{cases} \quad (2.51)$$

Доказательство. Для доказательства теоремы достаточно проверить, что

$$\lambda(z)d(z, \varepsilon_z^*) \leq m \text{ при } z \in \{Z(x), x \in \Omega_x\}.$$

Действительно, для плана ε_z^* , определяемого (2.50), имеем

$$\begin{aligned} \lambda(z)d(z, \varepsilon_z^*) &= \lambda(z)\varphi^T(z) \left[\int_{\Omega_z} \lambda(z)p(z)\varphi(z)\varphi^T(z)dz \right]^{-1} \varphi(z) = \\ &= \lambda(Z(x))\varphi^T(Z(x)) \left[\int_{\Omega_x} \lambda(Z(x))p(x) \left| \frac{D(x)}{D(z)} \right| \varphi[Z(x)] \times \right. \\ &\quad \left. \times \varphi^T[Z(x)] \left| \frac{D(z)}{D(x)} \right| dx \right]^{-1} \varphi[Z(x)] = \\ &= \lambda(x)f^T(x) \left[\int_{\Omega_x} \lambda(x)p(x)f(x)f^T(x)dx \right]^{-1} f(x) = \lambda(x)d(x, \varepsilon_x^*), \end{aligned} \quad (2.52)$$

так как

$$\lambda[Z(x)] = \lambda(x) \text{ и } \varphi[Z(x)] = f(x).$$

Поэтому из (2.52)

$$\max_{z \in \Omega_z} \lambda(z)d(z, \varepsilon_z^*) = \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon_x^*) = m. \quad (2.53)$$

Из (2.53) и теоремы эквивалентности следует, что распределение затрат $p(z)$, определяемое (2.50), соответствует D -оптимальному плану в пространстве Ω_z .

Дискретный случай рассматривается аналогично (интегрирование при этом заменяется суммированием). ■

Изложенная теорема позволяет во многих случаях преобразованием контролируемых переменных привести функции $\eta(x, \Theta)$ и $\lambda(x)$ к функциям, для которых D -оптимальный план известен или может быть сравнительно просто построен.

§ 6. Численный метод построения D -оптимальных планов

I. В настоящее время существует ряд методов получения D -оптимальных планов. Все они в конечном счете связаны с решением экстремальной задачи

$$|D(\varepsilon^*)| = \min |D(\varepsilon)|. \quad (2.54)$$

Явное решение [задач на построение D -оптимальных планов оказывается возможным лишь в простейших случаях и требует в каждом отдельном случае специального подхода. В литературе по планированию D -оптимальных экспериментов предложено довольно много оптимальных планов для конкретных функций. Практически все они строятся на основании полуинтуитивных соображений (например, из соображений симметрии расположения точек плана, ортогональности функций $f_i(x)$ на точках плана и т. д.). Полученные таким образом планы проверяются затем по теореме эквивалентности на D -оптимальность. Подобные методы оказываются плодотворными, когда области Ω_x возможных значений контролируемых переменных x представляют собой простые геометрические фигуры, например шар или куб в пространстве контролируемых переменных, а функция эффективности $\lambda(x)$ постоянна на Ω_x . Получающиеся решения обычно конкретные и трудно поддаются обобщениям. В более сложных ситуациях прямые методы вряд ли окажутся полезными. Так же как и во многих других математических проблемах, усложнение вида изучаемых функционалов заставляет обратиться к численным методам поиска решений. Одним из простейших, с идейной точки зрения, явился бы прямой поиск максимума определителя $|M(\epsilon)|$. Однако все методы, связанные с прямым поиском максимума определителя $|M(\epsilon)|$, непригодны, т. к. количество переменных, по которым необходимо вести поиск экстремума, очень быстро растет с ростом числа оцениваемых параметров.

Поэтому необходимо, опираясь на конкретные свойства исследуемых функционалов, получить специальный численный метод построения D -оптимальных планов, значительно превышающий по своим показателям обычные методы.

II. Основная идея, используемая при построении такого метода, заключается [в следующем. Согласно лемме 3

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\epsilon_1)| =$$

$$= \text{Sp}[(1-\alpha)M(\epsilon_0) + \alpha M(\epsilon(x))]^{-1} [M(\epsilon(x)) - M(\epsilon_0)],$$

где $\epsilon_1 = (1-\alpha)\epsilon_0 + \alpha\epsilon(x)$; $M(\epsilon_0)$ — информационная матри-

ца некоторого невырожденного плана ε_0 ; $M(\varepsilon_0)$ — информационная матрица плана $\varepsilon(x)$, состоящего из одной точки x . При $\alpha=0$ будем иметь

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\varepsilon_1)| \Big|_{\alpha=0} = \lambda(x)d(x, \varepsilon_0) - m.$$

При достаточно малых α

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\varepsilon_1)| \Big|_{\alpha=0} \cong \frac{\ln |M(\varepsilon_1)| - \ln |M(\varepsilon_0)|}{\alpha},$$

откуда

$$\ln |M(\varepsilon_1)| \cong \ln |M(\varepsilon_0)| + \alpha[\lambda(x)d(x, \varepsilon_0) - m]. \quad (2.55)$$

Но в силу теоремы эквивалентности

$$\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon_0) - m = \delta \geq 0,$$

и равенство имеет место, если только план ε_0 D -оптимален.

Пусть план ε_0 не является D -оптимальным. Помещающая часть затрат в точку x_0 , соответствующую $\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon_0)$,

(x, ε_0), получим при малом α_0

$$\ln |M(\varepsilon_1)| \cong \ln |M(\varepsilon_0)| + \alpha_0 \delta > \ln |M(\varepsilon_0)|. \quad (2.56)$$

Неравенство (2.56) говорит о том, что план $\varepsilon_1 = (1 - \alpha_0)\varepsilon_0 + \alpha_0\varepsilon(x_0)$ с информационной матрицей $M(\varepsilon_1)$ лучше, чем ε_0 , т. е. $|M(\varepsilon_1)| > |M(\varepsilon_0)|$.

Построив план ε_1 , найдем точку x_1 , соответствующую $\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon_1)$. Помещающая малую часть затрат α

в эту точку, мы построим план лучший, чем план ε_1 . Продолжая эту процедуру, получим последовательность матриц $M(\varepsilon_0), M(\varepsilon_1), \dots, M(\varepsilon_s)$ таких, что

$$|M(\varepsilon_0)| < |M(\varepsilon_1)| < \dots < |M(\varepsilon_s)|. \quad (2.57)$$

Последовательность (2.57) ограничена сверху:

$$|M(\varepsilon_s)| \leq |M(\varepsilon^*)|,$$

где ε^* — D -оптимальный план. Поэтому при подходящем выборе α_s она сойдется к $|M(\varepsilon^*)|$.

Рассмотренная итеративная процедура обладает рядом недостатков. Процедура работает при достаточно малых α_s . Последовательность величин α_s должна

удовлетворяют довольно неопределенному требованию сходимости $|M(\epsilon_s)|$ к $|M(\epsilon^*)|$ (α_s должно при $s \rightarrow \infty$ стремиться к нулю, но не слишком быстро, иначе последовательность $\{|M(\epsilon_s)|\}$ может сойтись, не достигнув своей верхней границы). Процедура имеет операцию обращения матриц (при вычислении $d(x, \epsilon)$) и поиск глобального экстремума функции $\lambda(x)d(x, \epsilon)$, требующие очень много машинного времени. При исправлении всех этих недостатков итеративная процедура приобретает вполне законченный вид, и ее можно реализовать на вычислительных машинах.

III. Прежде всего обобщим формулу (2.55) на случай произвольного α , заключенного в интервале $(0, 1)$.

Лемма 4. Пусть M — невырожденная матрица $m \times m$, а F — матрица $m \times k$, тогда

$$|M + FF^T| = |M| |I_k + F^T M^{-1} F|. \quad (2.58)$$

Доказательство. Утверждение (2.58) непосредственно вытекает из следующего факта, связанного с вычислением определителей матриц, обладающих блочной структурой. Пусть

$$R = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix},$$

где R, A, D — квадратные, а B, C — прямоугольные матрицы соответствующих размерностей. Тогда можно записать

$$\begin{aligned} |R| &= \begin{vmatrix} I & -BD^{-1} \\ 0 & I \end{vmatrix} \begin{vmatrix} AB \\ CD \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ & C & D \end{vmatrix} = \\ &= |A - BD^{-1}C| |D|; \end{aligned} \quad (2.59)$$

$$\begin{aligned} |R| &= \begin{vmatrix} I & 0 \\ -CA^{-1} & I \end{vmatrix} \begin{vmatrix} AB \\ CD \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A & C \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{vmatrix} = \\ &= |A| |D - CA^{-1}B|. \end{aligned} \quad (2.60)$$

(2.59), (2.60) легко получить, если при выполнении действий над блочными матрицами пользоваться теми же формальными правилами, как и в случае, если вместо блоков имеются числовые элементы.

В частности, можно записать выражение

$$\begin{vmatrix} AB \\ 0 D \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A 0 \\ C D \end{vmatrix} = |A| |D|,$$

которое использовалось в (2.59), (2.60). Из (2.59), (2.60) следует

$$|R| = |A - BD^{-1}C| |D| = |A| |D - CA^{-1}B|.$$

Полагая теперь $A=M$, $B=F$, $C=-F^T$, $D=I_k$, получим необходимый результат (2.58). ■

Теорема 5. Пусть $M(\epsilon_s)$ — информационная матрица невырожденного плана ϵ_s и $M(\epsilon(x))$ — информационная матрица плана, сосредоточенного в единственной точке x . Тогда определитель информационной матрицы линейной комбинации этих планов $\epsilon_{s+1} = (1-\alpha)\epsilon_s + \alpha\epsilon(x)$ равен

$$|M(\epsilon_{s+1})| = (1-\alpha)^m \left[1 + \frac{\alpha}{1-\alpha} \lambda(x) d(x, \epsilon_s) \right] \cdot |M(\epsilon_s)|. \quad (2.61)$$

Доказательство. Согласно определению

$$\begin{aligned} M(\epsilon_{s+1}) &= (1-\alpha)M(\epsilon_s) + \alpha \lambda(x) f(x) f^T(x) = \\ &= (1-\alpha) \left[M(\epsilon_s) + \frac{\alpha}{1-\alpha} \lambda(x) f(x) f^T(x) \right]. \end{aligned}$$

Положив в (2.58) $F = \left[\frac{\alpha \lambda(x)}{1-\alpha} \right]^{1/2} f(x)$, получим

$$|M(\epsilon_{s+1})| = (1-\alpha)^m \left[1 + \frac{\alpha \lambda(x)}{1-\alpha} f^T(x) M^{-1}(\epsilon_s) f(x) \right] |M(\epsilon_s)|.$$

Последнее равенство совпадает с (2.61), если учесть, что

$$f^T(x) M^{-1}(\epsilon_s) f(x) = d(x, \epsilon_s). \quad \blacksquare$$

Из (2.61) нетрудно видеть, что величина определителя информационной матрицы построенного плана ϵ_{s+1} зависит как от величины α , так и от координаты точки, в которой сосредоточен план $\epsilon(x)$. Покажем, что всегда найдется такая точка x и такое α , для которых $|M(\epsilon_{s+1})| > |M(\epsilon_s)|$, если план ϵ_s не D -оптимален.

Теорема 6. Наибольшее возможное значение определителя $|M(\epsilon_{s+1})|$ при заданном ϵ_s равно

$$\begin{aligned} \max_{x, \alpha} |M(\epsilon_{s+1})| &= \left[\frac{\lambda(x_s) d(x_s, \epsilon_s)}{m} \right]^m \times \\ &\times \left[\frac{m-1}{\lambda(x_s) d(x_s, \epsilon_s) - 1} \right]^{m-1} |M(\epsilon_s)| > |M(\epsilon_s)|, \quad (2.62) \end{aligned}$$

где x_s есть решение уравнения

$$\lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s) = \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon_s).$$

Доказательство. Из (2.61) легко видеть, что при любом α определитель $|M(\varepsilon_{s+1})|$ является возрастающей функцией $\lambda(x)d(x, \varepsilon_s)$. Отсюда следует, что план $\varepsilon(x)$ должен быть сосредоточен в точке x_s , соответствующей уравнению $\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon_s) = \lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s)$.

Поэтому $\max_{x, \alpha} |M(\varepsilon_{s+1})|$ будет иметь место при $x = x_s$ и α , удовлетворяющих уравнению

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M(\varepsilon_{s+1})| = \frac{\lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s) - 1}{1 - \alpha + \sigma \lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s)} - \frac{m-1}{1-\alpha} = 0. \quad (2.63)$$

Решением (2.63) является

$$\alpha_s = \frac{\lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s) - m}{[\lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s) - 1]m}. \quad (2.64)$$

Так как план ε_s по предположению не D -оптимален, то по теореме эквивалентности

$$\lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s) - m = \max_{x \in \Omega_x} |\lambda(x)d(x, \varepsilon_s) - m| > 0,$$

и следовательно, $\alpha_s > 0$.

С другой стороны, непосредственным дифференцированием можно проверить, что

$$\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \ln |M(\varepsilon_{s+1})| \Big|_{\substack{\alpha = \alpha_s \\ x = x_s}} < 0$$

и α_s , таким образом, соответствует максимуму $\ln |M(\varepsilon_{s+1})|$, причем

$$\max_{x, \alpha} \ln |M(\varepsilon_{s+1})| > \ln |M(\varepsilon_s)|. \quad (2.65)$$

Подставив в (2.61) α_s , определяемое формулой (2.64), после несложных преобразований получим

$$\begin{aligned} |M(\varepsilon_{s+1})| \Big|_{\substack{\alpha = \alpha_s \\ x = x_s}} &= \left[\frac{\lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s)}{m} \right]^m \times \\ &\times \left[\frac{m-1}{\lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s) - 1} \right]^{m-1} |M(\varepsilon_s)|. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Объединяя (2.65), (2.66), убеждаемся в справедливости (2.62). ■

IV. На основании теорем 5, 6 можно составить следующую итерационную процедуру.

Задается некоторый невырожденный план ε_0 (начальное приближение)

$$\varepsilon_0 = \left\{ \begin{array}{l} x_1, x_2, \dots, x_n \\ p_1, p_2, \dots, p_n \end{array} \right\}, \quad n \geq m.$$

1. Подсчитывается его информационная матрица

$$M(\varepsilon_0) = \sum_{i=1}^n p_i \lambda(x_i) f(x_i) f^T(x_i)$$

и обратная ей дисперсионная матрица $D(\varepsilon_0)$.

2. Находится точка x_0 , в которой имеет место

$$\lambda(x_0) d(x_0, \varepsilon_0) = \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \varepsilon_0).$$

3. Составляется план

$$\varepsilon_1 = (1 - \alpha_0) \varepsilon_0 + \alpha_0 \varepsilon(x_0)$$

или, более подробно:

$$\varepsilon_1 = \left\{ \begin{array}{l} x_1, \quad x_2, \quad \dots, x_n, \quad x_0 \\ (1 - \alpha_0) p_1, (1 - \alpha_0) p_2, \dots, (1 - \alpha_0) p_n, \quad \alpha_0 \end{array} \right\}.$$

Величина α_0 выбирается таким образом, чтобы увеличение определителя информационной матрицы было максимальным, т. е.

$$\alpha_0 = \frac{\hat{\delta}_0}{(\hat{\delta}_0 + m - 1) m},$$

где

$$\hat{\delta}_s = \lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s) - m.$$

4. Подсчитывается информационная матрица $M(\varepsilon_1)$ плана ε_1 и обратная ей матрица $D(\varepsilon_1)$.

После того как найдена матрица $D(\varepsilon_1)$, операции 2-4 повторяются с заменой ε_0 на ε_1 , затем эти же операции повторяются с $\varepsilon_2, \varepsilon_3$ и т. д. Предложенная итерационная процедура сходится к одному из D -оптимальных планов.

Теорема 7. Пусть выполняются условия теоремы

эквивалентности, тогда итерационный процесс 1-4 сходится, причем

$$\lim_{s \rightarrow \infty} |M(\epsilon_s)| = |M(\epsilon^*)|,$$

где $M(\epsilon^*)$ — информационная матрица, соответствующая D -оптимальному плану.

Доказательство. Пусть ϵ_0 не D -оптимальный план. Тогда по теореме 6 и определению D -оптимального плана

$$|M(\epsilon_0)| < |M(\epsilon_1)| \leq \dots \leq |M(\epsilon_s)| \leq |M(\epsilon^*)| < \infty.$$

Но известно, что любая ограниченная, монотонно неубывающая последовательность сходится. Следовательно последовательность $|M(\epsilon_0)|, |M(\epsilon_1)|, \dots, |M(\epsilon_s)|$ сходится к некоторому пределу $|M(\tilde{\epsilon})|$. Для доказательства теоремы достаточно показать, что $|M(\tilde{\epsilon})| = |M(\epsilon^*)|$. Предположим противное:

$$|M(\tilde{\epsilon})| < |M(\epsilon^*)|. \quad (2.67)$$

В силу сходимости последовательности $|M(\epsilon_0)|, |M(\epsilon_1)|, \dots, |M(\epsilon_s)|$ для любого малого $\gamma > 0$ найдется такое \bar{s} , что для любого $s \geq \bar{s}$ справедливо неравенство

$$|M(\epsilon_{s+1})| - |M(\epsilon_s)| \leq \gamma$$

или согласно теореме 6

$$|M(\epsilon_s)| \left[\left(\frac{\delta_s + m}{m} \right)^m \left(\frac{m-1}{\delta_s + m - 1} \right)^{m-1} - 1 \right] \leq \gamma,$$

откуда

$$\psi(\delta_s) = \left(\frac{\delta_s + m}{m} \right)^m \left(\frac{m-1}{\delta_s + m - 1} \right)^{m-1} \leq 1 + \gamma |M(\epsilon_s)|^{-1}.$$

Функция $\psi(\delta_s)$ является возрастающей от $\delta_s > 0$, следовательно для любого $\Delta > 0$ должно существовать такое γ , что $\delta_s \leq \Delta$, т. е.

$$\lambda(x_s) d(x_s, \epsilon_s) - m = \delta_{s*} \Delta.$$

Таким образом, всегда можно заранее указать такое $\bar{s}(\Delta)$, что δ_s будет меньше наперед заданного числа Δ . Но, согласно предположению (2.67) и теореме эквивалентности 1, для любого s

$$\delta_s = \lambda(x_s)d(x_s, \varepsilon_s) - m \geq \xi > 0.$$

Выбрав $\Delta < \xi$, приходим к противоречию. Следовательно, $\tilde{\varepsilon}$ — D -оптимальный план. ■

Рассматриваемый итерационный процесс можно оканчивать, если выполняется одно из требований:

$$\begin{aligned} \alpha_s < \gamma_1, \\ \frac{|M(\varepsilon_{s+1})| - |M(\varepsilon_s)|}{|M(\varepsilon_{s+1})|} < \gamma_2; \\ m^{-1}[\max_{x \in \Omega_x} \lambda(x)d(x, \varepsilon_s) - m] < \gamma_3. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Так как информационная матрица одна и та же для всех D -оптимальных планов данной регрессионной задачи, то все левые части неравенств (2.68) однозначно связаны друг с другом. Поэтому все три правила окончания счета практически эквивалентны и выбор какого-либо из них обусловлен конкретными особенностями программы, по которой ведется счет.

V. Наиболее трудоемкими операциями в предложенной итерационной процедуре являются обращение информационной матрицы $M(\varepsilon_s)$ и поиск максимального значения величины $\lambda(x)d(x, \varepsilon_s)$ в k -мерной замкнутой области Ω_x .

Оказывается, что операцию обращения матрицы можно заменить значительно более простыми операциями.

Лемма 5.

$$(I_p + AB)^{-1} = I_p - A(I_q + BA)^{-1}B, \quad (2.69)$$

где I_p и I_q — единичные матрицы размера $p \times p$ и $q \times q$; A — матрица $p \times q$; B — матрица $q \times p$.

Доказательство. Умножив обе части (2.69) справа на матрицу $I_p + AB$, получим

$$\begin{aligned} I_p &= I_p(I_p + AB) - A(I_q + BA)^{-1}B(I_p + AB) = \\ &= I_p + AB - A(I_q + BA)^{-1}(B + BAB) = \\ &= I_p + AB - A(I_q + BA)^{-1}(I_q + BA)B = \\ &= I_p + AB - AB = I_p. \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Теорема 8. Пусть ε_{s+1} является линейной комбинацией невырожденного плана ε_s и плана $\varepsilon(x)$, сосредоточенного в одной точке x : $\varepsilon_{s+1} = (1 - \alpha)\varepsilon_s + \alpha\varepsilon(x)$. Тогда:

1. Дисперсионная матрица $D(\varepsilon_{s+1})$ плана ε_{s+1} связана с дисперсионной матрицей $D(\varepsilon_s)$ плана ε_s соотношением

$$D(\varepsilon_{s+1}) = (1-\alpha)^{-1} \left[I_m - \frac{\alpha \lambda(x) D(\varepsilon_s) f(x) f^T(x)}{1-\alpha + \alpha \lambda(x) d(x, \varepsilon_s)} \right] D(\varepsilon_s). \quad (2.70)$$

2. Дисперсия оценки поверхности отклика в точке \tilde{x} для плана ε_{s+1} выражается через дисперсию оценки поверхности отклика в той же точке для плана ε_s следующим образом:

$$d(\tilde{x}, \varepsilon_{s+1}) = (1-\alpha)^{-1} \left[d(\tilde{x}, \varepsilon_s) - \frac{\alpha \lambda(x) d^2(x, \tilde{x}, \varepsilon_s)}{1-\alpha + \alpha \lambda(x) d(x, \varepsilon_s)} \right]. \quad (2.71)$$

Доказательство. 1. Согласно определению

$$\begin{aligned} M(\varepsilon_{s+1}) &= (1-\alpha)M(\varepsilon_s) + \alpha M(\varepsilon(x)) = \\ &= (1-\alpha)M(\varepsilon_s) \left[I_m + \frac{\alpha}{1-\alpha} M^{-1}(\varepsilon_s) M(\varepsilon(x)) \right] \end{aligned}$$

или

$$M^{-1}(\varepsilon_{s+1}) = (1-\alpha)^{-1} \left[I_m + \frac{\alpha}{1-\alpha} M^{-1}(\varepsilon_s) M(\varepsilon(x)) \right]^{-1} M^{-1}(\varepsilon_s).$$

Учитывая, что $D(\varepsilon_s) = M^{-1}(\varepsilon_s)$ и $M(\varepsilon(x)) = \lambda(x) f(x) f^T(x)$, перепишем данное выражение в виде

$$D(\varepsilon_{s+1}) = (1-\alpha)^{-1} \left[I_m + \frac{\alpha \lambda(x)}{1-\alpha} D(\varepsilon_s) f(x) f^T(x) \right]^{-1} D(\varepsilon_s). \quad (2.72)$$

Положим

$$\frac{\alpha \lambda(x)}{1-\alpha} D(\varepsilon_s) f(x) = A \text{ и } f^T(x) = B$$

и воспользуемся леммой 5

$$\begin{aligned} & \left[I_m + \frac{\alpha \lambda(x)}{1-\alpha} D(\varepsilon_s) f(x) f^T(x) \right]^{-1} = \\ &= I_m - \frac{\alpha \lambda(x)}{1-\alpha} D(\varepsilon_s) f(x) \left[1 + f^T(x) \frac{\alpha \lambda(x)}{1-\alpha} D(\varepsilon_s) f(x) \right]^{-1} f^T(x). \end{aligned} \quad (2.73)$$

Так как $f^T(x)D(\varepsilon_s)f(x) = d(x, \varepsilon_s)$ и, следовательно, выражение в скобках в правой части (2.73) есть скалярная величина, то

$$\left[I_m + \frac{\sigma \lambda(x)}{1-\alpha} D(\varepsilon_s) f(x) f^T(x) \right]^{-1} = I_m - \frac{\alpha \lambda(x) D(\varepsilon_s) f(x) f^T(x)}{1-\alpha + \alpha \lambda(x) d(x, \varepsilon_s)}.$$

Отсюда и из (2.72) следует справедливость равенства (2.70).

2. Умножим (2.70) слева и справа соответственно на $f^T(\tilde{x})$ и $f(\tilde{x})$

$$\left. \begin{aligned} f^T(\tilde{x})D(\varepsilon_{s+1})f(\tilde{x}) &= (1-\sigma)^{-1} [f^T(\tilde{x})D(\varepsilon_s)f(\tilde{x}) - \\ & - \frac{\alpha \lambda(x) f^T(\tilde{x})D(\varepsilon_s)f(x) f^T(x)D(\varepsilon_s)f(\tilde{x})}{1-\alpha + \alpha \lambda(x) d(x, \varepsilon_s)}] \end{aligned} \right\} (2.74)$$

Воспользовавшись тем, что $d(x, \tilde{x}, \varepsilon_s) = f^T(\tilde{x})D(\varepsilon_s)f(x) = f^T(x)D(\varepsilon_s)f(\tilde{x})$, нетрудно представить (2.74) в виде (2.71). ■

Заметим, что величина $d(x, \tilde{x}, \varepsilon_s)$ есть ковариация оценок поверхности отклика в точках x и \tilde{x} соответственно

$$\begin{aligned} \text{cov}[\hat{\eta}(x), \hat{\eta}(\tilde{x})] &= \text{cov}[f^T(x)\Theta, f^T(\tilde{x})\Theta] = \\ &= E[f^T(x)(\Theta - \hat{\Theta})(\Theta - \hat{\Theta})^T f(\tilde{x})] = f^T(x)E[(\hat{\Theta} - \Theta)(\hat{\Theta} - \\ & - \Theta)^T] f(\tilde{x}) = f^T(x)D(\varepsilon) f(\tilde{x}) = d(x, \tilde{x}, \varepsilon). \end{aligned}$$

Формулы (2.70) и (2.71) позволяют избежать обращения информационных матриц $M(\varepsilon_s)$ за исключением нулевой итерации. При большом числе неизвестных параметров это существенно сокращает объем вычислений. В то же время точность определения элементов дисперсионной матрицы и дисперсии оценки поверхности отклика повышается. Повышение точности объясняется тем, что операции умножения, необходимые при обращении матрицы, заменяются операциями сложения. Таким образом, первый и второй этапы каждой итерации рекомендуется проводить с использованием соответственно формул (2.70) и (2.71).

На втором этапе каждой итерации необходимо

найти положение максимума функции $\lambda(x)d(x, \varepsilon_s)$. Из (2.62) нетрудно видеть, что $(s+1)$ -я итерация будет наиболее эффективна, если удастся найти положение абсолютного максимума функции $\lambda(x)d(x, \varepsilon_s)$. Данная функция, как правило, имеет не менее m локальных максимумов. К сожалению, большинство стандартных программ построено таким образом, что они отыскивают лишь локальные максимумы исследуемой функции.

Задача поиска абсолютного максимума, особенно при больших размерностях пространства контролируемых переменных, требует усложнения существующих программ и ведет к значительному увеличению времени счета. Поэтому в большинстве случаев итерационная процедура требует в сумме меньше времени (несмотря на сравнительно малую эффективность каждой итерации), если на каждой итерации ограничиваться первым попавшимся локальным максимумом, для которого

$$\lambda(x_s) d(x_s, \varepsilon_s) > m.$$

VI. Для полного описания D -оптимального плана нужна его дисперсионная матрица (или информационная матрица) и непосредственно сам план

$$\varepsilon^* = \left\{ \begin{array}{l} x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^* \\ p_1^*, p_2^*, \dots, p_n^* \end{array} \right\}.$$

При численном построении ε^* мы получим, вообще говоря, план ε_s , который может быть сколь угодно близок к ε^* , но все же отличаться от него (мы можем сделать большое, но конечное число итераций). Это отличие будет заключаться в том, что

$$1. (x_i^* - x_{st})^T (x_i^* - x_{st}) = \xi_i,$$

где ξ_i — некоторые малые положительные числа.

$$2. |p_i^* - p_{st}| = \pi_i,$$

где π_i — малые положительные числа.

3. План ε_s по сравнению с планом ε^* имеет „посторонние“ точки

$$x_{s(n+1)}, x_{s(n+2)}, \dots, x_{s(n+j)}$$

с малыми весами

$$\gamma \gg p_{s(n+1)} \gg p_{s(n+2)} \gg \dots \gg p_{s(n+j)}.$$

4. Вместо одной точки x_{sl} , близкой к x_l^* , план ϵ_s имеет набор точек $x_{sl_1}, x_{sl_2}, \dots, x_{sl_l}$, каждая из которых близка к x_l^* :

$$(x_l^* - x_{sl_k})^T (x_l^* - x_{sl_k}) \leq \xi_l, (k=1, l) \quad (2.75)$$

и их суммарный вес близок к p_i^*

$$\left| \sum_{k=1}^l p_{sl_k} - p_i^* \right| = \tau_i.$$

Так как планы с большим числом точек нежелательны, то вместо плана ϵ_s обычно удобнее рассматривать некоторое его приближение, а именно:

1) точки с малыми весами, не тяготеющие ни к одной из групп (2.75), выбрасываются;

2) точки, тяготеющие к одной из групп (2.75), объединяются по правилу

$$x_{sl} = \frac{1}{p_{sl}} \sum_{k=1}^l x_{sl_k} p_{sl_k}, \quad p_{sl} = \sum_{k=1}^l p_{sl_k}. \quad (2.76)$$

Составленный план проверяется на „близость“ к D -оптимальному плану. Если план „близок“ к оптимальному, например, выполняется (2.68), то вычисления прекращаются. Если нет, то итерационный процесс продолжается. Эта процедура округления плана является вполне оправданной. Дело в том, что точки с малыми весами, а также некоторый разброс точек вблизи точек D -оптимального плана, — наследие от неоптимального плана ϵ_0 , которое, как правило, ликвидируется округлением плана ϵ_s .

§ 7. Округление непрерывных D -оптимальных планов

До сих пор мы рассматривали методы построения непрерывных D -оптимальных планов. Эти планы можно считать приближенными по отношению к дискретным планам $\epsilon(N)$. Теперь обсудим зависимость точности приближения дискретных планов непрерывными от возможного числа измерений. Для тех случаев, когда эта точность не может считаться удовлетворительной, даются некоторые рекомендации по построению точных оптимальных планов. Под точными оптимальными планами

подразумеваются планы, оптимальные при заданном N .

Пусть нормированный план ε_1 лучше нормированного плана ε_2 , если

$$L[M(\varepsilon_1)] > L[M(\varepsilon_2)], \quad (2.77)$$

где функционал L удовлетворяет условиям:

$$\begin{aligned} L(A+B) &\geq L(A); \\ L(kA) &= kL(A), \end{aligned} \quad (2.78)$$

где A и B — положительно полуопределенные матрицы. Предположим, что ε^* — непрерывный нормированный план, максимизирующий $L[M(\varepsilon)]$ на множестве непрерывных планов, а $\varepsilon^*(N)$ — нормированный точный план, максимизирующий $L[M(\varepsilon(N))]$ на множестве дискретных нормированных планов, и пусть $M(\varepsilon^*)$ и $M(\varepsilon^*(N))$ — их информационные матрицы. Так как $\max_{\varepsilon(N)} L[M(\varepsilon(N))]$ ищется на более узком множестве, чем $\max_{\varepsilon} L[M(\varepsilon)]$, то очевидно, что

$$\max_{\varepsilon(N)} L[M(\varepsilon(N))] = L[M(\varepsilon^*(N))] < L[M(\varepsilon^*)] = \max_{\varepsilon} L[M(\varepsilon)]. \quad (2.79)$$

Между обеими указанными выше величинами $L[M(\varepsilon^*(N))]$ и $L[M(\varepsilon^*)]$ можно найти связь, которая оказывается весьма полезной при построении точных планов.

Теорема 9. Если суммарное число возможных измерений есть N , а n — число точек в спектре плана ε^* , то

$$\frac{N-n}{N} L[M(\varepsilon^*)] \leq L[M(\varepsilon^*(N))] \leq L[M(\varepsilon^*)]. \quad (2.80)$$

Доказательство. Пусть $[c]^+$ означает наименьшее целое число, удовлетворяющее неравенству $[c]^+ \geq c$. Тогда в силу (2.78) можно записать

$$\begin{aligned} &L \left[\sum_{i=1}^n [N p_i]^+ f(x_i^*) f^T(x_i^*) \right] \\ &\geq L \left[\sum_{i=1}^n N p_i f(x_i^*) f^T(x_i^*) \right] = N L[M(\varepsilon^*)]. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Пусть $N_1 > N_2$. Рассмотрим эксперимент из N_1 измерений, в котором N_2 измерения проводятся по плану

$\varepsilon^*(N_2)$, а $(N_1 - N_2)$ — по любому плану $\varepsilon(N_1 - N_2)$. Согласно (2.78)

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[N_2 M(\varepsilon^*(N_2)) + (N_1 - N_2) M(\varepsilon(N_1 - N_2))] &\geq \\ &\geq \mathcal{L}[N_2 M(\varepsilon^*(N_2))]. \end{aligned}$$

Отсюда и из определения плана $\varepsilon^*(N_1)$ следует

$$\mathcal{L}[N_1 M(\varepsilon^*(N_1))] \geq \mathcal{L}[N_2 M(\varepsilon^*(N_2))].$$

Учитывая, что $\sum_{i=1}^n [N p_i^*]^+ \leq N + n$ и подразумевая под N_1 величину $N + n$, а под N_2 — величину $\sum_{i=1}^n [N p_i^*]^+$, запишем $(N + n) \mathcal{L}[M(\varepsilon^*(N + n))] \geq$

$$\geq \mathcal{L}\left[\sum_{i=1}^n [N p_i^*]^+ f(x_i^*) f^T(x_i^*)\right] \geq N \mathcal{L}[M(\varepsilon^*)] \quad (2.82)$$

или с учетом (2.79)

$$(N + n) \mathcal{L}[M(\varepsilon^*)] \geq (N + n) \mathcal{L}[M(\varepsilon^*(N + n))] > N \mathcal{L}[M(\varepsilon^*)]. \quad (2.83)$$

Из (2.83) следует

$$\mathcal{L}[M(\varepsilon^*)] \geq \mathcal{L}[M(\varepsilon^*(N + n))] \geq \frac{N}{N + n} \mathcal{L}[M(\varepsilon^*)]. \quad (2.84)$$

Заменяя величину $N + n$ на N в (2.84), легко убедиться в справедливости доказываемой теоремы.

Структура доказательства легко прослеживается если вместо разрозненных неравенств записать следующую единую цепочку неравенств с учетом того, что

$$N_1 = N + n, \quad N_2 = \sum_{i=1}^n [N p_i^*]^+, \quad N_1 > N_2,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[(N + n) M(\varepsilon^*)] &= \mathcal{L}[N_1 M(\varepsilon^*)] \geq \mathcal{L}[N_1 M(\varepsilon^*(N_1))] \geq \\ &\geq \mathcal{L}[N_2 M(\varepsilon^*(N_2)) + (N_1 - N_2) M(\varepsilon(N_1 - N_2))] \geq \\ &\geq \mathcal{L}[N_2 M(\varepsilon^*(N_2))] \quad \mathcal{L}\left[\sum_{i=1}^n [N p_i^*]^+ f(x_i^*) f^T(x_i^*)\right] \geq \\ &\geq \mathcal{L}\left[\sum_{i=1}^n N p_i^* f(x_i^*) f^T(x_i^*)\right] = N \mathcal{L}[M(\varepsilon^*)]. \end{aligned}$$

Первое, третье и последнее выражения в системе не-

равенств с заменой $N + n$ на N дают доказательство теоремы. ■

Знак равенства в (2.81) имеет место тогда и только тогда, когда все $Np_i^*(i=\overline{1, n})$ — целые числа хотя бы для одного оптимального плана ϵ^* . В этом случае ϵ^* и $\epsilon^*(N)$ совпадают. В иных случаях $L[M(\epsilon^*(N))] < L[M(\epsilon^*)]$.

Как уже отмечалось ранее, построение точных оптимальных планов $\epsilon^*(N)$ — задача значительно более трудоемкая, чем отыскание ϵ^* . К тому же для каждого N необходимо, вообще говоря, искать свое решение. Поэтому выгодно найти процедуру исправления непрерывного плана ϵ^* на близкий ему дискретный $\epsilon^*(N)$, который бы по значению $L[M(\epsilon^*(N))]$ мало отличался от плана ϵ^* .

В качестве одной из возможных является следующая процедура. Строится план $\tilde{\epsilon}(N)$ с размещением затрат $p_i \sim [(N-n)p_i^*]^+(i=\overline{1, n})$. Для этого плана $\sum_{i=1}^n [(N-n)p_i^*]^+ < N$, поэтому оставшиеся „неиспользо-

ванные“ средства $N - \sum_{i=1}^n [(N-n)p_i^*]^+$ можно, например, добавить по одному в точки, где

$$(N-n)p_j^* > [(N-n)p_j^*]^+ - \frac{1}{2}.$$

Остаток $N - \sum_{i=1}^n [(N-n)p_i^*]^+$ можно распределить и между другими точками $x \in \Omega_x$. Построенный план обозначим через $\tilde{\epsilon}(N)$.

Следствие. Точный оптимальный план $\epsilon^*(N)$ и план $\tilde{\epsilon}(N)$, полученный округлением непрерывного оптимального плана, связаны между собой неравенством

$$L[M(\epsilon^*(N))] - L[M(\tilde{\epsilon}(N))] \leq \frac{n}{N} L[M(\epsilon^*)]. \quad (2.85)$$

Неравенство (2.85) можно получить, если учесть, что

$$NL[M(\tilde{\epsilon}(N))] \geq L \left[\sum_{i=1}^n [(N-n)p_i^*]^+ f(x_i) f^T(x_i) \right]$$

$$\geq \mathcal{L} \left[\sum_{i=1}^n (N-n) p_i^* f(x_i^*) f^T(x_i^*) \right] = (N-n) \mathcal{L} [M(\epsilon^*)],$$

откуда

$$\mathcal{L} [M(\tilde{\epsilon}(N))] \geq \frac{N-n}{N} \mathcal{L} [M(\epsilon^*)]. \quad (2.86)$$

Меняя знаки в обеих частях неравенства (2.86) на обратные и прибавляя затем $\mathcal{L} [M(\epsilon^*(N))]$, получим

$$\begin{aligned} \mathcal{L} [M(\epsilon^*(N))] - \mathcal{L} [M(\tilde{\epsilon}(N))] &\leq \frac{n}{N} \mathcal{L} [M(\epsilon^*)] + \\ + \mathcal{L} [M(\epsilon^*(N))] - \mathcal{L} [M(\epsilon^*)] &\leq \frac{n}{N} \mathcal{L} [M(\epsilon^*)]. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Последнее неравенство в цепочке (2.87) следует из того, что

$$\mathcal{L} [M(\epsilon^*)] \geq \mathcal{L} [M(\epsilon^*(N))].$$

Из (2.87) непосредственно следует (2.85). ■

Если для данной задачи существует несколько непрерывных оптимальных планов, то неравенство (2.85) говорит о том, что выгоднее всего, исключая те редкие случаи, когда $\epsilon(N)$ и какой-либо непрерывный оптимальный план совпадают (т. е. числа p_i r_i ($i=1, n$), являются целыми), округлять до дискретного тот план ϵ^* , спектр которого содержит наименьшее число точек.

Проверим, удовлетворяет ли критерий D -оптимальности требованиям (2.77) и (2.78). Пусть план ϵ_1 предпочтительнее ϵ_2 , если

$$|M(\epsilon_1)| > |M(\epsilon_2)|.$$

Непосредственно операция взятия определителя требованиям (2.77) и (2.78) не удовлетворяет. Однако данный критерий сравнения можно заменить на эквивалентный ему

$$|M(\epsilon_1)|^{1/m} > |M(\epsilon_2)|^{1/m}, \quad (2.88)$$

где m —число неизвестных параметров. Способ сравнения (2.88) уже удовлетворяет требованиям (2.77) и (2.78). Из (2.88) и (2.80) нетрудно получить, что D -оптимальные планы—точные и непрерывные—связаны соотношением

$$\left(\frac{N-n}{N}\right)^m |M(\varepsilon^*)| \leq |M(\varepsilon^*(N))| \leq |M(\varepsilon^*)|.$$

Можно показать, что и для остальных критериев сравнения планов требования (2.77) и (2.78) удовлетворяются.

§ 8. Численный метод построения точных D -оптимальных планов

I. Во многих исследованиях число измерений стремятся свести к минимуму, и поиск точных оптимальных планов становится необходимым. При построении точных D -оптимальных планов удобнее оперировать с ненормированными дискретными планами, которые в отличие от нормированных обозначаются $E(N)$. Напомним, что

$$M(E(N)) = NM(\varepsilon(N)).$$

Пусть имеется план $\varepsilon(N)$ со спектром x_1, x_2, \dots, x_n , и пусть часть измерений из точек $x_{j_1}, x_{j_2}, \dots, x_{j_l}$, принадлежащих этому спектру, перенесена в произвольные точки $\tilde{x}_k (k = \bar{1}, l)$.

Обозначим новый план через $\tilde{\varepsilon}(N)$.

Лемма 6. Пусть $M(\varepsilon(N))$ — информационная матрица плана $\varepsilon(N)$, тогда определитель информационной матрицы плана $\tilde{\varepsilon}(N)$ равен

$$|M(\tilde{\varepsilon}(N))| = |M(\varepsilon(N))| \cdot |I_l + F^T M^{-1}(\varepsilon(N)) F|, \quad (2.89)$$

где

$$F = [i\lambda^{1/2}(x_{j_1})f(x_{j_1}), \lambda^{1/2}(\tilde{x}_1)f(\tilde{x}_1), \dots, \\ \dots, i\lambda^{1/2}(x_{j_l})f(x_{j_l}), \lambda^{1/2}(\tilde{x}_l)f(\tilde{x}_l)], \quad i = \sqrt{-1}.$$

Доказательство. По определению

$$M(\tilde{\varepsilon}(N)) = M(\varepsilon(N)) - \sum_{k=1}^l \lambda(x_{j_k}) f(x_{j_k}) f^T(x_{j_k}) + \\ + \sum_{k=1}^l \lambda(x_k) f(x_k) f^T(x_k).$$

Это выражение можно переписать в виде

$$M(\tilde{\varepsilon}(N)) = M(\varepsilon(N)) + FF^T.$$

Применив к последнему равенству лемму 4, получим необходимый результат. ■

Полезно отметить, что из положительной полуопределенности информационных матриц $M(\tilde{\varepsilon}(N))$ и $M(\varepsilon(N))$ и равенства (2.89) следует, что величина $|I + F^T M^{-1}(\varepsilon(N)) F|$ не меньше нуля, причем равенство нулю имеет место лишь при $|M(\tilde{\varepsilon}(N))| = 0$.

Теперь сформулируем и докажем теорему, которая позволяет получить достаточно простой численный метод построения точных D -оптимальных планов.

Теорема 10. В точках x_j^* ($j = \overline{1, n}$) спектра точного D -оптимального плана $\varepsilon^*(N)$

$$\begin{aligned} \lambda(x_j^*) d(x_j^*) &\geq \lambda(x) d(x) - \lambda(x) \lambda(x_j^*) \times \\ &\times [d(x_j^*) d(x) - d^2(x_j^*, x)], \end{aligned} \quad (2.90)$$

где

$$d(x) = d(x, \varepsilon^*(N)) = f^T(x) D(\varepsilon^*(N)) f(x)$$

и

$$x \in \Omega_x, d(x, \bar{x}) = d(x, \bar{x}, \varepsilon^*(N)) = f^T(x) D(\varepsilon^*(N)) f(\bar{x}).$$

Доказательство. Пусть x — некоторая точка, принадлежащая области Ω_x , где возможны измерения. Предположим, что в эту точку из точки x_j^* , принадлежащей спектру точного D -оптимального плана, перенесено одно измерение. Воспользуемся результатами леммы 6. Введем матрицу

$$F = [i \lambda^{1/2}(x_j^*) f(x_j^*), \lambda^{1/2}(x) f(\hat{x})].$$

Согласно (2.89) определитель информационной матрицы нового плана $\varepsilon(N)$ будет равен

$$|M(\varepsilon(N))| = |M(\varepsilon^*(N))| |I + F^T M^{-1}(\varepsilon^*(N)) F|. \quad (2.91)$$

Так как по определению

$$|M(\varepsilon(N))| \leq |M(\varepsilon^*(N))|,$$

то из (2.91) следует

$$|I + F^T M^{-1}(\varepsilon^*(N)) F| \leq 1. \quad (2.92)$$

Так как (см. пояснения к (2.89))

$$F^T M^{-1}(\varepsilon^*(N))F = F^T D(\varepsilon^*(N))F = \begin{bmatrix} -\lambda(x_j^*)d(x_j^*) & i\lambda^{1/2}(x_j^*)\lambda^{1/2}(x)d(x_j^*, x) \\ i\lambda^{1/2}(x_j)\lambda^{1/2}(x)d(x_j^*, x) & \lambda(x)d(x) \end{bmatrix},$$

то с учетом (2.92)

$$|I + F^T M^{-1}(\varepsilon^*(N))F| = 1 - \lambda(x_j^*)d(x_j^*) - \lambda(x)d(x) - \\ - \lambda(x)\lambda(x_j^*)[d(x_j^*)d(x) - d^2(x_j^*, x)] \leq 1.$$

Из последнего неравенства непосредственно вытекает (2.90). ■

Второе слагаемое в (2.90) всегда не меньше нуля. В этом легко убедиться, если учесть, что $d(x_j^*, x)$ есть ковариация двух случайных величин $\hat{\eta}(x_j^*, \Theta)$ и $\hat{\eta}(x, \Theta)$, а $d(x_j^*)$ и $d(x)$ — дисперсии этих же величин, а величина

$$d(x_j^*)d(x) - d^2(x_j^*, x)$$

есть определитель матрицы ковариаций случайных величин $\hat{\eta}(x_j^*, \Theta)$ и $\hat{\eta}(x, \Theta)$. Так как матрица ковариаций положительно полуопределена, то

$$d(x_j^*)d(x) - d^2(x_j^*, x) \geq 0.$$

Таким образом, в точках точного D -оптимального плана поверхность $\lambda(x)d(x)$ не обязательно достигает своего максимального значения, как это было в непрерывных D -оптимальных планах. Теорема 10 удобна для проверки планов на D -оптимальность. Обратим внимание на то, что условие (2.90) является необходимым, но не достаточным.

Устремляя число возможных измерений к бесконечности (т. е. переходя к непрерывным планам), легко убедиться, что (2.90) с точностью до членов $O(N^{-1})$ переходит в неравенство

$$\lambda(x_j)d(x_j, \varepsilon^*) \geq \lambda(x)d(x, \varepsilon^*), \quad x \in \Omega_x.$$

Отсюда также следует, что

$$\lambda(x_j)d(x_j, \varepsilon^*) = \lambda(x_k)d(x_k, \varepsilon^*),$$

где x_j и x_k — различные точки спектра плана ε^* .

Последние два соотношения находятся в полном соответствии с теоремой эквивалентности.

II. Опираясь на теорему 10, можно построить итерационную процедуру отыскания точных D -оптимальных планов. Пусть есть план $\varepsilon_0(N)$, для точек спектра которого не выполняется неравенство (2.90). Предположим, что неравенство не выполняется для точки x_i на некотором множестве точек $x \in \Omega_x$. Перенесение одного измерения из точки x_i в точку x приведет к увеличению определителя информационной матрицы

$$|M(\varepsilon(N))| = |M(\varepsilon_0(N))| \cdot [1 + \Delta_0(x_i, x)],$$

если $\Delta_0(x_i, x) > 0$.

Здесь

$$\begin{aligned} \Delta_s(x_i, x) &= \lambda(x)d_s(x) - \lambda(x)\lambda(x_i)[d_s(x)d_s(x_i) - \\ &\quad - d_s^2(x, x_i)] - \lambda(x_i)d_s(x_i), \\ d_s(x) &= d(x, \varepsilon_s(N)), \quad d_s(x, x_i) = d(x, x_i, \varepsilon_s(N)), \\ &\quad s=0, 1, \dots \end{aligned}$$

Чтобы увеличение определителя информационной матрицы при заданном x_i было на данном шаге максимальным, измерение следует переносить в точку $x = x^0$, где $\Delta_0(x_i, x)$ достигает своего максимального значения. Прирост определителя можно увеличить, если провести дополнительную максимизацию по $x_i (i = \overline{1, n})$.

Для полученного плана $\varepsilon_s(N)$, $s=1$ отыскивается

$$\max_i \max_x \Delta_s(x_i, x), \quad (i = \overline{1, n}).$$

Если $\max_i \max_x \Delta_s(x_i, x) > 0$

и максимальное значение $\Delta_s(x_i, x)$ достигается при $i = j_s$ в точке x^s , то из точки x_{j_s} в точку x^s переносится одно измерение.

Данная процедура продолжается до тех пор, пока не будет иметь место соотношение

$$\max_i \max_x \Delta_s(x_i, x) \leq \delta,$$

где δ — некоторое малое, наперед заданное положительное число.

Так как

$$|M(\varepsilon_0(N))| \leq |M(\varepsilon_1(N))| \leq \dots \leq |M(\varepsilon_s(N))| \leq \dots \\ \dots \leq |M(\varepsilon^*(N))|,$$

то сходимость последовательности следует из существования верхней границы.

Основное неприятное отличие предложенной процедуры от аналогичной процедуры по построению непрерывных D -оптимальных планов состоит в том, что план, к которому сходится последовательность $\{\varepsilon_s(N)\}$, в некоторых случаях может отличаться от оптимального плана

$$\lim_{s \rightarrow \infty} |M(\varepsilon_s(N))| = |M(\tilde{\varepsilon}(N))| \leq |M(\varepsilon^*(N))|.$$

В связи с этим рекомендуется проводить итерационную процедуру несколько раз, начиная с различных $\varepsilon_0(N)$. Если определители информационных матриц для всех случаев совпадают, то планы $\tilde{\varepsilon}(N)$, к которым сходятся соответствующие последовательности планов $\{\varepsilon_s(N)\}$, с большой вероятностью будут совпадать с точными оптимальными планами. Если итерационные процедуры сходятся к различным планам $\varepsilon(N, j) (j=1, \overline{q})$, для которых определители информационных матриц различны, то рекомендуется продолжать попытки поиска оптимального плана до тех пор, пока не удастся выделить группу планов, у которых определители информационных матриц равны между собой и превышают все остальные.

Для проверки того, является ли план $\varepsilon(N)$ D -оптимальным, рекомендуется также использовать соотношения (2.80), (2.85).

§ 9. Последовательные D -оптимальные планы

До сих пор рассматривались статические методы планирования экспериментов, когда строили план, который указывал распределение всех затрат, отведенных для данных исследований. Однако существуют ситуации, когда такое планирование не приносит желаемых результатов. Например, условия проведения эксперимента выясняются в процессе экспериментирования. В подобных случаях можно обратиться к так называемым методам

последовательного планирования экспериментов по определению и уточнению искомых параметров.

Идея последовательного планирования заключается в следующем. Отведенные затраты (например, время) делятся на небольшие порции. Эксперимент разбивается на несколько этапов и на каждом этапе ведется планирование, опирающееся на одну порцию затрат. После каждого этапа проводится анализ эксперимента.

На схеме весь процесс эксперимента будет иметь вид
 \rightarrow эксперимент \rightarrow анализ \rightarrow планирование \rightarrow эксперимент \rightarrow

Блок «анализ» подразумевает не только обычный регрессионный анализ экспериментальных данных, но и анализ сведений, поступающих извне. Эксперимент прекращается, как только заданная характеристика точности оценки группы параметров (например, определитель дисперсионной матрицы оценок нескольких искомых параметров $|D(\hat{\Theta})|$, сумма ее диагональных элементов и т. д.) достигнет необходимого значения.

Рассмотрим последовательные D -оптимальные планы. При этом нам будет удобнее использовать ненормированные планы. Считаем, что план $\varepsilon_1(T)$ предпочтительнее $\varepsilon_2(T)$, если для одних и тех же затрат

$$|M(\varepsilon_1(T))| > |M(\varepsilon_2(T))|, \quad (2.93)$$

где T — затраты, отведенные на данный эксперимент; $M(\varepsilon(T))$ — информационная матрица оценок искомых параметров. Будем предполагать, что стоимость каждого измерения не зависит от того, когда и где (в факторном пространстве) проводится это измерение. Тогда $T = cN$, где c — стоимость одного измерения, N — число измерений, отведенное для данного эксперимента, и (2.93) можно переписать в виде

$$|M(\varepsilon_1(N))| > |M(\varepsilon_2(N))|. \quad (2.94)$$

Изучим свойства экспериментов, которые проводятся следующим образом.

1. В каждый заданный момент времени (который мы будем характеризовать числом измерений N) измерение проводится в той точке, где возможное увеличение определителя

$$|M(N+1)| = |M(\varepsilon(N+1))|$$

максимально.

2. После каждого измерения проводится анализ полученных данных. Затем повторяется операция 1 и т. д.

Выведем формулы, которые бы облегчили вычислительные процедуры при предложенном последовательном методе планирования и выясним, насколько эффективно такое планирование.

Лемма 7.

$$|M(N + \Delta N, x)| = |M(N)| (1 + \lambda(x) \Delta N d(x, N)), \quad (2.95)$$

где $d(x, N) = f^T(x) M^{-1}(N) f(x)$ — дисперсия оценки поверхности отклика в точке x после N измерений.

Доказательство. По определению

$$M(N + \Delta N, x) = M(N) + \lambda(x) \Delta N f(x) f^T(x). \quad (2.96)$$

Полагая $M = M(N)$, $F = \sqrt{\lambda(x) \Delta N} f(x)$, из леммы 4 получим выражение (2.95). ■

Из леммы 7 следует, что максимальное увеличение определителя информационной матрицы возможно в точке x_N , удовлетворяющей уравнению:

$$\lambda(x_N) d(x_N, N) = \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, N). \quad (2.97)$$

Уравнение (2.97) имеет один и тот же вид для любого ΔN . Следовательно, положение точки x_N , в которой необходимо производить ΔN измерений, не зависит от значения ΔN . Положение этой точки не меняется также и при умножении функций эффективности $\lambda(x)$ на любой постоянный множитель. Этот факт крайне важен при практическом использовании (2.97), так как во многих случаях $\lambda(x)$ известна с точностью до постоянного множителя.

Отметим еще одно интересное свойство, вытекающее из (2.97). Уравнение (2.97) указывает на то, что в каждый момент времени измерение должно проводиться в точке, где дисперсия оценки поверхности отклика максимальна. Иными словами, экспериментатор может получить наибольшую информацию об изучаемой поверхности от измерений в тех точках, где о ней меньше всего известно. В выражении (2.97) имеется трудоемкая операция обращения информационной матрицы

$M(N)$. Эту трудность можно обойти с помощью следующей леммы.

Лемма 8.

$$1. D(N+\Delta N, x) = \left[I_m - \frac{\lambda(x)\Delta N D(N) f(x) f^T(x)}{1 + \lambda(x)\Delta N d(x, N)} \right] D(N), \quad (2.98)$$

где $D(N) = M^{-1}(N)$ — дисперсионная матрица оценок искоемых параметров после N измерений.

$$2. d(\bar{x}, N+\Delta N) = d(\bar{x}, N) - \frac{\lambda(x)\Delta N d^2(x, \bar{x}, N)}{1 + \lambda(x)\Delta N d(x, N)}, \quad (2.99)$$

где $d(x, \bar{x}, N) = f^T(\bar{x})D(N)f(x)$ — ковариация оценок поверхности отклика в точках x и \bar{x} .

Доказательство 1. Из (2.96) получаем

$$\begin{aligned} M^{-1}(N+\Delta N, x) &= D(N+\Delta N, x) = \\ &= [I_m + \lambda(x)\Delta N M^{-1}(N) f(x) f^T(x)]^{-1} M^{-1}(N) = \\ &= [I_m + \lambda(x)\Delta N D(N) f(x) f^T(x)]^{-1} D(N). \end{aligned} \quad (2.100)$$

Положив $A = \lambda(x)\Delta N D(N) f(x)$ и $B = f^T(x)$ из (2.100) и леммы 5.1, мы убедимся в справедливости (2.98).

2. Умножим (2.98) слева на $f^T(\bar{x})$, а справа на $f(\bar{x})$. Тогда после соответствующих переобозначений получаем (2.99). ■

Результаты лемм 7 и 8 позволяют производить операции вычисления определителя и обращения матрицы единственный раз перед началом последовательной процедуры экспериментирования.

Последовательное планирование, опирающееся на систему (2.97), (2.98), дает максимальный прирост информации (в смысле увеличения величины определителя $|M|$) на каждом отдельном шаге. Но это не означает, что вся стратегия эксперимента является оптимальной в целом.

Рассмотрим случай, когда $\lambda(x)$ не меняется во времени. В этом случае существует статический D -оптимальный непрерывный план ε^* . Обозначим дисперсионную матрицу оценок параметров $\Theta_1, \dots, \Theta_k$, соответствующую нормированному D -оптимальному плану, через $D(\varepsilon^*)$.

Очевидно, что для любого плана $\epsilon(N)$ должно выполняться неравенство

$$N^{-m} |D(\epsilon^*)| \leq |D(N)|. \quad (2.101)$$

Исходя из (2.101), мы будем считать стратегию последовательного планирования тем лучше, чем меньше разница между $N^{-m} |D(\epsilon^*)|$ и $|D(N)|$, где под $D(N)$ подразумевается дисперсионная матрица, соответствующая последовательному плану $\epsilon(N)$.

Справедлива следующая теорема.

Теорема 11. Последовательное планирование, проводимое по стратегии, предложенной выше, является асимптотически (при $N \rightarrow \infty$) D -оптимальным

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N^m |D(N)| = |D(\epsilon^*)|.$$

Доказательство. Перейдем к нормированным планам. Тогда при $\Delta N = 1$ система (2.97), (2.98) примет вид

$$\begin{aligned} \lambda(x_N) d(x_N, \epsilon(N)) &= \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \epsilon(N)); & (2.102) \\ (N+1)^{-1} D(\epsilon(N+1)) &= \\ &= \left[I_m - \frac{N^{-1} \lambda(x_N) D(\epsilon(N)) f(x_N) f^T(x_N)}{1 + N^{-1} \lambda(x_N) d(x_N, \epsilon(N))} \right] N^{-1} D(\epsilon(N)), \end{aligned}$$

где $\epsilon(N)$ — нормированный план, соответствующий плану $E(N)$. Положив $\alpha_N = (N+1)^{-1}$, систему (2.102) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \lambda(x_N) d(x_N, \epsilon(N)) &= \max_{x \in \Omega_x} \lambda(x) d(x, \epsilon(N)); & (2.103) \\ D(\epsilon(N+1)) &= (1 - \alpha_N)^{-1} \left[I_m - \right. \\ & \left. - \frac{\alpha_N \lambda(x_N) D(\epsilon(N)) f(x_N) f^T(x_N)}{1 - \alpha_N + \alpha_N \lambda(x_N) d(x_N, \epsilon(N))} \right]. \end{aligned}$$

Сравнивая систему (2.103) с итерационной процедурой построения D -оптимальных планов из § 6, нетрудно убедиться в совпадении нормированных планов, соответствующих планам $E(N)$, с планами ϵ_N итеративной процедуры. Утверждение теоремы доказано, если учесть, что для планов ϵ_N существует теорема 7 об их сходимости к D -оптимальному плану ϵ_N . ■

ОРТОГОНАЛЬНЫЕ И РОТАТАБЕЛЬНЫЕ ПЛАНЫ

§ 1. Принцип ортогональности и принцип ротатабельности в планировании эксперимента

I. Как указывалось в § 1 главы II, существует довольно много разумных критериев оптимальности планов. Все они в конечном итоге связаны с видом информационной матрицы M . Часть этих критериев можно оформить в виде четких функционалов, с помощью которых можно найти оптимальные планы или проранжировать ряд планов по степени близости к оптимальному. В качестве примеров назовем D -оптимальные, G -оптимальные, A -оптимальные планы.

Однако существуют такие требования, предъявляемые к виду информационной матрицы, которые нельзя сформировать в виде оптимизационного функционала, но выполнение которых зачастую является желательным. Эти требования можно назвать нечетко сформулированными критериями оптимальности. К таким критериям можно отнести требование ортогональности планирования и требование ротатабельности планирования.

Определение 1. Планирование называется *ортогональным*, если информационная матрица — диагональная.

Если информационная матрица обладает этим свойством, то очевидно, что обработка экспериментальных данных существенно упрощается, т. к. исчезает одно из самых трудоемких вычислений — обращение матрицы M . При этом оценки параметров некоррелированы, что также является достоинством ортогонального планирования. Таким образом, принцип ортогональности связан с точностными характеристиками оценок параметров. Принцип ротатабельности связан с точностными характеристиками оценки поверхности отклика.

Определение 2. Планирование называется *ротатабельным*, если дисперсия оценки поверхности отклика постоянная в точках факторного пространства, лежащих

на сфере, центр которой совпадает с центром эксперимента.

Принцип ротатабельности пригоден в тех случаях, когда необходимо изучить поверхность отклика одинаково хорошо во всех направлениях.

II. Изучим более подробно теорию ортогонального планирования. Простота вычислений, которую гарантирует принцип ортогональности, еще не является достаточно серьезным доводом в его пользу. Кроме простоты вычислений должны удовлетворяться требования, предъявляемые к точности оценивания параметров Θ . Ортогональное планирование и с этой точки зрения является достаточно хорошим.

Для простоты будем считать в дальнейшем, что дисперсия наблюдений одинакова для всех возможных условий проведения опытов, т. е. $\lambda(x) = 1$ для всех $x \in \Omega_x$. В этом случае информационная и дисперсионная матрицы имеют вид соответственно (1.10), (1.32)

$$M = F^T F; D(\hat{\Theta}) = \sigma^2 (F^T F)^{-1} = \sigma^2 M^{-1}. \quad (3.1)$$

В (3.1) предполагается, что M — неособенная матрица.

Точки x_1, x_2, \dots, x_n факторного пространства, из которых состоит матрица плана X , выбираются из замкнутого множества Ω_x . Следовательно, это накладывает определенные ограничения на пределы изменения элементов матрицы F , зависящих от x_i , $F_{ij} = f_j(x_i)$. Существует множество способов задания границ варьирования F_{ij} . Выберем следующий способ, позволяющий достаточно просто обосновать принцип ортогональности.

Обозначим i -й столбец матрицы F через F_i . Будем считать, что матрица плана X такая, что выполняется соотношение

$$F_i^T F_i = \sum_{l=1}^n F_{li}^2 = C_i^2, \quad i = \overline{1, m}, \quad (3.2)$$

где n — число строк; m — число столбцов матрицы F ;

C_i^2 — заданы. Соотношение (3.2) является достаточно наглядным, если мы конкретизируем вид функций $f_j(x)$ (например, для моделей первого порядка, которые будут рассмотрены позже).

Теорема 1. Пусть X — матрица плана и $\hat{\Theta}$ — МНК-оценка параметров Θ линейной модели. Тогда при ограничениях (3.2) на матрицу X имеем

$$D(\hat{\theta}_i) \geq \frac{\sigma^2}{C_i^2}, \quad i = \overline{1, m}, \quad (3.3)$$

и равенство достигается тогда и только тогда, когда $F_i^T F_j = 0$ при $i \neq j$.

Доказательство. В матрице F для простоты поменяем местами столбцы F_1 и F_i . Тогда матрицу $F^T F$ можно представить следующим образом:

$$F^T F = \begin{bmatrix} F_1^T F_1 & B^T \\ B & H \end{bmatrix}. \quad (3.4)$$

Здесь $F_1^T F_1$ — скаляр; B — вектор-столбец; H — квадратная матрица. Поскольку $F^T F$ — положительно определенная матрица, то, согласно критерию Сильвестра, и H — положительно определенная матрица. Используя лемму 4 гл. II об определителе матрицы, обладающей блочной структурой:

$$\begin{vmatrix} AB \\ CD \end{vmatrix} = |A - BD^{-1}C| |D|,$$

подразумевая под матрицами A, B, C, D соответственно $F_1^T F_1, B^T, B, H$, можно записать

$$|M| = |F^T F| = (F_1^T F_1 - B^T H^{-1} B) |H|,$$

откуда

$$\begin{aligned} D(\hat{\theta}_i) &= \sigma^2 (M^{-1})_{ii} = \sigma^2 \frac{|H|}{|F^T F|} = \\ &= \frac{\sigma^2}{F_1^T F_1 - B^T H^{-1} B} \geq \frac{\sigma^2}{F_1^T F_1} = \frac{\sigma^2}{C_i^2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Появление знака неравенства в (3.5) связано с тем, что $B^T H^{-1} B \geq 0$ в силу положительной определенности матрицы H^{-1} , и равенство в (3.5) достигается тогда и только тогда, когда $B=0$, т. е. $F_i^T F_j = 0, i \neq j$. Перебирая в (3.4) все $i = \overline{1, m}$, убеждаемся в справедливости теоремы. ■

Теорема 1 обосновала принцип ортогональности планирования: планировать надо так, чтобы любые два столбца матрицы F были ортогональны. При этом достигается минимум дисперсии оцениваемых параметров. Сами оценки становятся некоррелированными и значительно упрощается их вычисление, т. к. информационная матрица — диагональная.

§ 2. Планы первого порядка. Полный факторный эксперимент

I. Применим принцип ортогональности к полиномиальным моделям. Если в качестве модели выбран полином степени d , то соответствующие планы называют планами порядка d . Рассмотрим подробнее планирование при $d=1$, т. е. планы первого порядка, при этом поверхность отклика будет иметь вид

$$\gamma(x, \theta) = \theta_0 + \sum_{i=1}^p \theta_i x_i. \quad (3.6)$$

Считаем при этом, что область Ω_x задана гиперкубом ограничений

$$-1 \leq x_i \leq 1, \quad i = \overline{1, p}. \quad (3.7)$$

Напомним, что если иметь в виду размерные факторы \tilde{x}_i , $i = \overline{1, p}$, которые непосредственно влияют на объект исследования, то в этом случае область $\Omega_{\tilde{x}}$ задана многомерным прямоугольным параллелепипедом

$$x_{iH} \leq \tilde{x}_i \leq x_{iB}, \quad i = \overline{1, p},$$

но, как указывалось, к безразмерным переменным x_i и центральному планированию можно перейти с помощью преобразования

$$x_i = \frac{\tilde{x}_i - \frac{\tilde{x}_{iB} + \tilde{x}_{iH}}{2}}{\frac{\tilde{x}_{iB} - \tilde{x}_{iH}}{2}} = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i0}}{\Delta_i}.$$

Числа \tilde{x}_{iH} , \tilde{x}_{iB} для размерных факторов и $-1, +1$ для стандартных факторов будем называть соответственно нижним и верхним уровнями, $\tilde{x}_0^T = (\tilde{x}_{10}, \tilde{x}_{20}, \dots, \tilde{x}_{p0})$ — центром эксперимента и Δ_i — интервалом варьирования для размерных факторов.

II. Задача получения ортогональных планов первого порядка имеет не единственное решение. Среди всех решений мы рассмотрим простейшие, удобно применяемые на практике. Это полный факторный эксперимент, дробный факторный эксперимент и симплексные планы. В полном и дробном факторных экспериментах используются лишь $x_i = \pm 1$, в симплексных планах $-1 \leq x_i \leq 1$.

Определение 3. Полным факторным экспериментом называется эксперимент, в котором реализуются все возможные комбинации уровней факторов.

Если число факторов равно p , число уровней по каждому фактору равно двум, то полный факторный эксперимент рекомендует 2^p опытов.

Построение матрицы F , определяющей свойства плана, начнем с двухфакторного эксперимента. Число различных опытов при этом $n=2^2=4$. Перебирая все возможные комбинации уровней факторов ± 1 и проводя соответствующие опыты, получим табл. 1.

Т а б л и ц а 1

№ опыта	Матрица F				Вектор наблюдений
	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	y
1	+1	-1	-1	+1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	+1	y_4

Столбцы $x_0, x_1, x_2, x_1 x_2$ задают матрицу F . Последний столбец y —вектор наблюдений. Нетрудно убедиться в ортогональности вектор-столбца матрицы F . Собственно матрицу плана X задают столбцы x_1, x_2 .

Если от матрицы F перейти к модели, то можем записать

$$\eta(x, \Theta) = \Theta_0 x_0 + \Theta_1 x_1 + \Theta_2 x_2 + \Theta_{12} x_1 x_2, \quad (3.8)$$

где $x_0 \equiv 1$.

Появление нелинейного слагаемого с неизвестным параметром Θ_{12} можно объяснить тем, что экспериментом с четырьмя различными опытами имеется возможность оценить модель с четырьмя неизвестными параметрами. Существует МНК-оценка параметров $\Theta_0, \Theta_1, \Theta_2, \Theta_{12}$, потому что, как видно из табл. 1, матрица $F^T F$ —диагональная, с ненулевыми диагональными элементами, следовательно, она—не вырождена.

III. Запись матрицы F , особенно для многих факторов, представляет некоторую трудность. Для удобства записи существует ряд приемов. Во-первых, элементы матрицы F будем представлять знаками $+$, $-$ вместо $+1, -1$. Во-вторых, введем регулярные способы пос-

троения матрицы планирования X , столбцы которой соответствуют столбцам x_1, x_2, \dots, x_p матрицы F . Существует три приема записи матрицы X для полного p -факторного эксперимента, основанные на переходе от матрицы X меньшей размерности к матрицам большей размерности.

Первый прием: записать исходную матрицу плана с $(p-1)$ факторами для одного уровня нового фактора x_p , а затем повторить ее для другого уровня фактора x_p .

Этот прием следует из того факта, что при добавлении нового фактора каждая комбинация уровней исходного плана встречается дважды: в сочетании с нижним и верхним уровнями фактора. Столбец x_2 в табл. 1 был получен этим приемом.

Прежде чем рассматривать второй прием, введем правило покомпонентного перемножения двух столбцов, согласно которому под произведением столбцов x_i и x_j понимаем столбец $x_i \cdot x_j$ той же размерности, элементы которого равны произведению соответствующих элементов, стоящих на тех же местах внутри столбцов x_i и x_j . По этому правилу получен столбец $x_1 \cdot x_2$ в табл. 1.

Второй прием: записать исходную матрицу плана с $(p-1)$ факторами, записать столбец x_p по правилу перемножения двух любых из $\{x_i, i=\overline{1, p-1}\}$ столбцов, затем повторить исходную матрицу, а у столбца x_p в нижней половине изменить знаки на обратные. Можно убедиться, что таким образом записан столбец x_3 для матрицы трехфакторного эксперимента в табл. 2.

Т а б л и ц а 2

№ опыта	x_1	x_2	x_3
1	-	-	+
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	+
5	-	-	-
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	-

Третий прием основан на правиле чередования знаков: в столбце x_1 знаки меняются поочередно, в столбце x_2 они чередуются через два, в третьем—через четыре, в четвертом—через восемь и т. д. по степеням двойки. В табл. 3 для трехфакторного эксперимента столбцы x_1 , x_2 , x_3 получены следующим образом.

Т а б л и ц а 3

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$
1	+	-	-	-	+	+	+	-
2	+	+	-	-	-	-	+	+
3	+	-	+	-	-	+	-	+
4	+	+	+	-	+	-	-	-
5	+	-	-	+	+	-	-	+
6	+	+	-	+	-	+	-	-
7	+	-	+	+	-	-	+	-
8	+	+	+	+	+	+	+	+

Матрицы плана, получаемые этими тремя способами, отличаются друг от друга перестановкой строк.

IV. Обращаясь снова к планированию полного трехфакторного эксперимента, можно заметить из табл. 3, что имеется возможность оценить параметры следующей модели:

$$\eta(x) = \theta_0 + \sum_{i=1}^3 \theta_i x_i + \sum_{i < j} \theta_{ij} x_i x_j + \theta_{123} x_1 x_2 x_3, \quad (3.9)$$

так как все столбцы матрицы F ортогональны. И вообще, при варьировании p факторами на двух уровнях по каждому фактору можно получить математическую модель объекта в виде полинома первого и неполного высшего порядка. Коэффициенты $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$ при линейных членах полинома носят название эффектов фактора, или главных эффектов. Коэффициенты θ_{ij} , $i < j$ при нелинейных членах полинома называются эффектами взаимодействия второго порядка, коэффициенты θ_{ijk} , $i < j < k$ —эффектами взаимодействия третьего порядка и т. д. Главный эффект определяется уровнем одного фактора, эффект взаимодействия—уровнями двух и более факторов.

Всех различных эффектов взаимодействия k -го порядка будет C_p^k . Следовательно, максимальное число

параметров математической модели в виде неполного полинома порядка p равно величине

$$\sum_{k=0}^p C_p^k = 2^p, \quad (3.10)$$

т. е. в полном p -факторном эксперименте опытов ровно столько, сколько оцениваемых параметров модели, учитывающей главные эффекты и эффекты взаимодействия, порядок которых не выше p .

В рамках планирования первого порядка эффекты взаимодействия можно было бы не учитывать. Их рассмотрение основано на двух соображениях. Во-первых, как уже отмечалось, полный факторный эксперимент позволяет оценить эти эффекты, что является дополнительной информацией об изучаемом объекте. Во-вторых, и это, пожалуй, является более существенным, учет этих эффектов подводит базу под теорию дробного факторного эксперимента, позволяющего резко сократить число необходимых опытов.

V. Сформулируем и докажем теорему, из которой вытекает ряд свойств полного факторного эксперимента.

Теорема 2. Для матрицы F полного p факторного эксперимента выполняется соотношение

$$F^T F = n I_n,$$

где I_n —единичная матрица; $n=2^p$.

Доказательство. Рассмотрим скалярное произведение p произвольных двух столбцов матрицы F

$$\rho = \sum_{l=1}^n x_{l_1} x_{l_2} \dots x_{l_r} x_{l_s}. \quad (3.11)$$

Величина ρ является произвольным элементом матрицы M . Все скалярные произведения отличаются друг от друга числом сомножителей под знаком суммы.

Минимальное число сомножителей равно двум, если скалярно перемножаются любые два столбца из x_0, x_1, \dots, x_p . Максимальное число сомножителей равно $2p$, если перемножается вектор $x_1 x_2 \dots x_p$, связанный с эффектом взаимодействия $\Theta_{1,2,\dots,p}$ порядка p , скалярно сам на себя.

Если под знаком суммы (3.11) стоят компоненты вектора x_0 или квадраты компонент векторов $x_i, i=$

$\overline{0, p}$, то их можно исключить, т. е.

$$x_{i_0} = x_{i_1}^2 = 1, \quad i = \overline{0, p}.$$

Далее может быть два варианта записи величины ρ : либо под знаком суммы не осталось ни одного из рассматриваемых сомножителей, тогда $\rho = n$, либо (3.11) есть сумма произведений компонент некоторых из векторов-столбцов x_1, x_2, \dots, x_p . Первый вариант имеет место тогда, когда столбцы матрицы F скалярно перемножаются сами на себя, т. е.

$$(F^T F)_{ii} = n, \quad i = \overline{0, 1, 2, \dots, (2^p - 1)}, \quad (3.12)$$

а второй вариант — в случае скалярного перемножения различных двух столбцов матрицы F , т. е. в этом случае (3.11) можно записать в виде

$$\rho = \sum_{l=1}^n x_{li_1} \cdot x_{li_2} \cdot x_{li_r}, \quad (3.13)$$

где i_1, i_2, \dots, i_r — некоторые из чисел $1, 2, \dots, p$ ($r \leq p$).

Используя определение полного факторного эксперимента, покажем, что во втором случае $\rho = 0$.

Согласно первому приему записи матрицы планирования, считая, например, x_{i_r} из (3.13) новым фактором, $x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_{r-1}}$ — исходными факторами, можно получить, что всегда найдутся такие две строки l и m матрицы X , для которых $x_{li_1} = x_{mi_1}, x_{li_2} = x_{mi_2}, \dots, x_{li_{r-1}} = x_{mi_{r-1}}$, но $x_{li_r} = -x_{mi_r}$, т. е. слагаемые в сумме (3.13) парами погашают друг друга. Отсюда вытекает, что

$$(F^T F)_{ij} = 0, \quad i \neq j, \quad i, j = \overline{0, p}. \quad (3.14)$$

Из (3.12), (3.14) окончательно получим

$$F^T F = nI_n. \quad (3.15)$$

Следовательно, матрица F — ортогональная. ■

Из (3.15) следует, что

$$(F^T F)^{-1} = \frac{1}{n} I_n$$

и оценка вектора Θ , и матрица ковариаций будут иметь особенно простой вид

$$\hat{\Theta} = \frac{1}{n} F^T y; \quad D(\hat{\Theta}) = \frac{\sigma^2}{n} I_n. \quad (3.16)$$

Из (3.16) вытекает, что оценки коэффициентов регрессии некоррелированы с минимальной дисперсией, равной

$$D(\hat{\theta}_i) = \frac{\sigma^2}{n}.$$

Если вычислить скалярное произведение вектор-столбцов x_0 и x_i , $i = \overline{1, p}$, то получим с учетом (3.15)

$$\sum_{i=1}^n x_{i_0} x_{i_i} = \sum_{i=1}^n x_{i_i} = 0. \quad (3.17)$$

Из (3.17) нетрудно сделать вывод, что полный факторный эксперимент обладает свойством симметричности.

Из свойства ортогональности планирования первого порядка вытекает также свойство ротатабельности, т.е. точность предсказания значений параметра оптимизации одинакова на равных расстояниях от центра эксперимента и не зависит от направления. Для линейного приближения будем иметь

$$\hat{\eta}(x) = \sum_{i=0}^p x_i \hat{\theta}_i.$$

С учетом (3.16) можно получить

$$D(\hat{\eta}) = \sum_{i=0}^p x_i^2 D(\hat{\theta}_i) = \frac{\sigma^2}{n} (1 + \rho^2), \quad (3.18)$$

где

$$\rho^2 = \sum_{i=1}^p x_i^2 = p,$$

откуда непосредственно следует ротатабельность планирования. Итак, полный факторный эксперимент обладает следующими свойствами:

- 1) просто производятся все вычисления;
- 2) оценки коэффициентов регрессии не коррелируют друг с другом;
- 3) все коэффициенты регрессии определяются с одинаковой и минимальной дисперсией;
- 4) планирование является симметричным;

5) планирование является ротатабельным.

Все эти свойства есть следствие одного — планирование является ортогональным.

Все перечисленные выше свойства характеризуют полный факторный эксперимент с положительной стороны. Но имеется одно отрицательное свойство, которое сильно ограничивает применение этого планирования на практике. Это свойство состоит в том, что полный факторный эксперимент требует слишком большого количества опытов. Линейная модель содержит $p+1$ неизвестных параметров, а опытов — 2^p . С ростом числа факторов число неизвестных параметров растет по линейному закону, а число опытов — по показательному закону. Например, при $p=7$ для оценки восьми неизвестных параметров полный факторный эксперимент рекомендует поставить $n=2^7=128$ опытов. Правда, при постановке таких экспериментов резко снижается ошибка оценок параметров уравнения регрессии, но это не всегда является достаточным основанием для постановки большого числа опытов. Поэтому необходимо поставить вопрос о поиске такого планирования, которое позволило бы сократить количество опытов до приемлемого уровня, но, тем не менее, сохранило бы все положительные качества полного факторного эксперимента. Одним из путей решения этой задачи является использование дробного факторного эксперимента.

§ 3. Дробный факторный эксперимент

1. Дробный факторный эксперимент возникает в случае, когда мы реализуем не все опыты, рекомендуемые полным факторным экспериментом, а только часть и такую часть, которая позволяет сохранить ортогональность планирования.

Пусть мы находимся в рамках линейной модели, т. е.

$$\eta(x) = \theta_0 + \sum_{i=1}^p \theta_i x_i$$

и имеем $p+1$ неизвестных параметров. При рассмотрении планирования с p факторами возьмем за основу полный q -факторный эксперимент и под этими факторами для конкретности будем понимать первые q факторов из x_1, x_2, \dots, x_p ($q < p$). Величину q можно подоб-

рать таким образом, что $2^q \geq p+1$, т. е. число опытов равно или несколько больше числа оцениваемых параметров.

В силу свойств матрицы планирования полного q -факторного эксперимента ортогональность столбцов x_0, x_1, \dots, x_q обеспечена. Остается подобрать еще $p-q$ столбцов x_{q+1}, \dots, x_p , которые были бы ортогональны как между собой, так и по отношению к столбцам x_0, x_1, \dots, x_q . Но в матрице планирования полного q -факторного эксперимента имеется 2^q ортогональных столбцов, первые $q+1$ из которых уже использованы. Взяв любые $p-q$ столбцов из оставшихся $2^q - (q+1)$, мы получим матрицу планирования, имеющую 2^q строк и $p+1$ столбцов (число ортогональных столбцов можно увеличить до 2^q).

В сущности, мы взяли матрицу планирования полного q -факторного эксперимента, оставили наименования первых $q+1$ столбцов прежними, а наименования некоторых $p-q$ столбцов из оставшихся заменили на $x_{q+1}, x_{q+2}, \dots, x_p$. В результате свойства планирования эксперимента с p факторами обеспечиваются свойствами полного q -факторного эксперимента—ортогональность планирования сохранилась и число опытов равно 2^q . Кстати, у выбранных $(p-q)$ столбцов можно поменять все знаки на обратные. Очевидно, что свойство ортогональности при этом не нарушится.

Таким образом, мы выбрали $n_1 = 2^q$ опытов из $n = 2^p$, предлагаемых полным факторным экспериментом. Эти 2^q опытов и представляют собой дробный факторный эксперимент. Отношение $\frac{n}{n_1} = 2^{p-q}$ является долей опытов, приходящихся на дробный факторный эксперимент. Если ввести обозначение $p-q=k$, то план дробного факторного эксперимента, содержащий $n_1 = 2^q = 2^{p-k}$ опытов, будем называть дробной репликой, а величину k —дробностью реплики. Если $k=0$, то будем иметь полный факторный эксперимент и его план будем называть репликой. При $k=1$ будем иметь $2^{p-1} = \frac{1}{2} 2^p$ опытов. Такие планы будем называть полурепликами. При $k=2$ будем иметь $\frac{1}{4} 2^p$ опытов. Такие планы будем называть четверть репликами и т. д.

Символически дробные реплики записываются в виде 2^{p-k} , где p —общее число факторов; k —дробность реплики; 2—число уровней каждого фактора.

Чем больше k , тем меньше опытов в дробной реплике, но существует k_{\max} , удовлетворяющее следующим соотношениям:

$$2^{p-k_{\max}} \geq p+1; 2^{p-(k_{\max}+1)} < p+1,$$

откуда

$$p+1 < 2^{p-k_{\max}} < 2(p+1). \quad (3.19)$$

Из (3.19) видно, что для заданной модели, т.е. для заданного p , можно подобрать план с минимальным числом опытов в классе дробных реплик. С другой стороны, для каждой дробной реплики существует предельное число факторов, когда еще возможно раздельно оценить линейные эффекты.

План с предельным числом факторов для данного числа опытов будем называть насыщенным. Нетрудно получить соотношение между числом факторов и числом опытов для насыщенного плана первого порядка

$$n_1 = 2^{p-k_{\max}} = p+1. \quad (3.20)$$

Это равенство выполняется лишь для некоторых из n и p .

В табл. 4 для наглядности приведены сравнительные характеристики для линейных моделей с различным числом факторов и дробных реплик максимальной дробности. Для сравнения представлено число опытов полного факторного эксперимента. Подчеркнуты те дробные реплики, которые позволяют реализовать насыщенное планирование.

II. Обсудим теперь вопрос о последствиях, связанных с заменой полного p -факторного эксперимента той или иной дробной репликой.

Реализуя дробную реплику, мы можем оценить максимум 2^{p-k} параметров модели. Если допустить, что имеют место только линейные эффекты, то все параметры модели оцениваются с минимальной дисперсией. Если же модель кроме линейных эффектов содержит и эффекты взаимодействия, то всех оцениваемых параметров будет 2^p . Следовательно, в этом случае мы оцениваем не 2^{p-k} параметров, а 2^{p-k} линейных фун-

Таблица 4

Число факторов, p	Число параметров, $p-1$	Число опытов дробной реплики, n_1	Условное обозначение, 2^{p-k} max	Дробность, k max	Число опытов полного факторного экс-та, n	Название дробной реплики
2	3	4	2^{2-0}	0	4	Реплика
3	4	4	2^{3-1}	1	8	1/2 Реплика от 2^3
4	5	8	2^{4-1}	1	16	1/2 Реплика от 2^4
5	6	8	2^{5-2}	2	32	1/4 Реплика от 2^5
6	7	8	2^{6-3}	3	64	1/8 Реплика от 2^6
7	8	8	2^{7-4}	4	128	1/16 Реплика от 2^7
8	9	16	2^{8-4}	4	256	1/16 Реплика от 2^8
9	10	16	2^{9-5}	5	512	1/32 Реплика от 2^9
10	11	16	2^{10-6}	6	1024	1/64 Реплика от 2^{10}
11	12	16	2^{11-7}	7	2048	1/128 Реплика от 2^{11}
12	13	16	2^{12-8}	8	4096	1/356 Реплика от 2^{12}
13	14	16	2^{13-9}	9	8192	1/512 Реплика от 2^{13}
14	15	16	2^{14-10}	10	16384	1/1024 Реплика от 2^{14}
15	16	16	2^{15-11}	11	32768	1/2048 Реплика от 2^{15}
16	17	32	2^{16-11}	11	65536	1/2048 Реплика от 2^{16}

Таблица 5

у	y_1 y_2 y_3 y_4 y_5 y_6 y_7 y_8
$x_2 x_3$	++ ++
$x_1 x_3$	+ +
$x_1 x_2$	+ ++ +
$x_4 = x_1 x_2 x_3$	++ +
x_3	+ ++
	++ ++
x_1	+ + + +
x_0	+++++++ +
№ опыта	1 2 3 4 5 6 7 8

кций от 2^p параметров, и набор этих функций будет зависеть от выбранной дробной реплики. Естественно возникает задача выбора такой дробной реплики, которая позволяет с минимальной погрешностью оценить наиболее важные, интересующие нас параметры. Проиллюстрируем решение этой задачи на ряде примеров.

III. Пример 1.

Полуреплики.

Пусть имеется $p=4$ факторов. Следовательно, в линейной модели имеется пять неизвестных параметров. Полный четырехфакторный эксперимент требует $n=2^4=16$ опытов. Для оценки пяти параметров вполне достаточно плана с $n_1=2^2=8$ опытами. Значит дробность реплики $k=1$, т.е. мы будем иметь дело с полурепликой 2^{4-1} .

Первые четыре столбца матрицы F этой полуреплики x_0, x_1, x_2, x_3 —это столбцы полного трехфакторного эксперимента. Все различные полуреплики отличаются друг от друга столбцом x_4 . При этом возможны следующие значения:

$$\begin{aligned} x_4 &= \pm x_1 x_2; & x_4 &= \pm x_1 x_3; \\ x_4 &= \pm x_2 x_3; & x_4 &= \pm x_1 x_2 x_3. \end{aligned}$$

(3.21)

Соотношения (3.21) называ-

ются генерирующими соотношениями, так как они генерируют, создают дробные рэшники.

Пусть для конкретности выбрали следующее генерирующее соотношение;

$$x_4 = x_1 x_2 x_3. \quad (3.22)$$

Тогда матрица F примет следующий вид (табл. 5). Обработывая наблюдения с этой матрицей планирова-

ния, получим оценки $\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \hat{\theta}_3, \hat{\theta}_4, \hat{\theta}_{12}, \hat{\theta}_{13}, \hat{\theta}_{23}$. Посмотрим, что мы понимаем под этими оценками, если иметь в виду модель с линейными эффектами взаимодействия второго, третьего и четвертого порядков.

$$\eta(x) = \theta_0 + \sum_i \theta_i x_i + \sum_{i,j} \theta_{ij} x_i x_j + \sum_{i,j,k} \theta_{ijk} x_i x_j x_k + \theta_{1234} x_1 x_2 x_3 x_4. \quad (3.23)$$

Умножив левую и правую части выражения (3.22) на x_4 , получим в левой части вектор-столбец единиц

$$x_4^2 = x_0 = x_1 x_2 x_3 x_4. \quad (3.24)$$

Будем называть определяющим контрастом выражение (3.24), задающее элементы столбца x_0 . Зная определяющий контраст, легко найти соотношения, задающие все совместные оценки. Умножим левую и правую части определяющего контраста последовательно на x_1, x_2, x_3, x_4 и различные комбинации их произведений по два вектора. Тогда получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} x_1 &= x_2 x_3 x_4; & x_4 &= x_1 x_2 x_3; & x_2 x_3 &= x_1 x_4; \\ x_2 &= x_1 x_3 x_4; & x_1 x_2 &= x_3 x_4; \\ x_3 &= x_1 x_2 x_4; & x_2 x_3 &= x_2 x_4, \end{aligned} \quad (3.25)$$

которые тоже являются генерирующими соотношениями, только они связаны с конкретным определяющим контрастом.

Учитывая (3.24), (3.25), наша модель (3.23) примет вид

$$\begin{aligned} \eta(x) &= (\theta_0 + \theta_{1234}) + (\theta_1 + \theta_{234})x_1 + (\theta_2 + \theta_{134})x_2 + \\ &+ (\theta_3 + \theta_{124})x_3 + (\theta_4 + \theta_{123})x_4 + (\theta_{12} + \theta_{34})x_1 x_2 + \\ &+ (\theta_{13} + \theta_{24})x_1 x_3 + (\theta_{23} + \theta_{14})x_2 x_3. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Из (3.26) видно, что под величиной Θ_0 мы понимаем оценку параметра $\Theta_0 + \Theta_{1234}$, под величиной $\hat{\Theta}_1$ — оценку параметра

$$\begin{aligned} \Theta_1 + \Theta_{234}, \hat{\Theta}_2 \rightarrow \Theta_2 + \Theta_{123}, \hat{\Theta}_3 \rightarrow \Theta_3 + \Theta_{124}; \\ \Theta_4 \rightarrow \Theta_4 + \Theta_{123}, \hat{\Theta}_{12} \rightarrow \Theta_{12} + \Theta_{34}, \hat{\Theta}_{13} \rightarrow \Theta_{13} + \Theta_{24}; \\ \hat{\Theta}_{23} \rightarrow \Theta_{23} + \Theta_{14}. \end{aligned}$$

Таким образом, на основании генерирующих соотношений (3.25) определили смеси параметров, оцениваемые при применении дробной реплики. Теперь можно сказать, что генерирующим соотношением называется соотношение, показывающее, с каким из эффектов смешан данный эффект.

По определяющему контрасту через генерирующие соотношения (3.25) можно определить, с эффектами взаимодействия какого порядка смешаны основные эффекты. В частности, в рассматриваемом случае основные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия третьего порядка. Эту полуреплику будем называть полурепликой с разрешающей способностью IV (по числу факторов в определяющем контрасте).

Если в качестве генерирующего соотношения, задающего полуреплику, мы выберем не (3.22), а, например, $x_4 = -x_1x_2$, то определяющий контраст будет $1 = -x_1x_2x_4$, разрешающая способность равна III и система смещения эффектов следующая:

$$\begin{aligned} \hat{\Theta}_0 \rightarrow \Theta_0 - \Theta_{124}; \hat{\Theta}_1 \rightarrow \Theta_1 - \Theta_{24}; \hat{\Theta}_2 \rightarrow \Theta_2 - \Theta_{14}; \hat{\Theta}_3 \rightarrow \Theta_3 - \Theta_{1234}; \\ \hat{\Theta}_4 \rightarrow \Theta_4 - \Theta_{12}; \hat{\Theta}_{13} \rightarrow \Theta_{13} - \Theta_{234}; \hat{\Theta}_{23} \rightarrow \Theta_{23} - \Theta_{134}; \hat{\Theta}_{34} \rightarrow \Theta_{34} - \Theta_{123}. \end{aligned}$$

Символически полуреплику от полного четырехфакторного эксперимента с разрешающей способностью IV можно записать как $2^{\frac{4-1}{IV}}$, а с разрешающей способностью III — в виде $2^{\frac{4-1}{III}}$.

Таким образом, чем выше разрешающая способность полуреплики, тем больше порядок эффекта взаимодействия, с которым смешан основной эффект.

При выборе той или иной полуреплики мы стремимся к тому, чтобы интересующие нас основные эффекты смешивались с незначимыми эффектами взаимодействия. Если, например, известно, что все эффекты взаимодействия отсутствуют, то можно выбрать любую полуреплику. Если влияние эффекта взаимодействия уменьшается с увеличением порядка взаимодействия, то имеет смысл выбирать полуреплику с максимальной разрешающей способностью. Такие полуреплики называются главными. Если же известно, что лишь некоторые эффекты взаимодействия отличны от нуля, то нужно выбирать такую полуреплику, при применении которой основные эффекты не будут смешиваться с этими эффектами взаимодействия.

IV. Пример 2. Четвертьреплики

Рассмотрим теперь, как ведут себя четвертьреплики.

Пусть $p=5$. Дробность четвертьреплики $k=2$. За основу взяли полный трехфакторный эксперимент. При выборе столбцов x_4 и x_5 выбрали следующие генерирующие соотношения:

$$x_4 = x_1 x_3; \quad x_5 = x_1 x_2 x_3.$$

Тогда определяющими контрастами являются

$$x_0 = x_1 x_3 x_4; \quad x_0 = x_1 x_2 x_3 x_5.$$

Если перемножить эти определяющие контрасты, то получится третье соотношение $x_0 = x_2 x_4 x_5$. Чтобы полностью охарактеризовать разрешающую способность дробной реплики, необходимо записать обобщенный определяющий контраст

$$x_0 = x_1 x_3 x_4 = x_2 x_4 x_5 = x_1 x_2 x_3 x_5. \quad (3.27)$$

Система смешивания определяется умножением обобщенного определяющего контраста последовательно на x_1, x_2, x_3, x_4 и т. д.

$$\begin{aligned} x_1 &= x_3 x_4 = x_1 x_2 x_4 x_5 = x_2 x_3 x_5; \\ x_2 &= x_1 x_2 x_3 x_4 = x_4 x_5 = x_1 x_3 x_5; \\ x_3 &= x_1 x_4 = x_2 x_3 x_4 x_5 = x_1 x_2 x_5; \\ x_4 &= x_1 x_3 = x_2 x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4 x_5; \\ x_5 &= x_1 x_3 x_4 x_5 = x_2 x_4 = x_1 x_2 x_3; \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$x_1 x_2 = x_2 x_3 x_4 = x_1 x_4 x_5 = x_3 x_5;$$

$$x_1 x_5 = x_3 x_4 x_5 = x_1 x_2 x_4 = x_2 x_3.$$

Разрешающая способность дробной реплики равна минимальному числу сомножителей в обобщенном определяющем контрасте. Символическая запись рассматриваемой четвертьреплики будет в виде 2^{5-2}_{III} .

Как видно из (3.28), получается довольно сложная система смешивания линейных эффектов с эффектами взаимодействия второго, третьего, четвертого порядков. Например, при оценивании параметра θ_1 имеем следующую смесь:

$$\hat{\theta}_1 \rightarrow \theta_1 + \theta_{34} + \theta_{1245} + \theta_{235}.$$

V. Процедура выбора реплик большей дробности совершенно аналогична. С ростом числа факторов увеличивается дробность реплик и усложняется система смешивания. Табл. 4 иллюстрирует рост дробности реплик с увеличением числа факторов до 16.

Можно рассматривать и построение дробных реплик для большего числа факторов. Однако для решения подобных задач рекомендуется сначала применять методы отбора факторов для уменьшения размерности факторного пространства.

§ 4. Симплексные планы

Полный и дробный факторные эксперименты позволяют строить насыщенные планы только для определенного числа факторов и, как следует из табл. 4, такие планы могут быть построены лишь для $p = 2^k - 1$, где $k = 2, 3, 4, \dots$. Возникает необходимость построения ортогональных насыщенных планов для любого конечного числа факторов. Решением этой задачи мы и займемся.

Насыщенный план первого порядка требует $n = p + 1$ опытов, соответствующих $p + 1$ точкам в p -мерном факторном пространстве. Обозначим эти точки через x_0, x_1, \dots, x_p . Эти же векторы являются строками матрицы планирования X . Пусть $x_1 - x_0, x_2 - x_0, \dots, x_p - x_0$ линейно независимы и образуют выпуклую оболочку

$S(x_0, x_1, \dots, x_p)$, т.е. $x \in S(x_0, x_1, \dots, x_p)$, если найдутся числа $\alpha_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^p \alpha_i = 1$, что $x = \sum_{i=1}^p \alpha_i (x_i - x_0)$.

Определение 4. Множество $S(x_0, x_1, \dots, x_p)$ называется симплексом, натянутым на вершины x_0, x_1, \dots, x_p , где p —размерность симплекса.

На первый взгляд вершина x_0 выделена. На самом же деле все вершины равноправны, потому что мы можем аналогично ввести для произвольного $k = \overline{1, p}$ векторы $x_0 - x_k, x_1 - x_k, \dots, x_p - x_k$, которые между собой линейно независимы, если независимы векторы $x_i - x_0$, $i = \overline{1, p}$. Покажем это. Предположим, что $x_0 - x_k, x_1 - x_k, \dots, x_p - x_k$ линейно зависимы, т.е. найдутся числа $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_p$, не все равные нулю, что $\sum_{i=0}^p \alpha_i (x_i - x_k) = 0$,

откуда

$$\sum_{i=1}^p \alpha_i (x_i - x_0) + (x_0 - x_k) \sum_{i=0}^p \alpha_i = 0, \text{ т.е. } x_i - x_0, i = \overline{1, p}$$

также линейно зависимы, что противоречит определению симплекса.

Симплекс—это простейшая выпуклая геометрическая фигура в p -мерном пространстве. Он правильный, если расстояния между любыми двумя вершинами одинаковы. От произвольного симплекса всегда можно перейти к правильному с центром в начале координат при помощи соответствующей замены переменных, и наоборот. Поэтому в дальнейшем будем иметь дело лишь с правильными симплексами с центром в начале координат. В двумерном пространстве правильным симплексом будет равносторонний треугольник, в трехмерном—правильный тетраэдр и т.д. В качестве примера симплекса рассмотрим матрицу

$$A = \begin{bmatrix} -r_1 - r_2, \dots, -r_{p-1} - r_p \\ R_1 - r_2, \dots, -r_{p-1} - r_p \\ 0 \quad R_2, \dots, -r_{p-1} - r_p \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ 0 \quad 0, \dots \quad R_{p-1} - r_p \\ 0 \quad 0, \dots \quad 0 \quad R_p \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

где

$$R_i = \sqrt{\frac{i^2}{2i(i+1)}}, \quad r_i = \sqrt{\frac{1}{2i(i+1)}}. \quad (3.30)$$

Матрица (3.29) имеет $p+1$ строк и p столбцов и на ее основе действительно можно построить симплекс. Из построения матрицы (3.29) видно, что ее ранг равен p . Тогда из определения 4 получаем, что строки матрицы представляют собой координаты вершин симплекса размерности p . Не сложно показать, что этот симплекс правильный со стороной, равной единице, и с центром в начале координат. Для этого используем следующие легко проверяемые соотношения:

$$R_i = i \cdot r_i; \quad (3.31)$$

$$R_i^2 = r_i^2 + R_{i-1}^2; \quad (3.32)$$

$$(R_i + r_i)^2 = \frac{i+1}{2i}. \quad (3.33)$$

Рассматривая (3.32) как рекуррентное соотношение, будем иметь

$$\begin{aligned} R_p^2 &= r_p^2 + R_{p-1}^2 = r_p^2 + r_{p-1}^2 + R_{p-2}^2 = r_p^2 + r_{p-2}^2 + R_{p-3}^2 = \\ &= \sum_{j=i}^p r_j^2 + R_{i-1}^2, \end{aligned}$$

откуда

$$\sum_{j=i}^p r_j^2 = R_p^2 - R_{i-1}^2. \quad (3.34)$$

Обозначая строки матрицы A через x_0, x_1, \dots, x_p и учитывая из (3.29), что компоненты вектора x_i имеют вид

$$x_{ij} = \begin{cases} 0 & i > j \\ R_i & i=j, \quad i=\overline{0, p}, \quad j=\overline{1, p}, \\ -r_j & i < j \end{cases} \quad (3.35)$$

нетрудно получить выражение для расстояния между вершинами x_i и x_k симплекса. Полагая для определенности $i < k$, получим после несложных вычислений с учетом (3.34)

$$|x_i - x_k|^2 = (r_k + R_k)^2 + R_{k-1}^2,$$

откуда с учетом (3.30), (3.33) $\|x_i - x_k\|^2 = 1$, т.е. (3.29) определяет правильный симплекс со стороной, равной единице. Из (3.35) с учетом (3.31) видно, что среднее арифметическое векторов x_0, x_1, \dots, x_p , являющееся центром симплекса, равно нулевому вектору.

Расстояние от центра симплекса до любой вершины постоянно и равно R_p , т. к. с учетом (3.35), (3.34)

$$\|x_i\|^2 = \sum_{j=1}^p x_{ij}^2 = R_i^2 + \sum_{j=i+1}^p r_j^2 = R_i^2 + R_p^2 - R_i^2 = R_p^2.$$

Таким образом, получили, что расстояния от центра симплекса до любых двух его вершин x_i, x_k одинаковы и не зависят от номеров вершин, расстояние между вершинами также не зависит от номеров вершин. Следовательно, с учетом того, что центр симплекса находится в начале координат, угол между векторами x_i, x_k постоянен и не зависит от номеров i, k .

Теорема 3. Вершины правильного симплекса с центром в начале координат задают матрицу планирования для ортогонального насыщенного плана первого порядка.

Доказательство. Пусть X — $n \times p$ матрица планирования, строки которой задают условия проведения $n = p + 1$ опытов в p -мерном факторном пространстве для ортогонального плана первого порядка. Соответствующая матрица F имеет вид $F = [1, X]$, где 1 — столбец из единиц, присоединенный к матрице X . Матрица F — квадратная и удовлетворяет соотношению (требование ортогональности)

$$\frac{1}{n} F^T F = I_n. \quad (3.36)$$

Докажем, что строки матрицы X представляют собой координаты соответствующих вершин правильного симплекса с центром в начале координат. Из уравнения (3.36) следует, что матрица $n^{-\frac{1}{2}} F$ ортогональная, т. е. ее строки составляют ортонормированную систему векторов. Обозначим i -ю строку матрицы F через вектор-столбец $z_i, i = \overline{0, p}$. Тогда получим из (3.36)

$$z_i^T z_j = n \delta_{ij}. \quad (3.37)$$

Обозначим строки матрицы X через вектор-столбцы x_0, x_1, \dots, x_p , и пусть θ_{ij} — угол между векторами x_i, x_j .

Так как матрицы F и X связаны соотношением $F = [1, X]$, то скалярные произведения соответствующих строк матриц F и X имеют вид

$$z_i^T z_j = 1 + x_i^T x_j = n \delta_{ij}, \quad i, j = \overline{0, p}.$$

Отсюда следует, что

$$x_i^T x_j = n \delta_{ij} - 1 = \begin{cases} -1 & i \neq j \\ n-1 & i = j. \end{cases} \quad (3.38)$$

При $i = j$ из (3.38) получим

$$\|x_i\| = (x_i^T x_i)^{1/2} = (n-1)^{1/2}. \quad (3.39)$$

При $i \neq j$ (3.38) раскрывается по формуле

$$x_i^T x_j = \|x_i\| \|x_j\| \cos \theta_{ij} = (n-1) \cos \theta_{ij} = -1,$$

откуда

$$\cos \theta_{ij} = -\frac{1}{n-1}. \quad (3.40)$$

Соотношения (3.39), (3.40) доказывают, что ортогональный план первого порядка с числом точек $n = p + 1$ образует правильный симплекс в p -мерном факторном пространстве. Если учесть, что рассматриваемый план центральный, то и центр полученного симплекса находится в начале координат.

Пусть теперь имеем правильный симплекс с центром в начале координат. Докажем, что он с точностью до постоянного множителя представляет собой матрицу X ортогонального центрального плана. Действительно, скалярное произведение любых двух столбцов матрицы (3.29), определяющей симплекс, равно нулю, т. к. при $i < k$ с учетом (3.35), (3.31) получим

$$\sum_{j=0}^p x_{ji} x_{jk} = \sum_{j=0}^l x_{ji} x_{jk} = r_k (i \cdot r_l - R_l) = 0.$$

Такой же результат получится при $i > k$.

При $i = k$ будем иметь с учетом (3.30)

$$\sum_{j=0}^p x_{ji}^2 = \sum_{j=0}^{l-1} r_i^2 + R_i^2 = i r_i^2 + R_i^2 = \frac{1}{2},$$

т. е. сумма квадратов компонент любого столбца матрицы (3.29) одинакова и не зависит от номера столбца. Эти соотношения с точностью до постоянного множителя будут выполняться и для произвольного симплекса с центром в начале координат, т. к. последний может быть получен при помощи ортогонального преобразования данного симплекса с последующим умножением на некоторую положительную константу. Все это, с учетом того, что симплекс имеет центр в начале координат, доказывает теорему. ■

Рассмотрим ряд примеров. Пусть $p=2$. Можно проверить, что матрица

$$F = \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & \sqrt{\frac{3}{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & -\frac{2}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

является матрицей независимых переменных для ортогонального планирования первого порядка, удовлетворяющей матричному уравнению $\frac{1}{3}F^T F = I_3$. При этом матрица X , задающая собственно план эксперимента:

$$X = \begin{bmatrix} -\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{2}} \end{bmatrix},$$

определяет вершины 1,2,3 равностороннего треугольника (рис. 3.1)

Пусть $p=3$. В качестве матрицы F независимых переменных возьмем полуреплику 2^{3-1}

$$F = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

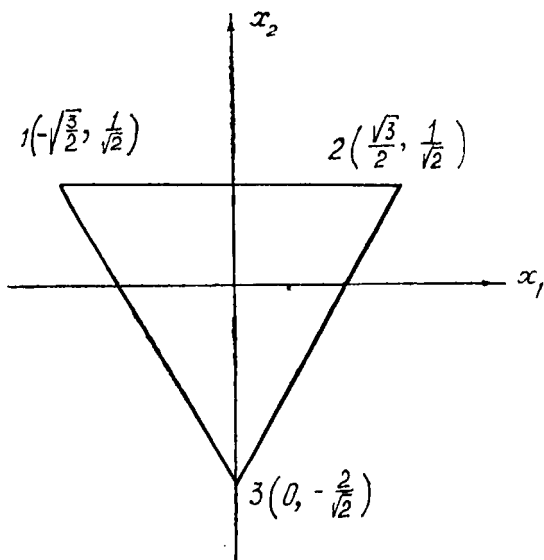


Рис. 3.1

Матрица F —ортогональная. Матрица X

$$X = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

задает вершины 1,2,3,4 куба (рис. 3.2). Эти точки образуют правильный тетраэдр.

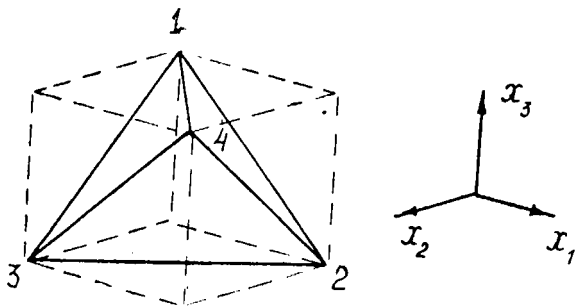


Рис. 3.2

В качестве третьего примера можно привести следующее выражение для произвольного элемента матрицы X :

$$x_{ij} = \sqrt{2} \cos \left(\frac{2\pi ij}{p+1} - \frac{\pi}{4} \right), \quad i = \overline{0, p}, \quad j = \overline{1, p}. \quad (3.41)$$

Строки матрицы X (индекс i) задают координаты вершин симплекса в p -мерном пространстве.

§ 5. Центральное композиционное планирование второго порядка

Считаем, что модель исследуемого объекта задана в виде полинома второго порядка

$$\eta = \theta_0 + \sum_{i=1}^p \theta_i x_i + \sum_{i < j} \theta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^p \theta_{ii} x_i^2. \quad (3.42)$$

Эта модель имеет $\frac{1}{2}p^2 + \frac{3}{2}p + 1$ неизвестных параметров.

Идея центрального композиционного планирования состоит в следующем. Обычно к планированию второго порядка мы переходим после того, как выяснилось, что линейная модель не адекватна, но уже получены результаты с использованием дробных реплик или симплексного планирования. Поэтому, чтобы эти результаты можно было использовать при работе с моделью в виде полинома второй степени, предлагается к точкам плана первого порядка добавить ряд дополнительных точек и в совокупности получить план, используя который можно оценить параметры уравнения (3.42). При этом должна выполняться ортогональность матрицы плана второго порядка.

Точки плана первого порядка называются ядром плана, а новые точки называются звездными точками и точками центра. Звездные точки выбираются на осях координат x_1, \dots, x_p на расстоянии α от центра. Следовательно, их будет $2p$, по две на каждый фактор. В центре эксперимента ставится n_0 опытов. Таким образом, если в качестве ядра выбирается дробная реплика 2^{p-k} , то требуется поставить $n = 2^{p-k} + 2p + n_0$ опытов.

Прокомментируем предлагаемое расположение точек на примере модели с тремя факторами, изображенное на рис. 3.3. Точки вершин куба представляют собой точки ядра, в качестве которого взят полный трехфакторный эксперимент 2^3 . Звездочками обозначены звездные точки, расположенные на координатных осях на расстоянии α от центра. Величина α носит название *величины звездного плеча*. Кружочком в центре обозначены точки центра.

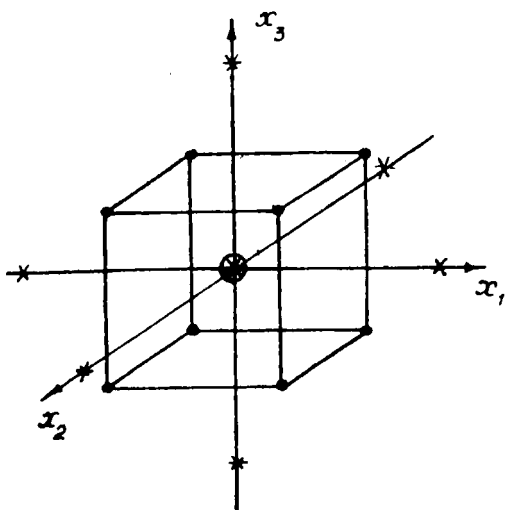


Рис. 3.3

Величину звездного плеча α и число точек в центре n_0 подбирают таким образом, чтобы планирование второго порядка обладало заданными свойствами.

Матрица плана, заданного на рис. 3.3, при $n_0=1$ будет выглядеть так (табл. 6). Первые восемь опытов связаны с точками ядра, следующие 6—со звездными точками и последний—с точками центра.

При произвольных p и k матрица плана будет иметь ту же структуру, что и изображенная в табл. 6.

Вообще говоря, в матрице планирования не все вектор-столбцы ортогональны. Учитывая структуру матрицы планирования, нетрудно убедиться, что неортогональны между собой столбцы $x_0, x_1^2, x_2^2, \dots, x_p^2$.

Чтобы получить столбцы $x_1^2, x_2^2, \dots, x_p^2$ ортогональными

Таблица 6

№	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	x_1^2	x_2^2	x_3^2
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1	+1
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	+1
4	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1
6	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	+1
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1
8	+1	+1	+1	+1	-1	+1	+1	+1	+1	+1
9	+1	-x	0	0	0	0	0	x ²	0	0
10	+1	+x	0	0	0	0	0	x ²	0	0
11	+1	0	-x	0	0	0	0	0	x ²	0
12	+1	0	+x	0	0	0	0	0	x ²	0
13	+1	0	0	-x	0	0	0	0	0	x ²
14	+1	0	0	+x	0	0	0	0	0	x ²
15	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

ми к столбцу x_0 , произведем замену переменных: вместо столбца x_i^2 введем столбец x'_i по формуле

$$x'_i = x_i^2 - \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n x_{il}^2. \quad (3.43)$$

Теперь нетрудно убедиться в ортогональности столбцов x_0 и x'_i

$$\sum_{l=1}^n x_{l0} x'_{li} = \sum_{l=1}^n x_{li}^2 - \sum_{l=1}^n x_{li}^2 = 0. \quad (3.44)$$

Далее сделаем ортогональными столбцы x'_i при $i=1, \dots, p$ между собой. Как нетрудно убедиться из табл. 6, планирование построено одинаковым образом для всех независимых переменных. Поэтому $\sum_l x_{li} x'_{lj}$ — одинаковы между собой при $i=j$ и внедиагональные элементы при $i \neq j$ тоже одинаковы между собой. Оказывается, что можно подобрать величину звездного плеча так, чтобы вектор-столбцы x'_i и x'_j были ортогональны при $i \neq j$, т. е.

$$\sum_{l=1}^n x'_{li} x'_{lj} = 0,$$

и тогда все столбцы матрицы плана будут ортогональны.

В качестве примера приведем табл. 7, где получено центральное композиционное планирование при $n_0=1$ в некоторых случаях.

Т а б л и ц а 7

Число факторов	Величина звездного плеча	Ядро
$p=2$	$\alpha=1$	2^2
$p=3$	$\alpha=1,215$	2^3
$p=5$	$\alpha=1,5147$	2^{5-1}

В случае $p=5$ взята полуреплика $x_1 x_2 x_3 x_4 x_5 = 1$.

При ортогональном планировании второго порядка все коэффициенты уравнения регрессии определяются независимо друг от друга с минимальной дисперсией.

Учитывая, что матрица $(F^T F)^{-1}$ — диагональная и

$$(F^T F)_{ii}^{-1} = (F_i^T F_i)^{-1} = \frac{1}{\sum_{l=1}^n F_{li}^2}, \quad (3.45)$$

где F_i — произвольный вектор-столбец матрицы F , получим оценку параметра θ_i

$$\hat{\theta}_i = \frac{\sum_l x_{li} y_l}{\sum_l x_{li}^2} \quad (3.46)$$

и дисперсию оценки этого параметра

$$D(\hat{\theta}_i) = \frac{\sigma^2}{\sum_l F_{li}^2}. \quad (3.47)$$

Если i изменяется от 0 до p , то будем иметь оценки нулевого приближения и коэффициентов при линейных членах, а далее при увеличении i будем иметь последовательно оценки коэффициентов взаимодействия и коэффициентов при нелинейных членах. Однако при планировании второго порядка принцип ортогональности не всегда совпадает с принципом ротатабельности, так как из (3.47) видно, что коэффициенты регрессии определяются с неодинаковыми дисперсиями ($\sum_l x_{li}^2 \neq \text{const}$).

При вращении матрицы планирования $\sum_l x_{li}^2$ изменяется, и дисперсии меняются по сложному закону, т. е. предсказание поверхности отклика производится не во всех направлениях с одинаковой погрешностью.

§ 6. Ротатабельное планирование порядка d

Построение ротатабельных планов второго порядка — задача более сложная, чем построение ротатабельных планов первого порядка. Получим условия, которым должна удовлетворять матрица планирования порядка d при ротатабельном планировании. Для этого рассмотрим вспомогательный вопрос, связанный с возведением в степень векторов и матриц.

1. Определим возведение в степень векторов и матриц и исследуем его свойства.

Пусть имеется вектор $x^T = (x_1, x_2, \dots, x_p)$. Через z обозначим вектор, равный k -й степени вектора x , т. е. $z = x^{[k]}$.

Определение 5. Под вектором $x^{[k]}$ будем понимать вектор z , содержащий в качестве компонент все степени и произведения порядка k из компонент вектора x с множителями, подобранными так, чтобы

$$z^T z = x^T [k] x^{[k]} = (x^T x)^k. \quad (3.48)$$

Например:

$$k=2; p=2; x^T = (x_1, x_2); z^T = (x^T)^{[2]} = (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2} x_1 x_2).$$

Вычисляя скалярное произведение $z^T z$, получим

$$z^T z = x_1^4 + x_2^4 + 2 x_1^2 x_2^2 = (x_1^2 + x_2^2)^2 = (x^T x)^2.$$

Из определения вытекает очевидное свойство

$$(x^T)^{[k]} = (x^{[k]})^T.$$

Пусть теперь имеем $y = Hx$ (или $y^T = x^T H$), где x, y — векторы; H — матрица соответствующей размерности.

Определение 6. Под k -й степенью матрицы H будем понимать такую матрицу $H^{[k]}$, для которой выполняется следующее соотношение:

$$y^{[k]} = H^{[k]} x^{[k]} \quad (\text{или } y^{[k]T} = (x^T)^{[k]} H^{[k]}). \quad (3.49)$$

Рассмотрим свойства матрицы, возведенной в степень.

Свойство 1. k -я степень произведения двух матриц равна произведению k -х степеней тех же матриц, взятых в том же порядке

$$(HA)^{[k]} = H^{[k]} A^{[k]}. \quad (3.50)$$

Доказательство. Пусть

$$z = HAx, \quad (3.51)$$

где z, x — векторы; H, A — матрицы соответствующих размерностей. Введем вектор y по формуле

$$y = Ax, \quad (3.52)$$

тогда

$$z = Hy. \quad (3.53)$$

Возведем в k -ю степень (3.51) + (3.53)

$$\begin{aligned} z^{[k]} &= (HA)^{[k]} x^{[k]}; \\ y^{[k]} &= A^{[k]} x^{[k]}; \\ z^{[k]} &= H^{[k]} y^{[k]}. \end{aligned}$$

Отсюда имеем

$$(HA)^{[k]} x^{[k]} = H^{[k]} y^{[k]} = H^{[k]} A^{[k]} x^{[k]}. \quad (3.54)$$

Начало и конец формулы (3.54) дают (3.50). ■

Свойство 2. k -я степень транспонированной матрицы равна транспонированной от k -й степени матрицы

$$(H^T)^{[k]} = (H^{[k]})^T. \quad (3.55)$$

Доказательство. Пусть $z = Hx$. (3.56)

При транспонировании (3.56) будем иметь

$$z^T = x^T H^T. \quad (3.57)$$

Возводим в степень (3.57) и (3.56)

$$\begin{aligned} z^{[k]} &= H^{[k]} x^{[k]}; \\ (z^T)^{[k]} &= (x^T)^{[k]} (H^T)^{[k]}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Учитывая свойство вектора в степени, из (3.58) имеем

$$\begin{aligned} (z^{[k]})^T &= (z^T)^{[k]} = (H^{[k]} x^{[k]})^T = (x^T)^{[k]} (H^T)^{[k]}; \\ (x^{[k]})^T &= (H^{[k]})^T (x^T)^{[k]} = (x^T)^{[k]} (H^T)^{[k]}. \end{aligned}$$

Отсюда непосредственно вытекает (3.55). ■

Свойство 3. Матрица, обратная от k -й степени матрицы, равна обратной в степени k

$$(H^{[k]})^{-1} = (H^{-1})^{[k]}. \quad (3.59)$$

Доказательство. Пусть

$$z = Hx \quad (3.60)$$

и существует матрица H^{-1} , тогда имеем

$$x = H^{-1}z. \quad (3.61)$$

Возводя в степень (3.61) и (3.60), получим

$$z^{[k]} = H^{[k]} x^{[k]}; \quad (3.62)$$

$$x^{[k]} = (H^{-1})^{[k]} z^{[k]}. \quad (3.63)$$

Умножим (3.62) слева на матрицу $(H^{[k]})^{-1}$

$$x^{[k]} = (H^{[k]})^{-1} z^{[k]}. \quad (3.64)$$

Сравнивая (3.63) и (3.64), убеждаемся в справедливости (3.59). ■

Свойство 4. Если H — ортогональная матрица, то $H^{[k]}$ — тоже ортогональная

$$(H^{[k]})^{-1} = (H^{[k]})^T. \quad (3.65)$$

Доказательство. Пусть H — ортогональная матрица, т. е.

$$H^T = H^{-1},$$

тогда используя свойства 2 и 3, будем иметь

$$(H^{[k]})^{-1} = (H^{-1})^{[k]} = (H^T)^{[k]} = (H^{[k]})^T,$$

откуда следует (3.65).

II. Пусть d — порядок полинома в полиномиальной модели, R — ортогональная матрица, осуществляющая поворот осей координат в факторном пространстве. Получим критерий ротатабельности порядка d в матричном виде.

Теорема 4. План ϵ порядка d будет ротатабельным тогда и только тогда, когда соответствующая информационная матрица будет инвариантна при ортогональном преобразовании координат, т. е.

$$F^T F = R^T [d] F^T F R [d]. \quad (3.66)$$

Доказательство. Запишем p -мерный полином порядка d

$$\gamma(x) = \theta_0 + \sum_{i=1}^p \theta_i x_i + \sum_{i < j} \theta_{ij} x_i x_j + \dots \quad (3.67)$$

Ряд (3.67) обрывается на степени или произведениях x порядка d . Этот ряд можно представить более компактно, если ввести вектор $t^T = (1, x_1, x_2, \dots, x_p^d)$.

Нетрудно увидеть, что в (3.67) существуют все составляющие вектора $t^{[d]}$. Введем дополнительно вектор θ , составляющие которого есть коэффициенты полинома (3.67) $\theta_0, \theta_1, \dots$ с множителями, подобранными таким образом, чтобы запись (3.67) совпадала с записью (3.68)

$$\gamma(x) = t^{[d]} \theta. \quad (3.68)$$

Учитывая (3.68), можно записать следующее выражение:

$$\hat{\eta} - \eta = t^{\tau 1 d 1} (\hat{\Theta} - \Theta). \quad (3.69)$$

Найдем математическое ожидание квадрата (3.69), которое является дисперсией оценки поверхности отклика в точке $x^T = (x_1, x_2, \dots, x_p)$

$$\begin{aligned} D(\hat{\eta}(x)) &= E[(\hat{\eta} - \eta)(\hat{\eta} - \eta)^T] = \\ &= t^{\tau 1 d 1} E[(\hat{\Theta} - \Theta)(\hat{\Theta} - \Theta)^T] t^{1 d 1} = \sigma^2 t^{\tau 1 d 1} (F^T F)^{-1} t^{1 d 1}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Получим далее дисперсию оценки поверхности отклика в точке z , связанной с t ортогональным преобразованием (преобразованием поворота):

$$z = Rt,$$

учитывая при этом свойства векторов и матриц, возведенных в степень:

$$\begin{aligned} D(\hat{\eta}(z)) &= \sigma^2 z^{\tau 1 d 1} (F^T F)^{-1} z^{1 d 1} = \\ &= \sigma^2 t^{\tau 1 d 1} R^{\tau 1 d 1} (F^T F)^{-1} R^{1 d 1} t^{1 d 1} = \\ &= \sigma^2 t^{\tau 1 d 1} (R^{\tau 1 d 1} F^T F R^{1 d 1})^{-1} t^{1 d 1}. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Поскольку принцип ротатабельности требует, чтобы $D(\hat{\eta}(x)) = D(\hat{\eta}(z))$, из (3.70), (3.71) можно окончательно получить (3.66). И наоборот, если (3.66) выполнено, то (3.70) и (3.71) равны друг другу, а это означает ротатабельность планирования. ■

III. Получим теперь критерий ротатабельности в терминах элементов информационной матрицы.

Любой элемент матрицы $F^T F$ содержит величину (3.72), называемую моментом матрицы плана:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{i1}^{\alpha_1} x_{i2}^{\alpha_2} \cdots x_{ip}^{\alpha_p} = \nu(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p), \quad (3.72)$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p$ — целые числа.

На основании (3.66) уточним, чему равен момент $\nu(\alpha_1, \dots, \alpha_p)$ для ротатабельного планирования.

Из равенства величин (3.70), (3.71) нетрудно записать равенство следующих квадратичных форм:

$$U = \frac{1}{n} t^{\tau |d|} F^{\tau} F t^{|d|} = \frac{1}{n} t^{\tau |d|} R^{\tau |d|} F^{\tau} F R^{|d|} t^{|d|}. \quad (3.73)$$

Равенство (3.73) выполняется при произвольных значениях вектора t . Следовательно, расписывая (3.73) поэлементно, получим два полинома, между которыми существует равенство. Это означает, что коэффициенты при одинаковых степенях переменных должны быть равными друг другу. Из этих равенств мы и получим критерий ротатабельности в терминах моментов. В дальнейшем для определенности будем считать, что вектор t имеет компоненты

$$t^{\tau} = (1, t_1, t_2, \dots, t_p).$$

Обозначим далее через x_l следующий вектор:

$$x_l^{\tau} = (1, x_{l1}, x_{l2}, \dots, x_{lp}).$$

Тогда, как нетрудно убедиться, информационную матрицу можно представить в виде

$$F^{\tau} F = \sum_{l=1}^n x_l^{|d|} x_l^{\tau |d|}. \quad (3.74)$$

С учетом (3.74) из первого равенства в (3.73) будем иметь

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{n} t^{\tau |d|} F^{\tau} F t^{|d|} = \frac{1}{n} t^{\tau |d|} \left(\sum_{l=1}^n x_l^{|d|} x_l^{\tau |d|} \right) t^{|d|} = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n (t^{\tau} x_l x_l^{\tau} t)^d = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n (x_l^{\tau} t)^{2d} = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n (1 + t_1 x_{l1} + t_2 x_{l2} + \dots + t_p x_{lp})^{2d}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Возводя в степень $2d$ содержимое круглых скобок и производя несложные, но довольно длинные выкладки, получим следующее выражение:

$$U = \sum_{\alpha=1}^d \sum_{\{\alpha_l\}} g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) v(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) t_1^{\alpha_1} t_2^{\alpha_2} \dots t_p^{\alpha_p}, \quad (3.76)$$

где

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) = \frac{(2d)}{(2d - \alpha)! \prod_{l=1}^p \alpha_l!}, \quad (3.77)$$

σ_i — таковы, что $\sum_{i=1}^p \alpha_i = \alpha$.

С другой стороны, учитывая второе равенство в (3.73), можем получить следующее выражение:

$$U = \frac{1}{n} t^{\tau|d|} R^{\tau|d|} F^{\tau} F R^{|d|} t^{|d|} = \frac{1}{n} (Rt)^{\tau|d|} F^{\tau} F (Rt)^{|d|}. \quad (3.78)$$

Изучим внимательно (3.78). U является функцией от t и не должна зависеть от преобразования поворота R . Чтобы эти два свойства не противоречили друг другу (от вектора t перешли к вектору Rt), необходимо, чтобы (3.78) зависело не от самого вектора t , а от его длины, т. е. только величина $t^{\tau} t = \dots \sum_{i=1}^p t_i^2$ инвариантна к ортогональному преобразованию R .

Но поскольку U полином по t степени $2d$, то план будет ротатабельным, если этот полином будет иметь вид

$$U = \sum_{s=0}^d a_{2s} \left(\sum_{i=0}^p t_i^2 \right)^s, \quad (3.79)$$

где a_{2s} — некоторые константы. Возводя содержимое круглых скобок в (3.79) в степень s , можем получить следующее выражение:

$$U = \sum_{\alpha=0}^d \sum_{\{\alpha_i\}} b(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) t_1^{\alpha_1} t_2^{\alpha_2} \dots t_p^{\alpha_p}. \quad (3.80)$$

где

$$b(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) = \frac{a_{\alpha} \left(\frac{1}{2} \alpha \right)!}{\prod_{i=1}^p \left(\frac{1}{2} \alpha_i \right)!}. \quad (3.81)$$

Заметим, что

$$b(\dots) = 0, \quad (3.82)$$

если хотя бы одно число из α_i — нечетно, потому что, как видно из (3.79), в полиноме должны присутствовать лишь переменные t_i в четных степенях.

Учитывая, что (3.76), (3.80) равны друг другу, можем записать

$$v(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) \cdot g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) = b(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p),$$

откуда с учетом (3.78), (3.81), (3.82) нетрудно получить

$$v(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p) = \quad (3.83)$$

$$= \begin{cases} 0 & , \text{ если хотя бы одно из } \alpha_i \text{ нечетно,} \\ \lambda_\alpha \frac{\prod (\alpha_i)!}{2^{a/2} \prod_i \left(\frac{1}{2} \alpha_i\right)!} & , \text{ если все } \alpha_i \text{ четные;} \end{cases}$$

$$\lambda_\alpha = \frac{2^{a/2} \left(\frac{1}{2} \sigma\right)! (2d - \alpha)! a_\alpha}{(2d)!} .$$

Величины λ_α представляют собой константы, которые необходимо определять в каждом конкретном случае в зависимости от α .

§ 7. Ротатабельное планирование первого и второго порядков

I. Ранее мы получили, что ортогональный план первого порядка в то же время является ротатабельным.

Покажем теперь, что ротатабельный план первого порядка является ортогональным. Пусть имеем ротатабельный план первого порядка, т. е. $d=1$.

Следовательно, существуют все моменты до $2d=2$ порядка. В этом случае все моменты первого порядка равны нулю: $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ii} = 0$, так как соответствующая $\alpha_i = 1$, т. е. нечетная. По этой же причине все смешанные моменты второго порядка равны нулю: $\frac{1}{n} \sum x_{ii} x_{jj} = 0$, $i \neq j$. Далее, используя (3.83), легко получить, что

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ii}^2 = \lambda_2,$$

λ_2 — произвольная константа, характеризующая величины варьирования факторов. Если варьирование проводится на уровнях ± 1 , то $\lambda_2 = 1$.

Из приведенного рассмотрения видно, что матрица моментов ротatableльного планирования первого порядка имеет вид

$$\frac{1}{n} F^T F = I_{p+1},$$

т. е. ротatableльное планирование первого порядка является ортогональным.

II. Найдем форму моментов для ротatableльных планов второго порядка. Из (3.83) нетрудно получить, что четные моменты имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n x_{li}^2 = \lambda_2 = 1; \quad \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n x_{li}^4 = 3\lambda_4; \quad (3.84) \\ \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n x_{li}^2 x_{lj}^2 = \lambda_4, \end{aligned}$$

а все нечетные равны нулю.

Учитывая (3.84), можно получить матрицу моментов $\frac{1}{n}(F^T F)$ в виде табл. 8.

Таблица 8

	0	12 . . . P	11 . . . PP	12 . . . (P-1)P
0	1	0	11 . . . 1	0
1		1		
2		1		
⋮		⋮		
P	0		0	0
11	1		3λ ₄	
22	1		3λ ₄ λ ₄	
⋮	⋮	0	⋮	0
⋮	⋮		⋮	
PP	1		λ ₄ 3λ ₄	
12				λ ₄ λ ₄ 0
13				λ ₄ λ ₄ 0
⋮	0	0	0	⋮
(P-1)P				0 λ ₄

Если подсчитать определитель матрицы моментов, то увидим, что

$$\left| \frac{1}{n} (F^T F) \right| = a[(2+p)\lambda_4 - p], \quad (3.85)$$

где a — некоторая положительная константа. Поскольку определитель матрицы моментов должен быть больше нуля, из (3.85) можем получить ограничение на величину λ_4 в виде

$$\lambda_4 > \frac{p}{2+p}. \quad (3.86)$$

Неравенство (3.86) можно использовать для проверки плана на ротатабельность.

III. Рассмотрим вопрос о построении ротатабельных планов. Существуют различные способы построения ротатабельных планов. Рассмотрим один из них.

Равенство нулю нечетных моментов матрицы моментов ротатабельных планов наводит на мысль, что существует некоторая симметричность в расположении точек в факторном пространстве. Но оказывается, что не всякая симметрия приводит к ротатабельному планированию.

Теорема 5. Множество точек, равномерно расположенных на сфере радиуса r , моменты которых удовлетворяют условиям ротатабельности, нельзя использовать как план, т. к. соответствующая матрица моментов будет вырожденной.

Для доказательства этого утверждения выражение (3.87)

$$r^2 = \sum_{i=1}^n x_{il}^2, \quad l = \overline{1, n} \quad (3.87)$$

просуммируем по l и поделим обе части равенства на n . Тогда получим

$$\frac{1}{n} \sum_{l=1}^n r^2 = r^2 = \sum_{l=1}^n \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{il}^2. \quad (3.88)$$

Используя (3.84), из (3.88) будем иметь $r^2 = p$, откуда

$$r^4 = p^2. \quad (3.89)$$

Далее возведем левую и правую части (3.87) в квадрат и снова произведем операцию суммирования по l и деления на n . Тогда будем иметь

$$\frac{1}{n} \sum_{l=1}^n r^4 = r^4 = \sum_{l=1}^p \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n x_{ll}^4 + \sum_{l=1}^p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq l}}^p \frac{1}{n} x_{ll}^2 x_{lj}^2. \quad (3.90)$$

Учитывая (3.84), из (3.90) получим

$$r^4 = 3\lambda_4 p + p(p-1)\lambda_4 = \lambda_4 p(p+2). \quad (3.91)$$

Из (3.89) и (3.91) окончательно получим

$$\lambda_4 = \frac{p}{p+2},$$

откуда следует, что матрица моментов будет вырожденной, что и требовалось доказать. ■

Теорема 6. Множества точек, равнорасположенных на сферах различных радиусов, являются ротатабельным невырожденным планом второго порядка.

Доказательство. Пусть имеется S сфер и x_{sll} — элемент матрицы плана, где s — номер сферы, $s = \overline{1, S}$; l — номер точки на сфере s ; i — номер фактора. На сфере s радиуса z_s имеется n_s равнорасположенных точек, причем

$$\sum_{s=1}^S n_s = n. \quad (3.92)$$

Перепишем условия ротатабельности (3.84) плана второго порядка в новых обозначениях:

$$\frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} x_{sll}^2 = 1; \quad (3.93)$$

$$\frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} x_{sll}^4 = 3\lambda_4; \quad (3.94)$$

$$\frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} x_{sll}^2 x_{sll}^2 = \lambda_4. \quad (3.95)$$

Возьмем далее за основу следующее равенство:

$$r_s^2 = \sum_{l=1}^p x_{sll}^2. \quad (3.96)$$

Просуммируем (3.96) по s и l и поделим на n

$$\frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} r_s^2 = \frac{1}{n} \sum_{s=1}^S n_s r_s^2 = \sum_{l=1}^p \frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} x_{sll}^2. \quad (3.97)$$

Учитывая (3.93), из (3.97) будем иметь

$$\frac{1}{n} \sum_{s=1}^S n_s r_s^2 = p. \quad (3.98)$$

Далее возведем в квадрат (3.96)

$$r_s^4 = \sum_{l=1}^p x_{sll}^4 + \sum_{l=1}^p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq l}}^p x_{sll}^2 x_{slj}^2. \quad (3.99)$$

Просуммируем (3.99) по s и l и поделим на n

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} r_s^4 &= \frac{1}{n} \sum_{s=1}^S n_s r_s^4 = \sum_{l=1}^p \frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} x_{sll}^4 + \\ &+ \sum_{l=1}^p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq l}}^p \frac{1}{n} \sum_{s=1}^S \sum_{l=1}^{n_s} x_{sll}^2 x_{slj}^2. \end{aligned} \quad (3.100)$$

Подставляя (3.94), (3.95) в (3.100), получим

$$\frac{1}{n} \sum_{s=1}^S n_s r_s^4 = \lambda_4 p(p+2). \quad (3.101)$$

Из (3.98), (3.101) получим следующее выражение:

$$\lambda_4 = \frac{p}{p+2} \frac{\frac{1}{n} \sum n_s r_s^4}{\left(\frac{1}{n} \sum n_s r_s^2 \right)^2} = \frac{p}{p+2} \frac{n \sum n_s r_s^4}{(\sum n_s r_s^2)^2}. \quad (3.102)$$

Из (3.102) нетрудно увидеть, что можно подобрать величины S , n_s , r_s таким образом, чтобы выполнялось неравенство

$$\lambda_4 > \frac{p}{p+2},$$

что и доказывает теорему. ■

Например, возьмем две сферы. В одну из этих сфер радиуса $r_1 = r$ вписан правильный многогранник

с n_1 вершинами. Другая сфера имеет радиус $r_2=0$ и содержит n_0 точек. Следовательно, $n=n_1+n_0$, и

$$\lambda_4 = \frac{\rho}{\rho+2} \frac{n_1+n_0}{n_1} > \frac{\rho}{\rho+2}. \quad (3.103)$$

Таким образом, беря за основу вершины правильного многогранника в ρ -мерном пространстве и помещая в центр необходимое количество опытов (чем больше, тем менее вырождена матрица моментов), получаем ротатабельное планирование второго порядка.

§ 8. Обработка результатов эксперимента

1. Пусть согласно тому или иному критерию оптимальности мы выбрали план и, проведя эксперимент, получили совокупность N наблюдений, т. е. для каждой экспериментальной точки x_i , $i=\overline{1, n}$ факторного пространства получили величины y_{ij} , $j=\overline{1, r_i}$, где r_i — число наблюдений в точке $x_i \in \Omega_x$, причем $\sum_{i=1}^n r_i = N$.

На основании этих наблюдений необходимо оценить неизвестные параметры модели, поверхность отклика и проверить основные предположения, на которых строилась теория. При этом отметим, что вопрос о проверке основных предположений имеет самостоятельное значение и требует, вообще говоря, постановки специальных, целенаправленных экспериментов со своим критерием качества. Мы ограничимся лишь теми предположениями, которые можно проверить в рамках нашего эксперимента: проверка однородности выборочных дисперсий, проверка адекватности модели, проверка значимости параметров модели.

II. Согласно результатам, полученным в § 4 гл. I, для оценки неизвестных параметров линейной модели достаточно иметь величины

$$y_i = \frac{1}{r_i} \sum_{j=1}^{r_i} y_{ij}. \quad (3.104)$$

Поэтому, обозначив через y вектор столбец с элементами y_1, y_2, \dots, y_n , запишем (1.8), (1.18)

$$\hat{\theta} = M^{-1} F^T y, \quad \hat{\eta}(x) = f^T(x) \hat{\theta}, \quad (3.105)$$

где M —информационная матрица, имеющая вид (1.56)

$$M = \sum_{i=1}^n r_i \lambda_i f(x_i) f^T(x_i). \quad (3.106)$$

Матрица $D(\hat{\Theta})$ ковариаций оценок $\hat{\Theta}$ и дисперсия $d(x)$ оценки $\hat{\eta}(x)$ поверхности отклика записываются в виде (1.19), (1.32)

$$D(\hat{\Theta}) = \sigma^2 M^{-1}, \quad d(x) = f^T(x) D(\hat{\Theta}) f(x), \quad (3.107)$$

где σ^2 —сомножитель, с точностью до которого известна дисперсия наблюдений в точке $x \in \Omega_x$

$$D(y|x) = \frac{\sigma^2}{\lambda(x)}, \quad (3.108)$$

где $\lambda(x)$ предполагается заданной.

Формула (3.105), а следовательно и (3.107), имеют более простой вид, когда реализовано ортогональное планирование, т. к. в этом случае информационная матрица диагональная. В частности, при $\lambda(x) \equiv 1$ имеем

$$M = nI_n \quad (3.109)$$

и (3.105), (3.107) имеют вид

$$\hat{\Theta} = \frac{1}{n} F^T y; \quad D\hat{\Theta} = \frac{\sigma^2}{n} I_n; \quad d(x) = \frac{\sigma^2}{n} f^T(x) f(x). \quad (3.110)$$

III. Запишем выражение для несмещенной оценки дисперсии наблюдений в точке x_i факторного пространства

$$s_i^2 = \frac{1}{r_i - 1} \sum_{j=1}^{r_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2. \quad (3.111)$$

Введем гипотезу об однородности выборочной дисперсии, которая утверждает, что

$$E(s_i^2) = \sigma^2, \quad i = \overline{1, n}. \quad (3.112)$$

Если дисперсия наблюдений зависит от координаты точки в факторном пространстве ($\lambda(x) \neq 1$), то вместо величин y_{ij} будем рассматривать величины $y_{ij} \sqrt{\lambda(x_i)}$, т. к. с учетом (3.108) все равно будем иметь из (3.111)

$$E(s_i^2 \lambda(x_i)) = \sigma^2.$$

При проверке гипотезы учтем, что величины $\frac{s_i^2}{\sigma^2}$ независимы и имеют χ^2 распределение с $f = r_i - 1$ степенями свободы.

Гипотезу об однородности выборочной дисперсии можно проверить различными статистическими критериями. Рассмотрим критерий Фишера. Выделим меньшую и большую выборочные дисперсии

$$s_B^2 = \max_{1 < i < n} \{s_i^2\}, \quad s_M^2 = \min_{1 < i < n} \{s_i^2\}.$$

Отношение

$$F = \frac{s_B^2}{s_M^2} \quad (3.113)$$

двух независимых случайных величин, распределенных по χ^2 закону с числами степеней свободы f_1, f_2 числителя и знаменателя соответственно, имеет распределение Фишера с числами f_1, f_2 степеней свободы.

Задаваясь уровнем значимости α , ищем в таблице распределения Фишера порог F_{α, f_1, f_2} и сравниваем с ним (3.113). Если $F > F_{\alpha, f_1, f_2}$, то отвергаем гипотезу. В этом случае нельзя непосредственно пользоваться МНК-оценками. Необходимо предварительно преобразовать наблюдаемые значения по какому-либо подходящему закону и иметь дело не с самими наблюдениями, а с некоторыми функциями от них, добиваясь при этом принятия гипотезы однородности.

Если $F \leq F_{\alpha, f_1, f_2}$, то гипотезу принимаем. В этом случае величины s_i^2 являются оценками одного и того же параметра σ^2 . Общая оценка параметра σ^2 имеет вид

$$s^2 = (\sum f_i)^{-1} \sum_{i=1}^n f_i s_i^2, \quad (3.114)$$

причем $\frac{s^2}{\sigma^2}$ распределена по χ^2 -закону с $f = \sum f_i = N - n$ степенями свободы.

Если в каждой точке факторного пространства имеем одинаковое число $r > 1$ наблюдений, то гипотезу об однородности выборочных дисперсий можно проверить по критерию Кохрена. Если статистик ω

$$G = \frac{s_{\bar{y}}^2}{\sum_{i=1}^n s_i^2}$$

меньше порога $G_{\alpha, n, r-1}$, то гипотеза об однородности принимается, иначе она отвергается. Величину $G_{\alpha, n, r-1}$ находят из таблиц распределения Кохрена.

IV. Если в выбранных точках $x_i \in \Omega_x$ провели лишь по одному опыту ($r_i=1, i=\overline{1, n}$), то при оценивании величины σ^2 нельзя пользоваться формулой (3.114), т. к. невозможно получить величины $s_i^2, i=\overline{1, n}$. В этом случае необходимо воспользоваться формулой (1.53), которая получена в предположении, что структура среднего значения вектора наблюдений y известна и равна (1.3)

$$E(y) = F\theta.$$

Назовем это предположение гипотезой адекватности и получим критерий проверки этой гипотезы.

Из (1.53), с учетом (1.2), (1.5) запишем выражение для оценки s_{ag}^2 параметра σ^2 , основанное на выполнении гипотезы адекватности:

$$\begin{aligned} s_{ag}^2 &= \frac{1}{n-m} Q(\hat{\theta}) = \frac{1}{n-m} \sum_{i=1}^n \lambda_i \left(y_i - \sum_{j=1}^m f_j(x_i) \hat{\theta}_j \right)^2 = \\ &= \frac{1}{n-m} \sum_{i=1}^n \lambda_i (y_i - \hat{\eta}(x_i))^2. \end{aligned} \quad (3.115)$$

На основании теории, изложенной в § 3 гл. I, можно утверждать, что $\frac{s_{ag}^2}{\sigma^2}$ имеет χ^2 распределения с $n-m$ степенями свободы. Кстати отметим, что если реализовано насыщенное планирование, то величину s_{ag}^2 вычислить невозможно, т. к. $Q(\hat{\theta})=0, n-m=0$.

Если имеем множество наблюдений $\{y_{ij}, j=\overline{1, r_i}, i=\overline{1, n}\}$, то, как нетрудно получить из (1.53):

$$s_{ag}^2 = \frac{1}{N-m} Q(\hat{\theta}) = \frac{1}{N-m} \sum_{i=1}^n \lambda_i \sum_{k=1}^{r_i} (y_{ik} - \hat{\eta}(x_i))^2. \quad (3.116)$$

Величина (3.116), поделенная на σ^2 , имеет χ^2 распределение с $f=N-m$ степенями свободы.

Из (3.116) несложно получить

$$s_{ag}^2 = \frac{1}{N-m} \sum_{i=1}^n r_i \sum_{k=1}^{r_i} [(y_{ik} - y_i) + (y_i - \hat{\eta}(x_i))]^2. \quad (3.117)$$

При возведении в квадрат содержимого квадратных скобок в (3.117) сумма удвоенных произведений обращается в нуль. Поэтому далее можем записать

$$s_{ag}^2 = \frac{N-n}{N-m} s^2 + \frac{n-m}{N-m} \left[\frac{1}{n-m} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\eta}(x_i))^2 \right]. \quad (3.118)$$

Из (3.118) нетрудно заключить, что если гипотеза адекватности выполняется, то оценки величины σ^2 , полученные по формулам (3.114), (3.115), (3.118), должны быть примерно одинаковы, в противном случае s_{ag}^2 существенно больше величины s^2 (увеличивается вес второго слагаемого в (3.118)).

Учитывая, что $\frac{s_{ag}^2}{\sigma^2}$, $\frac{s^2}{\sigma^2}$ статистически независимы, распределены по χ^2 закону с $f_1 = \sum_{i=1}^n r_i - m$, $f_2 = \sum_{i=1}^n r_i - n$ степенями свободы соответственно, можем записать величину F критерия Фишера

$$F = \frac{s_{ag}^2}{s^2}.$$

Если $F < F_{\alpha, f_1, f_2}$, то гипотеза адекватности принимается, и мы переходим к следующему этапу обработки. Если $F > F_{\alpha, f_1, f_2}$, то она отвергается. В этом случае необходимо решать задачу подбора модели, адекватно описывающей поведение объекта исследования.

V. Найдем доверительный интервал для параметров θ_i и поверхности отклика $\eta(x)$. Для этого воспользуемся результатом (1.33), понимая под вектором C вектор с компонентами $C_i = 1$, $C_j = 0$, $j = \overline{1, m}$, $j \neq i$

$$t = \frac{(\hat{\psi} - \psi) \sigma^2}{\sqrt{D(\hat{\psi}) s^2}}.$$

Нетрудно получить доверительный интервал для t -статистики

$$P(|t| \leq t_{\alpha, f}) = 1 - \alpha, \quad (3.119)$$

где $t_{\alpha, f}$ находим из таблиц распределения Стьюдента; α —уровень значимости; f —число степеней свободы, равное числу степеней свободы величины s^2 , $f = \sum_{i=1}^n r_i -$

$-n$. Подставляя в (1.33) вместо ψ , $\hat{\psi}$ величины θ_i , $\hat{\theta}_i$, вместо $D\hat{\psi}$ дисперсию $D(\hat{\theta}_i)$ оценки параметра θ_i , которая равна диагональному элементу $D_{ii}(\hat{\theta})$ дисперсионной матрицы

$$D(\hat{\theta}_i) = D_{ii}(\hat{\theta}) = \sigma^2 [M^{-1}]_{ii},$$

получим из (3.119) следующее выражение для доверительного интервала:

$$\hat{\theta}_i - t_{\alpha, f} \sqrt{[M^{-1}]_{ii} s^2} \leq \theta_i \leq \hat{\theta}_i + t_{\alpha, f} \sqrt{[M^{-1}]_{ii} s^2}. \quad (3.120)$$

Аналогично рассуждая, можно получить доверительный интервал для поверхности отклика в произвольной точке $x \in \Omega_x$. Понимая в (1.33) под вектором S вектор $f(x)$, а значит, подставляя вместо ψ , $\hat{\psi}$, $D\hat{\psi}$ величины $\eta(x)$, $\hat{\eta}(x)$, $\sigma^2 f^T(x) M^{-1} f(x)$, получим из (3.119)

$$\begin{aligned} \hat{\eta}(x) - t_{\alpha, f} \sqrt{s^2 f^T(x) M^{-1} f(x)} \leq \\ \leq \eta(x) \leq \hat{\eta}(x) + t_{\alpha, f} \sqrt{s^2 f^T(x) M^{-1} f(x)}. \end{aligned} \quad (3.121)$$

Выражения (3.120), (3.121) записываются особенно просто при ортогональном планировании, если учесть (3.110):

$$\begin{aligned} \hat{\theta}_i - t_{\alpha, f} \sqrt{\frac{s^2}{n}} \leq \theta_i \leq \hat{\theta}_i + t_{\alpha, f} \sqrt{\frac{s^2}{n}}; \quad (3.122) \\ \hat{\eta}(x) - t_{\alpha, f} \sqrt{\frac{s^2}{n} f^T(x) f(x)} \leq \eta(x) \leq \hat{\eta}(x) + \\ + t_{\alpha, f} \sqrt{\frac{s^2}{n} f^T(x) f(x)}. \end{aligned} \quad (3.123)$$

Интервальную оценку (3.120), (3.122) можно взять за основу при проверке значимости параметра θ_i , а

именно: параметр θ_1 следует считать значимо отличающимся от нуля, если соответствующий доверительный интервал не содержит начала координат, иначе этот параметр не значимый, т. е. истинное значение параметра отличается от нуля не существенно,

§. 9. Планирование экстремальных экспериментов

I. Допустим, что интересующий нас процесс удовлетворяет соотношению

$$E(y | \bar{x}) = \eta(\bar{x}), \quad (3.124)$$

где $\eta(\bar{x})$ неизвестная, но принадлежащая определенному классу функция.

Необходимо предложить эффективную процедуру проведения эксперимента, согласно которой можно находить оптимальную точку \bar{x} в факторном пространстве дающую экстремальное значение параметра оптимизации y . За основу процедуры возьмем шаговый принцип достижения экстремума. Считаем, что в начальный момент мы находимся в точке \bar{x}_0 факторного пространства. Выбор точки \bar{x} осуществляется при анализе априорной информации. Если априори можно указать точку в факторном пространстве, в которой складываются наилучшие условия проведения эксперимента, то эту точку и нужно принимать в качестве начального приближения. Если же известна некоторая область, где существует наилучшая комбинация значений факторов, то в качестве \bar{x}_0 можно выбрать точку в центре или случайным образом любую точку из этой области. Проводим серию опытов, по результатам которых строим математическую модель процесса в окрестности точки x_0 . Используя полученную информацию, выбираем далее наилучшее направление поиска экстремума и дальнейшие опыты ставим только в этом направлении до тех пор, пока не будет происходить заметное приближение к экстремуму параметра оптимизации. В результате получим новую точку x_1 , в окрестности которой снова ставим серию опытов, строим модель, выбираем наилучшее направление, ищем новую точку \bar{x} и т. д.

Главное требование к модели (3.124)—способность предсказывать направление дальнейших опытов с тре-

буемой точностью. Будем предполагать, что $\eta(\bar{x})$ есть непрерывная, достаточно гладкая функция. Аппроксимируем неизвестную функцию $\eta(x)$ полиномом степени d

$$\eta(\bar{x}, \Theta) = \Theta_0 + \sum_{i=1}^p \Theta_i \bar{x}_i + \sum_{i,j} \Theta_{ij} \bar{x}_i \bar{x}_j + \sum_{i=1}^p \Theta_i \bar{x}_i^2 + \dots \quad (3.125)$$

Полиномиальная аппроксимация достаточно гибкая и не является значительным сужением класса непрерывных функций, т. к. под полиномом (3.125) всегда можно понимать разложение любой гладкой функции в ряд Тейлора в окрестности очередного приближения. Если начало координат поместить в эту точку, то

$$\begin{aligned} \Theta_0 &= \eta(0), \quad \Theta_i = \left. \frac{\partial \eta}{\partial \bar{x}_i} \right|_{\bar{x}=0}, \quad \Theta_{ij} = \left. \frac{\partial^2 \eta}{\partial \bar{x}_i \partial \bar{x}_j} \right|_{\bar{x}=0}, \quad \Theta_{ii} = \\ &= \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \eta}{\partial \bar{x}_i^2} \right|_{\bar{x}=0}. \end{aligned} \quad (3.126)$$

Обсудим вопрос о выборе степени d полинома. С одной стороны, чем больше d , тем более сложные функции можно аппроксимировать. С другой стороны, с увеличением степени d увеличивается число параметров, которые необходимо оценить, что, в свою очередь ведет к увеличению количества необходимых опытов. Таким образом, необходим полином такой минимальной степени d , который позволял бы адекватно описывать поведение функции отклика в окрестности исследуемой точки факторного пространства. По-видимому, эти противоречивые требования—простота модели и ее адекватность, предъявляются к любым моделям. Если исследуемая область факторного пространства достаточно далеко отстоит от оптимума, что вполне возможно на начальной стадии решения экстремальной задачи, то функцию отклика $\eta(x)$ можно аппроксимировать полиномом первой степени, т. е. гиперплоскостью в p -мерном факторном пространстве:

$$\eta(\bar{x}, \Theta) = \Theta_0 + \sum_{i=1}^p \Theta_i \bar{x}_i. \quad (3.127)$$

Здесь величины $\Theta_1, \dots, \Theta_p$ являются, как видно из (3.126), компонентами вектора-градиента.

Если очередное приближение нашей шаговой про-

цедуры оказалось в окрестности оптимума, то линейная модель (3.127) уже непригодна. В этом случае необходимо задаваться полиномом второй, а возможно, и более высокой степени.

II. Обозначим через $|\Delta_i|$ интервал варьирования по i -й переменной. Тогда можем перейти к безразмерному унифицированному факторному пространству с помощью преобразования (2.11)

$$x_i = \frac{\tilde{x}_i - \tilde{x}_{0i}}{\Delta_i}, \quad (3.128)$$

где x_i —безразмерное значение i -го фактора;

\tilde{x}_i —размерное значение i -го фактора;

\tilde{x}_{0i} —размерное значение основного уровня;

i —номер фактора.

Как указывалось в гл. II, Δ_i не может быть меньше той ошибки, с которой экспериментатор фиксирует уровень фактора. С другой стороны, интервал варьирования не может быть настолько большим, чтобы выйти за пределы области Ω_x . Слишком большой интервал варьирования может привести к тому, что рассматриваемая модель может оказаться неадекватной. Внутри этих ограничений обычно еще остается значительная неопределенность выбора Δ_i , $i=1, p$, которая устраняется с помощью интуитивных решений. С учетом (3.128) можно воспользоваться теперь планами, разработанными ранее. Поскольку наша модель (3.127) есть полином первого порядка, нам вполне достаточно, например, теории ортогонального планирования первого порядка, где используется полный факторный эксперимент или дробные реплики. Проведя эксперимент согласно выбранному плану, необходимо обработать экспериментальные данные по методике, описанной в § 6 гл. I, а именно: оценить параметры модели (3.127); найти доверительные интервалы этих параметров; проверить гипотезу об отличии этих параметров от нуля; проверить гипотезу адекватности модели (3.127). Если модель адекватна и параметры θ_i отличны от нуля, то можно двигаться вдоль направления вектора градиента $\gamma^T = [\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_p]$. Если какие-то из параметров $\theta_1 \dots \theta_p$ не значимы, то их можно приравнять нулю. В этом случае по направлению гра-

диента движемся в пространстве меньшей размерности. При этом важно подчеркнуть, что, вообще говоря существуют две причины не значимого отличия от нуля соответствующего параметра Θ_i . Во-первых, исследуемый процесс на самом деле не зависит от фактора x_i . В этом случае уменьшение размерности факторного пространства является правильным решением. Во-вторых, соответствующий интервал варьирования Δ_i выбран слишком малым и вход \tilde{x}_i не может „раскачать“ выход u до нужных размеров. В этом случае размерность факторного пространства необходимо оставить прежней и увеличить соответствующий интервал Δ_i .

Из (3.128) можно записать движение в направлении градиента (при поиске максимума) в векторном виде

$$\tilde{x}_k = \tilde{x}_0 + k \cdot \Delta \cdot \gamma, \quad (3.129)$$

где \tilde{x}_k — точка в факторном пространстве;

k — номер точки;

Δ — величина шага в направлении градиента.

Если $k=0,1,2,\dots$, имеем последовательный ряд точек в направлении градиента, начиная от точки x_0 с одинаковым расстоянием между соседними. В частности, шаг равен единице, если $\Delta = \|\gamma\|^{-1}$. С ростом k (в процессе экспериментирования) мы все дальше уходим из исследованной области, следовательно, движение к оптимуму со временем замедлится, и при каком-то k будут исчерпаны все потенциальные возможности данного направления. Обозначив полученную точку в факторном пространстве через \tilde{x}_1 и приняв ее за центр, начнем все сначала, т. е. перейдем к безразмерным переменным, выберем план эксперимента, реализуем его, обработаем экспериментальные данные, получим направление градиента и будем двигаться в данном направлении и т. д.

III. Рассмотрим теперь предложенную итеративную процедуру с точки зрения гипотезы адекватности. Очевидно, что с каждой новой итерацией центр эксперимента приближается к экстремуму. Следовательно, с каждым новым приближением модель в виде полинома первой степени становится менее адекватной (растет s_{arg}^2) и в конце концов наступит такой момент, когда модель (3.127) будет отвергнута. Это значит, что мы находимся в области экстремума и в качестве модели необходимо брать

следующую по сложности в виде полинома второго порядка и соответствующее ей планирование второго порядка. При движении к экстремуму необходимо учитывать, что теперь нам известна более сложная поверхность второго порядка.

Рассмотрим этот вопрос более подробно. Наша модель имеет вид

$$\eta = \theta_0 + \sum_{i=1}^p \theta_i \bar{x}_i + \sum_{ij=1}^p \theta_{ij} \bar{x}_i \bar{x}_j \quad (3.130)$$

и пусть для определенности мы ищем максимум. Введем вектор $\gamma^T = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p]$ и матрицу $A = [\theta_{ij}]$. Тогда (3.130) запишем

$$\eta = \theta_0 + \gamma^T \bar{x} + \bar{x}^T A \bar{x}. \quad (3.131)$$

Приведем квадратичную форму в (3.131) к каноническому виду. Для этого к переменным x применим преобразование поворота

$$\bar{x} = Bz, \quad (3.132)$$

где B —ортогональная матрица; z —новые переменные. Подставляя (3.132) в (3.131), получим

$$\eta = \theta_0 + \delta^T z + z^T \Lambda z, \quad (3.133)$$

где

$$\delta = B^T \gamma, \quad \Lambda = B^T A B. \quad (3.134)$$

Потребуем теперь, чтобы Λ была диагональной матрицей, тогда второе уравнение в (3.134) является уравнением относительно матрицы B .

Далее возможны два пути: либо матрица A —особенная, тогда некоторые из диагональных элементов матрицы Λ , являющиеся собственными числами, равны нулю, либо матрица A —неособенная, тогда все собственные числа матрицы A не равны нулю. Рассмотрим сначала случай, когда матрица A —особенная. Для определенности будем считать, что первые q диагональных элементов матрицы Λ равны нулю, т. е.

$$\eta = \theta_0 + \sum_{i=1}^p \delta_i z_i + \sum_{i=q+1}^p \Lambda_{ii} z_i^2. \quad (3.135)$$

Если допустить, что с приближением к экстремуму минимальная степень полинома, адекватно описываю-

щего процесс, растет, то становится ясным, что по первым q переменным мы еще далеко находимся от максимума и совершенно естественным является движение по переменным z_i $i=1, p$ в направлении, определяемом вектором $\gamma_z^T = [\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_q, 0, 0, \dots, 0]$, т. е. вектором-градиентом в подпространстве размерности q . С учетом (3.132) это движение выглядит следующим образом:

$$\bar{x}_k = \bar{x}_0 + k \cdot \Delta \cdot B \cdot \gamma_z, \quad (3.136)$$

где Δ — величина шага; k — номер шага.

В подпространстве размерности q двигаемся с учетом модели первого порядка до тех пор, пока она не перестанет быть адекватной. Это значит, что число собственных чисел матрицы A , равных нулю, уменьшилось. Этот процесс продолжаем до полного исчезновения особенности матрицы A .

Пусть теперь матрица A неособенная. Произведем в пространстве переменных z преобразование сдвига, т. е. перейдем к новым переменным ξ по формуле

$$z = \xi + b, \quad (3.137)$$

где b — некоторый вектор.

Подставив (3.137) в (3.133), получим

$$\eta = \Theta_0 + \delta^T b + b^T \Lambda b + (\delta + 2 \Lambda b)^T \xi + \xi^T \Lambda \xi. \quad (3.138)$$

Пусть

$$b = -\frac{1}{2} \Lambda^{-1} \delta. \quad (3.139)$$

Тогда линейная форма в (3.138) равна нулю.

Обозначив в (3.138) величины, не зависящие от z , через η_0 , получим

$$\eta = \eta_0 + \xi^T \Lambda \xi. \quad (3.140)$$

Пусть для определенности первые l диагональных элементов матрицы Λ положительные, остальные $p-l$ — отрицательные. Тогда (3.140) имеет вид

$$\eta = \eta_0 + \sum_{i=1}^l |\Lambda_{ii}| \xi_i^2 - \sum_{i=l+1}^p |\Lambda_{ii}| \xi_i^2. \quad (3.141)$$

Из (3.141) видно, что при $l=0$ первая сумма исчезает

и в результате получим поверхность второго порядка в виде эллиптического параболоида с максимумом в начале координат. Подставляя в этом случае $\xi=0$ в (3.137), получим с учетом (3.132), (3.139) координаты максимума в виде

$$\bar{x}_{\text{опт}} = B \cdot b = -\frac{1}{2} A^{-1} \gamma.$$

Остается реализовать проверочный опыт в точке $\bar{x}_{\text{опт}}$. При $l \geq 1$ получим поверхность второго порядка в виде гиперболического параболоида с седловой точкой в начале координат. Очевидно, что максимум в (3.141) достигается при $\xi_i=0$, $i=\overline{1, l, p}$ и на границе исследованной области факторного пространства по остальным переменным ξ_i , $i=\overline{1, l}$. Если допустить, что исследованная область — гиперкуб (этого всегда можно добиться, если рассматривать зависимость не от \bar{x} , а от x), то максимально крутой подъем обеспечен вдоль оси ξ_k , для которой

$$|\lambda_{kk}| = \max_{1 \leq i \leq l} |\lambda_{ii}|,$$

причем в любом из двух противоположных направлений. Переходя от переменных ξ к переменным \bar{x} , получим из (3.132), (3.133), (3.137), (3.139)

$$\bar{x} = B \xi - \frac{1}{2} A^{-1} \gamma \quad (3.142)$$

или, с учетом $\xi_k = \pm \Delta$, $\xi_i = 0$, $i=\overline{1, p}$, $i \neq k$, где Δ — величина шага вдоль ξ_k , получим из (3.142) в покомпонентной записи

$$\bar{x}_{jt} = \pm t \cdot \Delta \cdot B_{jk} - \frac{1}{2} (A^{-1} \gamma)_j, \quad j=\overline{1, p}, \quad (3.143)$$

где t — номер шага. Выбрав в (3.143) тот или иной знак и ставя опыты в точках \bar{x}_t последовательно при $t=0, 1, 2, \dots$, мы будем двигаться из седловой точки в направлении наиболее крутого подъема. Однако со временем мы выйдем из исследованной области и остановимся в некоторой точке факторного пространства, которую необходимо взять в качестве очередного приближения.

ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ

§ 1. Постановка задачи и общее решение

I. Как указывалось во введении, существует множество задач, при постановке и решении которых по тем или иным причинам не используют метрику факторного пространства. Пусть значения фактора выбираются из заданного дискретного множества. Элемент этого множества в дальнейшем мы будем называть уровнем фактора. Считаем, что уровни фактора перенумерованы в произвольной последовательности. Совокупность таких факторов образует дискретное факторное пространство, и эксперимент возможно проводить лишь в этих указанных точках факторного пространства.

Рассмотрим следующую модель объекта исследования, которую легко можно уточнить при решении задач дисперсионного анализа с конкретным числом факторов. Пусть y_1, y_2, \dots, y_n — совокупность наблюдений, причем

$$y_i = \sum_{j=1}^p x_{ji} \beta_j + e_i, \quad i = \overline{1, n}, \quad (4.1)$$

где $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ — неизвестные постоянные; $\{x_{ji}\}$ — известные постоянные; e_1, e_2, \dots, e_n — ошибки (независимые, нормально распределенные случайные величины с нулевым средним, дисперсией σ^2).

Дисперсионный анализ — это система статистических методов обработки наблюдений, допускающих представление (4.1), где коэффициенты x_{ji} являются числами „нуль“ или „единица“. Целью дисперсионного анализа является получение выводов относительно $\{e_i\}$ и некоторых $\{\beta_j\}$ выводов, остающихся справедливыми независимо от значений других $\{\beta_j\}$. Величины $\{x_{jk}\}$ имеют смысл переменных-счетчиков, переменных-указателей, которые указывают на присутствие или отсут-

ствии влияния различных факторов $\{\beta_j\}$ в условиях проводящихся наблюдений. Мы рассматриваем тот случай, когда все $\{\beta_j\}$ — неизвестные постоянные, хотя можно развить теорию и при случайных $\{\beta_j\}$.

Пример 1. Пусть исследуется влияние сорта семян на урожайность. p сортов семян высевается на приблизительно идентичных участках при одних и тех же условиях. Затем получили с различных участков различные урожаи. Урожай с i -го участка естественно представить в виде

$$y_i = \beta_i + e_i, \quad i = \overline{1, p}, \quad (4.2)$$

где β_i — вклад в урожай за счет i -го сорта — средняя составляющая вклада. Получили модель с одним фактором, которым является сорт семян. Необходимо ответить на вопрос: различия в урожаях случайны или связаны с различиями в сортах семян? Вводя $x_{ji} = \delta_{ji}$, где δ_{ji} — символ Кронекера, получим

$$y_i = \sum_{j=1}^p x_{ji} \beta_j + e_i,$$

что соответствует соотношению (4.1).

Пример 2. Теперь пусть исследуется влияние на урожай сорта семян и типа почвы. Имеется p сортов семян и q типов почв. Если через y_{ij} обозначить урожайность на участке, засеянном i -м сортом семян и имеющем j -й тип почв, то получим

$$y_{ij} = \gamma_i + \delta_j + e_{ij}, \quad i = \overline{1, p}, \quad j = \overline{1, q}, \quad (4.3)$$

где γ_i — вклад в урожай за счет i -го сорта семян; δ_j — вклад в урожай за счет j -го типа почвы; e_{ij} — случайная составляющая вклада в урожай. Получили модель с двумя факторами. Необходимо обработать экспериментальные данные с целью ответа на вопросы о влиянии сорта семян и типа почв на урожайность. Переходя от двойной индексации i, j к индексу $k = p(i-1) + j$, мы легко переходим к выражению $y_k = \beta_k + e_k$, где $y_k = y_{ij}$; $\beta_k = \gamma_i + \delta_j$; $e_k = e_{ij}$; $k = \overline{1, p \cdot q}$, т. е. рассматриваемую модель привели к виду, рассматривавшемуся в примере 1.

II. Дисперсионный анализ отвечает на вопросы типа: и а что ли влияние факторов или их комбинаций на

объект исследования и какова достоверность полученного результата?

Для ответа на вопросы дисперсионного анализа существует такой достаточно хорошо разработанный аппарат математической статистики, как проверка статистических гипотез. Если мы хотим проверить гипотезу о том, что некоторые из факторов не действуют, то это значит, что мы хотим проверить гипотезу о равенстве нулю соответствующих коэффициентов из $\{\beta_j\}$ или их линейных комбинаций. Определим более четко нашу гипотезу. Пусть y — вектор наблюдений y_1, y_2, \dots, y_n . Плотность распределения $p(y)$ вектора y известна с точностью до параметров Θ . Обозначим через Ω пространство параметров Θ , через $\omega \subset \Omega$, $\Theta \in \Omega$. Введем сложную гипотезу $H: \Theta \in \omega$. При проверке этой гипотезы будем пользоваться обобщенным отношением правдоподобия, которое записывается в виде

$$\lambda = \frac{\max_{\Theta \in \omega} p(y)}{\max_{\Theta \in \Omega} p(y)}. \quad (4.4)$$

Если $\lambda < \lambda_0$, то гипотеза H отвергается, если $\lambda > \lambda_0$, то гипотеза H принимается. При довольно общих ограничениях критерий обобщенного отношения правдоподобия состоятелен, т. е. вероятности ошибок стремятся к нулю при объеме выборки, стремящемся к бесконечности.

III. Для упрощения записи дальнейших выкладок введем соответствующие векторы и матрицу

$$y^T = [y_1, y_2, \dots, y_n], \quad \beta^T = [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p], \quad e^T = [e_1, e_2, \dots, e_n];$$

$$X = [X_{ji}], \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, p}.$$

Тогда уравнения (4.1) примут вид

$$y = X^T \beta + e, \quad (4.5)$$

причем

$$E(e) = 0, \quad E(e \cdot e^T) = \sigma^2 I_n. \quad (4.6)$$

Предполагая, что e — вектор независимых нормально распределенных величин, запишем плотность распределения вектора наблюдений y

$$p(y) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} (y - X^T\beta)^T (y - X^T\beta)\right\}. \quad (4.7)$$

В качестве параметров максимизации в (4.4) служат компоненты вектора β и величина σ^2 .

Нам необходимо найти $\max_{\beta \in \omega} p(y)$ и $\max_{\theta \in \Omega} p(y)$. Максимум будем искать в два этапа. Сначала ищем его, выбирая параметр $\{\beta_i\}$, а затем и σ^2 . Нетрудно видеть, что при максимизации по $\{\beta_i\}$

$$\max_{\{\beta_i\}} p(y) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \min_{\{\beta_i\}} (y - X^T\beta)^T (y - X^T\beta)\right\}. \quad (4.8)$$

Обозначим

$$\min_{\beta \in \Omega} (y - X^T\beta)^T (y - X^T\beta) = S_{\Omega}; \quad (4.9)$$

$$\min_{\beta \in \omega} (y - X^T\beta)^T (y - X^T\beta) = S_{\omega}. \quad (4.10)$$

Очевидно, что минимальное значение в (4.9), (4.10) достигается, если в качестве β возьмем соответствующую МНК-оценку, причем в (4.9) используется обычная МНК-оценка, в (4.10) — МНК-оценка с учетом ограничений, накладываемых гипотезой H .

При проверке гипотез относительно параметров β будем предполагать, что мы проверяем лишь гипотезы относительно некоторых линейных комбинаций параметров β , т. е. существует матрица $C = [C_{ij}]$, $i = \overline{1, q}$, $j = \overline{1, p}$ и вектор $\psi^T = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_q]$, связанные соотношением:

$$\psi = C\beta, \quad (4.11)$$

тогда

$$H: \psi = 0. \quad (4.12)$$

Задавая соответствующим образом матрицу C , мы будем проверять гипотезы относительно интересующих нас комбинаций параметров β . В частности, при $p = q$, $C = I_p$, $\psi = \beta$ гипотеза H утверждает, что $\beta = 0$, т. е. все факторы не влияют на объект исследования. Теперь можно сказать, что минимальное значение в (4.10) достигается, если в качестве β возьмем МНК-оценку параметров β с учетом линейных ограничений (4.11), (4.12).

Подставляя (4.9), (4.10) в (4.8), получим

$$\max_{\sigma^2, \beta \in \Omega} p(y) = \max_{\sigma^2} (2\pi\sigma^2)^{-\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{S_{\Omega}}{2\sigma^2}\right\}. \quad (4.13)$$

Приравнивая производную логарифма (4.13) нулю, получим оптимальное значение σ^2

$$\frac{d}{d\sigma^2} \ln p(y) = \frac{d}{d\sigma^2} \left(-\frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2} \frac{S_{\Omega}}{\sigma^2} \right) = -n + \frac{S_{\Omega}}{\sigma^2} = 0,$$

$$\sigma^2 = \frac{S_{\Omega}}{n}. \quad (4.14)$$

Подставляя (4.14) в (4.13), получим

$$\max_{\theta \in \Omega} p(y) = \left(\frac{2\pi S_{\Omega}}{n} \right)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2}n}. \quad (4.15)$$

Аналогично получим решение и во втором случае

$$\max_{\theta \in \omega} p(y) = \left(\frac{2\pi S_{\omega}}{n} \right)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{2}n}. \quad (4.16)$$

Подставляя (4.15), (4.16) в (4.4), получим окончательное выражение для λ -критерия

$$\lambda = \left(\frac{S_{\omega}}{S_{\Omega}} \right)^{-\frac{n}{2}}. \quad (4.17)$$

Обычно пользуются не λ -критерием а F -критерием

$$F = \frac{n-r}{q} \frac{S_{\omega} - S_{\Omega}}{S_{\Omega}}, \quad (4.18)$$

причем, как нетрудно проверить, F является монотонной функцией λ

$$F = \frac{n-r}{q} \left(\lambda^{-\frac{2}{n}} - 1 \right),$$

т. е. λ -критерий и F -критерий эквивалентны в смысле равенства вероятностей ошибок. В (4.18) r — ранг матрицы X ; q — число линейно-независимых связей, накладываемых гипотезой H .

Соотношение (4.18) было получено в § 5 гл. I иным способом и имеет две эквивалентные формы записи (1.79), (4.18), используемые при конкретном применении дисперсионного анализа. Показано (1.79), что величина (4.18) имеет распределение Фишера-Снедекора с q , $n-r$ степенями свободы. Поэтому из таблиц F -распределения по заданному уровню значимости α , числам степеней свободы $f_1 = q$, $f_2 = n-r$ находим $F_{\alpha, q, n-r}$ и сравниваем с ним величину критерия F . Если $F < F_{\alpha, q, n-r}$, то гипотеза H принимается, если $F > F_{\alpha, q, n-r}$, то гипотеза H отвергается.

§ 2. Однофакторный дисперсионный анализ

1. Задача однофакторного анализа возникает при сравнении средних значений нескольких одномерных выборок:

$$y_{ij} = \beta_i + e_{ij}; \quad i = \overline{1, p}; \quad j = \overline{1, n_i}; \quad \sum_{i=1}^p n_i = n, \quad (4.19)$$

где n_i — объем выборки, связанной с i -м уровнем фактора; n — общее число наблюдений. Случайные величины $\{e_{ij}\}$ — независимые, нормально распределены с нулевым средним и дисперсией σ^2 . Необходимо проверить гипотезу H о том, что $\beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_p = \beta_0$, где β_0 — неизвестное число.

Применим общее решение задачи дисперсионного анализа, полученное в предыдущем параграфе. Параметрическое пространство Ω состоит из множества различных действительных чисел $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ и положительного числа σ^2 . Подпространство ω состоит из множества равных чисел $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ и положительного числа σ^2 . Следовательно, можем записать $S_\omega = \min \sum (y_{ij} - \beta_0)^2$, $S_\Omega = \min_{\{\beta_i\}} \sum_{ij} (y_{ij} - \beta_i)^2$. Применяя теорию МНК-оценок, или, что то же самое, дифференцируя суммы в выражениях S_ω , S_Ω по β_0 , β_i соответственно, несложно получить

$$\hat{\beta}_0 = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=1, p \\ j=1, n}} y_{ij}; \quad \hat{\beta}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}.$$

Удобно обозначать усреднение по соответствующему индексу звездочкой на месте этого индекса, т. е. можем записать

$$\hat{\beta}_i = y_{i*}, \quad i = \overline{1, p};$$

$$\hat{\beta}_0 = \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{n} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{n_i} y_{ij} = \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{n} y_{i*} = y_{**}.$$

В результате получим

$$S_{\omega} = \sum_{ij} (y_{ij} - y_{**})^2, \quad S_{\Omega} = \sum_{ij} (y_{ij} - y_{i*})^2, \quad (4.20)$$

откуда нетрудно найти выражение для разности

$$\begin{aligned} S_{\omega} - S_{\Omega} &= \sum_{ij} [(y_{ij} - y_{**})^2 - (y_{ij} - y_{i*})^2] = \\ &= \sum_{ij} [((y_{ij} - y_{i*}) + (y_{i*} - y_{**}))^2 - (y_{ij} - y_{i*})^2] = \\ &= 2 \sum_i (y_{i*} - y_{**}) \sum_j (y_{ij} - y_{i*}) + \sum_i (y_{i*} - y_{**})^2. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Учитывая, что

$$\sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - y_{i*}) = n_i \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{n_i} (y_{ij} - y_{i*}) = n_i (y_{i*} - y_{i*}) = 0,$$

первое слагаемое в (4.21) обращается в нуль. Суммируя во втором слагаемом в (4.21) по j , получим

$$S_{\omega} - S_{\Omega} = \sum_{i=1}^p n_i (y_{i*} - y_{**})^2. \quad (4.22)$$

Обозначая $S^2 = S_{\omega}$, $S_1^2 = S_{\omega} - S_{\Omega}$, $S_2^2 = S_{\Omega}$, получим из (4.22)

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2.$$

Величину S^2 можно назвать *общей дисперсией*. Она характеризует рассеяние наблюдений относительно общего среднего y_{**} . Величина S_1^2 называется *дисперсией между группами*. Она характеризует рассеяние наблюдений, связанное с управляемым фактором. Величина S_2^2 называется *составной дисперсией внутри групп*. Характеризует рассеяние наблюдений внутри групп относительно своего среднего y_{i*} и связанное со случайной составляющей.

В рассматриваемом случае одного фактора матрица X общей модели дисперсионного анализа (4.1) имеет p строк и n столбцов, причем первые n_1 столбцов одинаковы и каждый из них равен α_1 , каждый из следующих n_2 столбцов равен α_2 и т. д., где α_i — i -я строка единичной матрицы I_p . Таким образом, ранг матрицы X равен p , $r=p$.

Гипотеза H о равенстве средних значений может быть записана в иной, эквивалентной форме, т. е. $H: \beta_2 - \beta_1 = 0, \beta_3 - \beta_1 = 0, \dots, \beta_p - \beta_1 = 0$, откуда видно, что гипотеза накладывает на p параметров $p-1$ линейно независимых связей. Следовательно, $q=p$. Тогда F -статистика в рассматриваемом случае имеет вид

$$F = \frac{S_1^2/p-1}{S_2^2/n-p},$$

и если $F < F_{\alpha, p-1, n-p}$, то гипотеза о равенстве средних принимается, если $F > F_{\alpha, p-1, n-p}$ — отвергается.

II. Если результатом проверки гипотезы H является вывод о том, что гипотеза H принимается, т. е. фактор не влияет на изучаемое явление, то исследования на этом заканчиваются (все β_i равны друг другу). Но если гипотеза H отвергается, то констатация факта, что не все β_i равны друг другу, обычно не устраивает исследователя. Возникают вопросы о преимущественном влиянии того или иного уровня фактора, о ранжировании уровней факторов по степени влияния и т. д. В этом смысле однофакторный дисперсионный анализ часто называют классификацией данных по одному признаку. В дисперсионном анализе развиты методы обработки для получения этой дополнительной информации. Их называют методами множественного сравнения.

Определение 1. Функция $\psi = \sum_{i=1}^p C_i \beta_i$ называется сравнением параметров, если $\sum_{i=1}^p C_i = 0$.

Множество всех сравнений определяется множеством значений величин C_i , $i=1, p$. Например, $C_j = +1$, $C_k = -1$, $C_i = 0$, $i \neq j, k$. В этом случае $\psi = \beta_j - \beta_k$. Гипотеза о сравнениях утверждает, что сравнения равны нулю, т. е.

$$\psi = \sum_{i=1}^p C_i \beta_i = 0.$$

Эту гипотезу удобно проверять с помощью доверительных интервалов, т. е. если доверительный интервал величины ψ содержит нуль, то гипотеза о сравнениях принимается, иначе эта гипотеза отвергается. Доверительный интервал функции ψ получен в § 5 гл. I. Перепишем формулу (1.91) для нашего случая, учтя, что p величин C_1, C_2, \dots, C_p , входящие в выражение для ψ , связаны друг с другом одним линейным уравнением

$$\sum_{i=1}^p C_i = 0$$

$$\sum_i C_i \hat{\beta}_i - \sqrt{S_2^2(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p} C^T D C} < \sum_{i=1}^p C_i \beta_i \leq \sum_i C_i \hat{\beta}_i + \sqrt{S_2^2(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p} C^T D C}, \quad (4.23)$$

где $\sigma^2 D$ — матрица ковариаций оценок $\hat{\beta}_i, i = \overline{1, p}$. Не сложно показать, что $\hat{\beta}_i = y_{i*}$ $i = \overline{1, p}$ — независимые случайные величины, т. е. $\text{cov}(\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_{k*}) = \frac{\sigma^2}{n_i} \delta_{ik}$. Тогда система неравенств (4.23) имеет более простой вид

$$\sum_i C_i \hat{\beta}_i - \sqrt{S_2^2(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p} \sum_i \frac{1}{n_i} C_i^2} < \sum_i C_i \beta_i \leq \sum_i C_i \hat{\beta}_i + \sqrt{S_2^2(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p} \sum_i \frac{1}{n_i} C_i^2}. \quad (4.24)$$

Выражение (4.24) имеет [более компактный вид, если учесть, что

$$\begin{aligned} \hat{\psi} &= \sum_i C_i \hat{\beta}_i; \quad \sigma_{\hat{\psi}}^2 = \sigma^2 \sum_i \frac{C_i^2}{n_i}; \quad \sigma_{\hat{\psi}} = \sqrt{\sigma^2 \sum_i \frac{C_i^2}{n_i}} \\ &= \sqrt{\frac{S_2^2}{n-p} \sum_i \frac{C_i^2}{n_i}}; \end{aligned}$$

$$\hat{\psi} - \sqrt{(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p} \sigma_{\hat{\psi}}^2} \leq \psi \leq \hat{\psi} + \sqrt{(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p} \sigma_{\hat{\psi}}^2}. \quad (4.25)$$

В качестве примера рассмотрим гипотезу о равенстве $\beta_k = \beta_j$. Тогда нетрудно записать $\psi = \sum_{i=1}^p C_i \beta_i$, где $C_k = 1$, $C_j = -1$, $C_i = 0$, $i \neq k, j$. Выражение (4.25) примет вид

$$\begin{aligned}
 (\hat{\beta}_k - \hat{\beta}_j) & \sqrt{(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p}} \sqrt{\frac{S_2^2}{n-p} \left(\frac{1}{n_k} + \frac{1}{n_j} \right)} < \beta_k - \beta_j \leq \\
 & \leq (\hat{\beta}_k - \hat{\beta}_i) + \sqrt{(p-1)F_{\alpha, p-1, n-p}} \sqrt{\frac{S_2^2}{n-p} \left(\frac{1}{n_k} + \frac{1}{n_j} \right)}.
 \end{aligned}$$

§ 3. Двухфакторный дисперсионный анализ

I. Теперь рассмотрим случай, когда на объект исследования влияют два фактора A и B . Фактор A имеет p уровней, фактор B имеет q уровней. Получающуюся схему можно уложить в виде таблицы с двумя входами — двухфакторная таблица. Пусть по первому входу имеем i -й уровень фактора A , $i=1, \dots, p$, по второму входу — j -й уровень фактора B . Пара (i, j) образует ячейку двухфакторной таблицы. Если в каждой ячейке присутствует по крайней мере одно наблюдение, то возможен полный двухфакторный дисперсионный анализ (в отличие от неполного, когда не в каждой из ячеек имеются наблюдения). Наблюдения в ячейке (i, j) имеют среднее значение η_{ij} . Величина η_{ij} зависит как от уровня фактора A , так и от уровня фактора B . В самом общем виде

$$\eta_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij}, \quad (4.26)$$

где μ — общее среднее, не зависящее от уровней факторов A и B ; α_i — главный эффект i -го уровня фактора A ; β_j — главный эффект j -го уровня фактора B ; γ_{ij} — взаимодействие i -го уровня фактора A и j -го уровня фактора B .

Не все уровни факторов одинаково важны. Это можно учесть за счет введения весовых коэффициентов, $\{v_i\}$ — веса уровней фактора A , $v_i \geq 0$, $\sum_i v_i = 1$, $\{\omega_j\}$ — веса уровней фактора B , $\omega_j \geq 0$, $\sum_j \omega_j = 1$.

Введем ограничения на вновь введенные параметры μ , α_i , β_j , γ_{ij} . Обозначим через $A_i = \sum_j \omega_j \eta_{ij} = \eta_{i*}$ — среднее i -го уровня фактора A , через $B_j = \sum_i v_i \eta_{ij} = \eta_{*j}$ — среднее j -го уровня фактора B . Тогда общее среднее имеет вид

$$\mu = \sum \omega_j B_j = \sum_i v_i A_i = \sum_{ij} v_i \omega_j \gamma_{ij} = \gamma_{**}. \quad (4.27)$$

Тогда $\alpha_i = A_i - \mu$ и главный эффект i -го уровня фактора A есть превышение среднего i -го уровня фактора A над общим средним, $\beta_j = B_j - \mu$ и β_j есть превышение среднего j -го уровня фактора B над общим средним. Очевидно, что

$$\alpha_i = \gamma_{i*} - \gamma_{**}; \quad \beta_j = \gamma_{*j} - \gamma_{**}. \quad (4.28)$$

Из уравнения (4.26) получим выражение для γ_{ij}

$$\gamma_{ij} = \gamma_{ij} - \mu - \alpha_i - \beta_j = \gamma_{ij} - \gamma_{i*} - \gamma_{*j} + \gamma_{**}. \quad (4.29)$$

Множество параметров $\{\gamma_{ij}\}$ содержит $p \cdot q$ элементов, а множество параметров μ , $\{\alpha_i\}$, $\{\beta_j\}$, $\{\gamma_{ij}\}$ содержит $p \cdot q + p + q + 1$ элементов. В то же время между ними существует $p \cdot q$ равенств (4.26). Следовательно, на $p \cdot q + p + q + 1$ элементов должно быть наложено $p + q + 1$ линейных связей. Пойдем эти связи. На p параметров α_i наложена одна линейная связь, т. к. $\sigma_* = \sum_i v_i \alpha_i = \gamma_{**} - \gamma_{**} = 0$. На q параметров β_j наложена также одна линейная связь: $\beta_* = \sum_j \omega_j \beta_j = \gamma_{**} - \gamma_{**} = 0$. Параметры γ_{ij} удовлетворяют $p + q$ ограничениям, т. к. нетрудно получить $\gamma_{i*} = 0$, $i = \overline{1, p}$, $\gamma_{*j} = 0$, $j = \overline{1, q}$, $\gamma_{**} = 0$. Однако последнее ограничение является линейной комбинацией первых двух, т. к. $\gamma_{**} = \sum_i v_i \gamma_{i*} = 0$. Кроме того, среди первых $p + q$ ограничений, накладываемых на параметры γ_{ij} , линейно независимыми являются лишь $p + q - 1$, т. е. одна связь между параметрами γ_{ij} продублирована дважды. Покажем это. Пусть

$$\gamma_{*j} = \sum_{i=1}^p v_i \gamma_{ij} = 0, \quad j = \overline{1, q}; \quad (4.30)$$

$$\gamma_{i*} = \sum_{j=1}^q \omega_j \gamma_{ij} = 0, \quad i = \overline{2, p}. \quad (4.31)$$

Покажем, что $(p + q - 1)$ соотношений (4.30), (4.31) достаточно, чтобы $\gamma_{i*} = 0$. Умножая (4.30) на ω_j и суммируя по j , получим

$$\gamma_{**} = \sum_{i,j} v_i \omega_j \gamma_{ij} = v_1 \sum_{j=1}^q \omega_j \gamma_{1j} + \sum_{i=2}^p v_i \sum_{j=1}^q \omega_j \gamma_{ij} = 0. \quad (4.32)$$

С учетом (4.31) второе слагаемое в (4.32) равно нулю, следовательно $\gamma_{1*} = \sum_{j=1}^q \omega_j \gamma_{1j} = 0$.

Подводя итог, можем сделать вывод, что $p \cdot q$ -мерное линейное параметрическое пространство, порожденное параметрами $\{\gamma_{ij}\}$, распадается на четыре линейных ортогональных подпространства: одномерное подпространство, порожденное параметром μ ; $(p-1)$ -мерное подпространство, порожденное параметрами $\{\alpha_i\}$; $(q-1)$ -мерное подпространство, порожденное параметрами $\{\beta_j\}$; $(p-1)(q-1)$ -мерное подпространство, порожденное параметрами $\{\gamma_{ij}\}$. Иначе говоря, среди параметров μ , $\{\alpha_i\}$, $\{\beta_j\}$, $\{\gamma_{ij}\}$ имеются линейно независимые: один параметр μ ; $p-1$ параметров $\{\alpha_i\}$; $q-1$ параметров $\{\beta_j\}$ и $p \cdot q - p - q + 1 = (p-1)(q-1)$ параметров $\{\gamma_{ij}\}$. В дальнейшем будем предполагать для простоты, что весовые коэффициенты $\{\nu_i\}$ и $\{\omega_j\}$ равны друг другу в своем множестве, т. е. $\nu_i = \frac{1}{p}$, $\omega_j = \frac{1}{q}$.

II. Рассмотрим двухфакторный дисперсионный анализ с равными числами наблюдений в ячейке, т. е.

$$y_{ijk} = \eta_{ij} + e_{ijk}, \quad i = \overline{1, p}, \quad j = \overline{1, q}, \quad k = \overline{1, K}, \quad K > 1.$$

Общий объем наблюдений равен $n = p \cdot q \cdot K$. Найдем величину S_{Σ} , которая обязательно присутствует при проверке любых гипотез в дисперсионном анализе. Минимизируя величину $\sum_{i,j,k} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2$ по $\{\eta_{ij}\}$, т. е. беря производные от этой суммы по η_{ij} и приравнивая их нулю и решая полученную систему уравнений, получим МНК-оценки параметров η_{ij}

$$\hat{\eta}_{ij} = \frac{1}{K} \sum_k y_{ijk} = y_{ij*}. \quad (4.33)$$

При этом

$$S_{\Sigma} = \min_{\{\eta_{ij}\}} \sum_{i,j,k} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2 = \sum_{i,j,k} (y_{ijk} - y_{ij*})^2.$$

Учитывая связь величин μ , α_i , β_j , γ_{ij} , η_{i*} , η_{*j} , η_{**} с величинами $\{\eta_{ij}\}$, нетрудно получить МНК-оценки этих параметров

$$\hat{\eta}_{i*} = \sum_j \omega_j \hat{\eta}_{ij} = \sum_j \omega_j y_{ij*} = y_{i**}; \quad \hat{\eta}_{*j} = y_{*j*}, \quad \hat{\eta}_{**} = y_{***};$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_i &= \hat{\eta}_{i**} - \bar{y}_{**i}; & \hat{\alpha}_i &= \hat{\eta}_{i**} - \bar{\eta}_{i**} = y_{i**} - y_{**i}; & (4.34) \\ \hat{\beta}_j &= \hat{\eta}_{*j} - \bar{\eta}_{**} = y_{*j} - y_{**}; & \hat{\gamma}_{ij} &= \hat{\eta}_{ij} - \hat{\eta}_{i*} - \hat{\eta}_{*j} + \bar{\eta}_{**} = \\ & & &= y_{ij} - y_{i**} - y_{*j} - y_{**}. \end{aligned}$$

Из (4.34) нетрудно получить следующие ограничения на оценки:

$$\hat{\alpha}_i = y_{**i} - y_{**} = 0; \quad \hat{\beta}_j = 0; \quad \hat{\gamma}_{*j} = 0; \quad \hat{\gamma}_{i*} = 0,$$

т. е. МНК-оценки $\hat{\alpha}_i$, $\hat{\beta}_j$, $\hat{\gamma}_{ij}$ линейно зависимы.

В двухфакторном дисперсионном анализе при исследовании влияния факторов A и B представляют интерес три типа статистических гипотез:

$$H_A: \alpha_i = 0, \quad i = \overline{1, p};$$

$$H_B: \beta_j = 0, \quad j = \overline{1, q};$$

$$H_{AB}: \gamma_{ij} = 0, \quad i = \overline{1, p}, \quad j = \overline{1, q}.$$

При проверке этих трех гипотез необходимо искать $\min_{\omega} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2$, где $\omega = \omega_A$ — для гипотезы H_A , $\omega = \omega_B$ — для гипотезы H_B , $\omega = \omega_{AB}$ — для гипотезы H_{AB} , причем ω_A , ω_B , ω_{AB} — это такие подмножества множества Ω совокупности параметров $\{\eta_{ij}\}$, которые определяются ограничениями $\alpha_i = 0$, $i = \overline{1, p}$, $\beta_j = 0$, $j = \overline{1, q}$, $\gamma_{ij} = 0$, $i = \overline{1, p}$, $j = \overline{1, q}$ соответственно. Предполагая, что $K > 1$, представим минимизируемую сумму в более удобном виде

$$\sum_{ijk} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2 = \sum_{ijk} [(y_{ijk} - \hat{\eta}_{ij}) + (\hat{\eta}_{ij} - \eta_{ij})]^2. \quad (4.35)$$

Возводя в квадрат из (4.35), получим

$$\sum_{ijk} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2 = \sum_{ijk} (y_{ijk} - \hat{\eta}_{ij})^2 + \sum_{ijk} (\hat{\eta}_{ij} - \eta_{ij})^2. \quad (4.36)$$

Сумма удвоенных произведений при возведении в квадрат обращается в нуль, т. е.

$$\begin{aligned} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \hat{\eta}_{ij})(\hat{\eta}_{ij} - \eta_{ij}) &= \sum_{ij} (\hat{\eta}_{ij} - \eta_{ij}) \sum_k (y_{ijk} - \hat{\eta}_{ij}) = \\ &= \sum_{ij} (\hat{\eta}_{ij} - \eta_{ij}) K (y_{i**} - y_{i**}) = 0. \end{aligned}$$

Учитывая, что первое слагаемое в (4.36) есть S_{Ω} , а также (4.26), получим

$$\sum_{ijk} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2 = S_{\Omega} + K \sum_{ij} [(\hat{\mu} - \mu) + (\hat{\alpha}_i - \alpha_i) + (\hat{\beta}_j - \beta_j) + (\hat{\gamma}_{ij} - \gamma_{ij})]^2. \quad (4.37)$$

Возводя в квадрат и учитывая, что сумма произведений различных слагаемых из (4.37) равна нулю (это легко проверяется), получим

$$\sum_{ijk} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2 = S_{\Omega} + S', \quad (4.38)$$

где

$$S' = Kpq(\hat{\mu} - \mu)^2 + Kq \sum_i (\hat{\alpha}_i - \alpha_i)^2 + Kp \sum_j (\hat{\beta}_j - \beta_j)^2 + K \sum_{ij} (\hat{\gamma}_{ij} - \gamma_{ij})^2. \quad (4.39)$$

Из (4.39) нетрудно получить интересующий нас числитель F отношения для любой из гипотез H_A, H_B, H_{AB} . Обозначим через S_A^2 разность $S_{\omega_A} - S_{\Omega}$. Тогда, минимизируя величину S' (4.39) по параметрам $\mu, \{\beta_j\}, \{\gamma_{ij}\}$, при $\alpha_i = 0$ получим

$$S_A^2 = qK \sum_i \hat{\alpha}_i^2 = qK \sum_i (y_{i**} - y_{***})^2. \quad (4.40)$$

Аналогично обозначая $S_B^2 = S_{\omega_B} - S_{\Omega}$, $S_{AB}^2 = S_{\omega_{AB}} - S_{\Omega}$, получим

$$S_B^2 = pK \sum_j \hat{\beta}_j^2 = pK \sum_j (y_{.j.} - y_{...})^2; \quad (4.41)$$

$$\hat{S}_{AB}^2 = K \sum_{ij} \hat{\gamma}_{ij}^2 = K \sum_{ij} (y_{ij.} - y_{i..} - y_{.j.} + y_{...})^2. \quad (4.42)$$

Введем гипотезу H_0 о том, что факторы A и B не влияют на исследуемый объект, т.е. $H_0 = H_A \cap H_B \cap H_{AB}$. Тогда получим

$$S_{\omega_0} = \min_{\mu} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \mu)^2 = \sum_{ijk} (y_{ijk} - y_{...})^2.$$

Причем числитель F отношения, как это нетрудно увидеть из (4.39), приравнивая $\alpha_i, \beta_j, \gamma_{ij}$ нулю, равен

$$S_0^2 = S_{\omega_0} - S_{\Omega} = S_A^2 + S_B^2 + S_{AB}^2.$$

Следовательно, обозначая через S^2 общие вариации

выхода относительно среднего $y_{...}$, т. е. $S^2 = S_{\omega_0}$, получим

$$S^2 = S_e^2 + S_A^2 + S_B^2 + S_{AB}^2, \quad (4.43)$$

где $S_1^2 = S_{\omega}$ — вклад в вариации выхода, связанный с помехой e_{ijk} ; S_A^2 — вклад в вариации выхода, связанный с главными эффектами фактора A ; S_B^2 — вклад в вариации выхода, связанный с главными эффектами фактора B ; S_{AB}^2 — вклад в вариации выхода, связанный с взаимодействиями факторов A и B .

Если учесть результаты, полученные в § 4 гл. I, то обнаружим, что $\frac{1}{\sigma^2} S_A^2$, $\frac{1}{\sigma^2} S_B^2$, $\frac{1}{\sigma^2} S_{AB}^2$, $\frac{1}{\sigma^2} S_e^2$ являются независимыми случайными величинами, имеющими χ^2 распределение с числами степеней свободы, равными

$$f_A = p - 1; \quad f_B = q - 1; \quad f_{AB} = (p - 1)(q - 1); \quad f_e = n - p \cdot q.$$

Величина $f_A = p - 1$ получена следующим образом:

$\frac{1}{\sigma^2} S_A^2$ представляет собой сумму квадратов $(p - 1)$ неза-

висимых нормальных случайных величин $\hat{\alpha}_i / \sigma$ с нулевым средним значением и единичной дисперсией. Последняя недостающая случайная величина является линейной функцией $(p - 1)$ первых и может быть найдена из соотношения $\hat{\alpha}_{*} = 0$. Точно также можно объяснить и остальные f_B , f_{AB} , f_e . Из всего сказанного можно вывести правило, что число степеней свободы определяется разностью между числом случайных величин, входящих в сумму, и числом линейных ограничений, накладываемых на эти величины.

В частности, величина S^2 имеет χ^2 распределение с $f = n - 1$ степенями свободы, т. к. в формуле

$$S^2 = \sum_{ijk} (y_{ijk} - y_{...})^2$$

на величины y_{ijk} накладывается одно линейное ограничение

$$y_{...} = \mu.$$

Иначе и не может быть, потому что сумма независимых величин, распределенных по χ^2 закону, имеет χ^2

распределение. При этом число степеней свободы суммы случайных величин равно сумме чисел степеней свободы слагаемых, т. е.

$$f = f_e + f_A + f_B + f_{AB}. \quad (4.44)$$

Подставляя в (4.44) числа, получаем тождество. Таким образом, при проверке гипотезы H_A сравниваем с порогом $F_{\alpha, p-1, n-p \cdot q}$ величину

$$F_A = \frac{S_{A_i}^2 / (p-1)}{S_{e_i}^2 / (n-p \cdot q)};$$

при проверке гипотезы H_B сравниваем с порогом $F_{\alpha, q-1, n-p \cdot q}$ величину

$$F_B = \frac{S_{B_i}^2 / (p-1)}{S_{e_i}^2 / (n-p \cdot q)};$$

при проверке гипотезы H_{AB} сравниваем с порогом $F_{\alpha, (p-1)(q-1), n-p \cdot q}$ величину

$$F_{AB} = \frac{S_{AB_i}^2 / (p-1)(q-1)}{S_{e_i}^2 / (n-p \cdot q)}.$$

Если соответствующая величина меньше своего порога, то соответствующая гипотеза принимается, в противном случае отвергается.

III. Так же как и в случае однофакторного дисперсионного анализа, если соответствующая гипотеза об отсутствии влияния отвергнута, то можно применить метод множественного сравнения для соответствующего ранжирования уровней или комбинаций уровней. Рассмотрим это на примере главных эффектов уровней фактора A .

Пусть $\psi = \sum_{i=1}^p C_i \alpha_i$, где $\sum_{i=1}^p C_i = 0$.

Нетрудно получить МНК-оценку функции ψ

$$\hat{\psi} = \sum_{i=1}^p C_i \hat{\alpha}_i = \sum_{i=1}^p C_i (\eta_{i.} - \eta_{..}) = \sum_{i=1}^p C_i \eta_{i.} = \sum_{i=1}^p C_i y_{i...} \quad (4.45)$$

Из (4.45) найдем дисперсию оценки $\hat{\psi}$

$$D\hat{\psi} = \sum_{i=1}^p C_i^2 Dy_{i..} = \frac{1}{qK} \sigma^2 \sum_{i=1}^p C_i^2,$$

откуда несложно найти доверительный интервал для ψ . Число степеней свободы величины F_{α, f_1, f_2} , используемой в выражении для доверительного интервала, определяется величинами $f_1 = p-1$, $f_2 = n-p \cdot q$, т. к.

величина $\psi = \sum_{i=1}^p C_i \alpha_i$ определяет линейную комбинацию

лишь $p-1$ линейно независимых величин. Метод множественного сравнения аналогично применяется при рассмотрении главных эффектов уровней фактора B и взаимодействий.

IV. Рассмотрим теперь случай, когда в каждой ячейке имеется по одному наблюдению, т. е.

$$y_{ij} = \eta_{ij} + e_{ij}, \quad i = \overline{1, p}, \quad j = \overline{1, q}.$$

В этом случае $n = p \cdot q$ и применять модель (4.26) нельзя, т. к. наблюдений недостаточно для оценивания столь большого количества параметров. Это проявится в том, что число степеней свободы $f_e = 0$. Поэтому в случае одного наблюдения в ячейке имеем возможность работать лишь с моделью с аддитивными эффектами, т. е.

$$\eta_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j.$$

Рассматривая точно так же, как и в случае K наблюдений в ячейке, получим

$$\hat{\mu} = y_{..}; \quad \hat{\alpha}_i = y_{i.} - y_{..}; \quad \hat{\beta}_j = y_{.j} - y_{..};$$

$$S_{\Omega} = \sum_{ij} (y_{ij} - \hat{\mu} - \hat{\alpha}_i - \hat{\beta}_j)^2;$$

$$S_{\omega} = \sum_{ij} (y_{ij} - \hat{\mu} - \hat{\alpha}_i - \hat{\beta}_j)^2 + \min_{\omega} S',$$

где

$$S' = n(\hat{\mu} - \mu)^2 + q \sum (\hat{\alpha}_i - \alpha_i)^2 + p \sum (\hat{\beta}_j - \beta_j)^2.$$

Откуда несложно получить

$$S_A^2 = S_{\omega A} - S_{\Omega} = \min_{\omega A} S' = q \sum \hat{\alpha}_i^2;$$

$$S_B^2 = S_{\omega_B} - S_{\Omega} = \min S' = p \sum \beta_j^2;$$

$$S_{\Omega} = S_{\omega_0} - S_{\Omega} = S_A^2 + S_B^2.$$

Обозначая через $S^2 = S_{\omega_0}$ общую вариацию величин y_{ij} относительно y_{**} , $S_e^2 = S_{\Omega}$ — вариацию величин y_{ij} , связанную с помехой e_{ij} , получим

$$S^2 = S_e^2 + S_A^2 + S_B^2.$$

Причем $f_e = p \cdot q - p - q + 1 = (p-1)(q-1)$, т. к. оценивается всего $p+q-1$ независимых параметров, $f_A = p-1$, $f_B = q-1$, $f = f_e + f_A + f_B = p \cdot q - 1$. Таким образом, при проверке гипотезы $H_A: \alpha_i = 0, i = \overline{1, p}$ необходимо сравнить с порогом $F_{\alpha, p-1, (p-1)(q-1)}$ величину

$$F_A = \frac{S_A^2 / (p-1)}{S_e^2 / ((p-1)(q-1))};$$

при проверке $H_B: \beta_j = 0, j = \overline{1, q}$ необходимо сравнивать с порогом $F_{\alpha, q-1, (p-1)(q-1)}$ величину

$$F_B = \frac{S_B^2 / (q-1)}{S_e^2 / ((p-1)(q-1))}.$$

Если соответствующая величина больше своего порога, то соответствующая гипотеза отвергается, иначе она принимается. Методы множественного сравнения применяются точно так же, как описано выше. Изменения произойдут лишь в связи с изменением числа степеней свободы f .

V. Рассмотрим двухфакторный дисперсионный анализ с неравными числами наблюдений в ячейках, т. е.

$$y_{ijk} = \eta_{ij} + e_{ijk}, \quad i = \overline{1, p}, \quad j = \overline{1, q}, \quad k = \overline{1, K_{ij}},$$

причем некоторые из ячеек (i, j) не содержат наблюдений. Общий объем наблюдений есть $n = \sum_{ij} K_{ij}$. Обозначим через r число непустых ячеек $r \leq p \cdot q$. Тогда сразу можем записать выражение для S_{Ω}

$$S_{\Omega} = \min_{\{\eta_{ij}\}} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \eta_{ij})^2 = \sum_{ijk} (y_{ijk} - y_{i*})^2$$

и величина S_{Ω} имеет χ^2 распределение с $n-r$ степенями свободы. Найдем критерий для взаимодействий,

т. е. проверим гипотезу $H_{AB}: \gamma_{ij}=0, i=\overline{1,p}, j=\overline{1,q}$.
 Обозначим через $\mu^*, \alpha_i^*, \beta_j^*$ МНК-оценки при условии выполнения гипотезы H_{AB} . Тогда

$$S_{\omega AB} = \min_{\mu, \{\alpha_i\}, \{\beta_j\}} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j)^2 = \sum_{ijk} (y_{ijk} - \mu^* - \alpha_i^* - \beta_j^*)^2. \quad (4.46)$$

Для нахождения величин $\mu^*, \alpha_i^*, \beta_j^*$ возьмем производную от суммы под знаком \min в (4.46) по μ, α_i, β_j и приравняем их нулю. Тогда получим

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j)^2 = -2 \left[\sum_{ijk} y_{ijk} - \mu n - \sum_{ijk} \alpha_i - \sum_{ijk} \beta_j \right] = 0,$$

откуда получаем уравнение

$$\mu n + \sum_i G_i \alpha_i + \sum_j \beta_j H_j = \sum_{ijk} y_{ijk}, \quad (4.47)$$

где введены следующие обозначения:

$$G_i = \sum_j K_{ij}; \quad H_j = \sum_i K_{ij}; \quad (4.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j)^2 = -2 \sum_{jk} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j) = 0.$$

Следующие p уравнений имеют вид

$$\mu G_i + \alpha_i G_i + \sum_j \beta_j K_{ij} = g_i, \quad (4.49)$$

где $g_i = \sum_{jk} y_{ijk}$,

$$\frac{\partial}{\partial \beta_j} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j)^2 = -2 \sum_{ik} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j) = 0,$$

откуда получаем последние q уравнений системы

$$\mu H_j + \sum_i K_{ij} \alpha_i + H_j \beta_j = h_j, \quad (4.50)$$

где

$$h_j = \sum_{ik} y_{ijk}.$$

Уравнения (4.47), (4.49), (4.50) представляют собой систему линейных алгебраических уравнений. Решение этой системы и есть $\mu^*, \{\alpha_i^*\}, \{\beta_j^*\}$. Из (4.50) получим

$$\beta_j = -\mu + \frac{1}{H_j} (h_j - \sum_e K_{ej} \alpha_e). \quad (4.51)$$

Подставим (4.51) в (4.49) и получим после упрощения

$$\alpha_i G_i + \sum_j K_{ij} \frac{1}{H_j} \sum_l K_{lj} \alpha_l = g_i - \sum_j K_{ij} \frac{h_j}{H_j}. \quad (4.52)$$

Подставив в (4.52) величину

$$\alpha_i G_i = \sum_e \alpha_e G_i \delta_{ie},$$

получим

$$\sum_e a_{ie} \alpha_e = R_i, \quad (4.53)$$

$$\text{где } a_{ie} = G_i \delta_{ie} - \sum_j \frac{K_{ij} K_{ej}}{H_j}; \quad R_i = g_i - \sum_j \frac{K_{ij} h_j}{H_j}.$$

Получили (4.53) систему уравнений относительно α_i .

Если из (4.49) выразить α_i через остальные величины и подставить результат в (4.50), то получим систему уравнений относительно β_j

$$\sum_m b_{jm} \beta_m = p_j; \quad (4.54)$$

$$\text{где } b_{jm} = H_j \delta_{jm} - \sum_l \frac{K_{lj} K_{lm}}{G_l}; \quad p_j = h_j - \sum_l \frac{K_{lj} g_l}{G_l}.$$

Подставляя в (4.46) вместо β_j выражение (4.51), получим

$$S_{\omega AB} = \sum_{ijk} y_{ijk}^2 - \sum_l R_l \alpha_l - \sum_j \frac{h_j^2}{H_j}. \quad (4.55)$$

Если в (4.46) исключить α_l по формуле (4.49), то будем иметь эквивалентное соотношение

$$S_{\omega AB} = \sum_{ijk} y_{ijk}^2 - \sum_j p_j \beta_j - \sum_l \frac{g_l^2}{G_l}. \quad (4.56)$$

Таким образом, для нахождения $S_{\omega AB}$ необходимо решить систему уравнения (4.53) или (4.54) и результат подставить в (4.55) или в (4.56) соответственно. Число степеней свободы величины $S_{\omega AB}$ равно разности между числом наблюдений \checkmark числом измеряемых линейно-независимых параметров при гипотезе H_{AB} , которое равно $p+q-1$, т.е. $f_{\omega AB} = n - p - q + 1$.

Учитывая, что $S_{\omega AB} = S_{\omega} + S_{2B}^A$, и все величины

входящие в это равенство, имеют χ^2 распределение и S_{Ω} , S_{AB}^2 статистически независимы, получаем выражение для числа степеней свободы величины S_{AB}^2 , $f_{AB} = f_{\omega_{AB}} - f_{\Omega} = r - p - q + 1$. Окончательно получаем, что для проверки гипотезы H_{AB} необходимо величину

$$F_{AB} = \frac{(S_{\omega_{AB}} - S_{\Omega}) / (r - p - q + 1)}{S_{\Omega} / (n - r)}$$

сравнивать с порогом $F_{\alpha, (r-p-q+1), (n-r)}$.

Рассмотрим обработку с целью получения выводов о главных эффектах в предположении аддитивности, т. е. $\gamma_{ij} = 0$. Величина S_{Ω} имеет вид

$$S_{\Omega} = \min_{\mu, \{\alpha_i\}, \{\beta_j\}} \sum_{ijk} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j)^2. \quad (4.57)$$

Выражение (4.57) совпадает с (4.46), т. е. величина $S_{\Omega} = S_e^2$ вычислена и имеет вид (4.55). Для нахождения S_{ω_A} необходимо решить систему уравнений (4.47), (4.49), (4.50) при ограничении $\alpha_i = 0$. Из (4.50) получим

$$\beta_j + \mu = \frac{h_j}{H_j}.$$

Тогда $S_{\omega_A} = \sum_{ijk} \left(y_{ijk} - \frac{h_j}{H_j} \right)^2$, откуда получаем $S_A^2 = S_{\omega_A} - S_{\Omega}$. Величина S_A^2 имеет $f_A = p - 1$ степеней свободы. При проверке гипотезы H_A необходимо величину

$$F_A = \frac{S_A^2 / (p - 1)}{S_e^2 / (n - p - q + 1)}$$

сравнить с порогом $F_{\alpha, p-1, n-p-q+1}$.

Точно так же можем вывести алгоритм проверки гипотезы $H_B: \beta_j = 0, j = \overline{1, q}$. В результате получим

$$S_{\omega_B} = \sum_{ijk} \left(y_{ijk} - \frac{q_i}{G_i} \right)^2; \quad S_B^2 = S_{\omega_B} - S_e^2; \quad f_B = q - 1.$$

Величину

$$F_B = \frac{S_B^2 / (q - 1)}{S_e^2 / (n - p - q + 1)}$$

необходимо сравнить с порогом $F_{\alpha, (q-1), (n-p-q+1)}$.

Гипотезы H_A и H_B проверяются и при наличии взаимодействий, при этом алгоритм выводится более длительно, но вид его несложный. Например, при проверке гипотезы H_A будем иметь

$$S_A^2 = \sum_I W_i A_i^2 - \left(\sum_I W_i A_i \right) \left(\sum_I W_i \right)^{-1};$$

$$W_i = \left(\frac{1}{q} \sum_J \frac{1}{K_{ij}} \right)^{-1}; \quad A_i = y_{i..}; \quad f_A = p - 1.$$

VI. Рассмотрим в качестве примера применение двухфакторного дисперсионного анализа к однофакторной задаче. Исследуется влияние фактора A с p уровнями. Экспериментатор решил продублировать опыты для получения более надежных результатов. Пусть однородного материала, который используется в экспериментах, хватает на то, чтобы реализовать p опытов, т. е. ровно столько, сколько уровней фактора A . Таким образом, материал имеет блочную структуру, величина блока — p , всех блоков — q и объем выборки — $n = p \cdot q$. Тогда наблюдения имеют следующую структуру:

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ij},$$

где α_i — главный эффект i -го уровня фактора A ; β_j — главный эффект j -го блока. Эффекты за счет блочной структуры назовем фактором B . В результате пришли к модели двухфакторного дисперсионного анализа. Далее, поступая обычным образом, получаем

$$S^2 = S_A^2 + S_B^2 + S_e^2. \quad (4.58)$$

Из (4.58) видно, что мы отделили изменчивость S_A^2 наблюдаемой величины, связанную с уровнями фактора A , от случайных ошибок S_e^2 и, самое главное, от изменчивости, связанной с неоднородностью материала. Если бы влияние блоков не было учтено, то с самого начала имели бы дело с однофакторным анализом, и величина S^2 имела бы другое разложение

$$S^2 = S_e^{*2} + S_A^2, \quad (4.59)$$

где S_e^{*2} — остаточная дисперсия при использовании однофакторной модели. При сравнении (4.58), (4.59) полу-

чаем $S_e^{*2} = S_e^2 + S_B^2 > S_e^2$, т. е. использование двухфакторной модели при решении однофакторной задачи приводит к меньшему уровню ошибок—критерий становится более чувствительным.

Зачастую блоки выбирают случайным образом из некоторой совокупности, уровни факторов внутри блока распределены случайным образом. Подобная рандомизация проводится с целью борьбы с возможной скрытой регулярной зависимостью, которая в принципе возможна и заложена как в порядке расположения блоков, так и в порядке следования уровней в процессе эксперимента. В связи с этим рассматриваемый план эксперимента называется планом рандомизированных блоков.

Необходимо подчеркнуть, что идея рандомизации является одной из основных идей теории эксперимента. Выбирая математическую модель, экспериментатор не застрахован от систематических погрешностей, которые могут появиться в результате действия скрытых закономерностей. Эти закономерности могут появиться как следствие регулярных различий в экспериментальном материале.

Если этот материал выбирать для опытов регулярно (в каком-то смысле), то в эксперименте могут быть зафиксированы ложные зависимости, связанные не с поведением объекта исследования, а с различиями в используемом экспериментальном материале. Если же экспериментатор будет рандомизировать по экспериментальному материалу, то эта скрытая регулярная закономерность превращается в случайную, которую можно оценить и учесть. Все это в равной степени относится к очередности выбора условий проведения опытов, зафиксированных матрицей плана, но с учетом ограничений, накладываемых конкретной задачей.

План рандомизированных блоков можно применять и к двухфакторным задачам. Пусть имеем два фактора A и B с p и q уровнями соответственно. Имеем r блоков, каждый величины $p \cdot q$. Эффект блока назовем фактором C . Тогда совокупность наблюдений имсет вид

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i^A + \alpha_j^B + \gamma_{ij}^{AB} + \alpha_k^C + e_{ijk}.$$

Получили особый случай трехфакторного эксперимента, когда имеется лишь один член, соответствующий взаимодействиям.

§ 4. Сбалансированные неполные блоки

В предыдущем параграфе рассмотрели случай, когда блок вмещает полный набор вариантов. Однако возможна ситуация, когда блок вмещает лишь часть полного набора уровней фактора.

Считаем, что мы исследуем влияние фактора A , имеющего p уровней. Имеем q блоков величины k , причем имеем неполноблочную структуру, т. е. $k < p$. Будем предполагать, что нет уровней, дважды появляющихся в одном и том же блоке. Каждый уровень в экспериментах повторяется одно и то же число раз r . Вычислим объем выборки n . Так как p уровней повторяется r раз, то $n = p \cdot r$. С другой стороны, имеем q блоков, каждый величины k , следовательно:

$$n = q \cdot k = p \cdot r. \quad (4.60)$$

Различных опытов можно было бы поставить $q \cdot p$, но из них ставится всего лишь $qk < qp$. Следовательно, часть из $p \cdot q$ ячеек не имеет наблюдений, т. е. обозначая, как и ранее, через K_{ij} число наблюдений в ячейке (i, j) , через D множество ячеек, в которых имеются наблюдения, будем иметь

$$K_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } (i, j) \in D \\ 0, & \text{если } (i, j) \notin D. \end{cases}$$

Структура наблюдений имеет следующий вид:

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ij}, \quad i = \overline{1, p}, \quad j = \overline{1, q}, \quad (i, j) \in D,$$

где α_i — главный эффект фактора A ; β_j — главный эффект блока, этот эффект назовем фактором B . Для неодинакового числа наблюдений в ячейках уже найдена система уравнений (4.47), (4.49), (4.50), или в более удобном виде система (4.53) или (4.54), откуда можно найти $\hat{\mu}$, $\hat{\alpha}_i$, $\hat{\beta}_j$.

Используем ограничения, накладываемые моделью неполных блоков. Ясно, что $\sum_i K_{ij} = H_j = k$, т. к. это есть число наблюдений в j -блоке, $\sum_j K_{ij} = G_i = r$, т. к. это есть число блоков, где имеются наблюдения с i -м уровнем. Тогда получим

$$\sum_i G_i \hat{\alpha}_i = r \sum_i \hat{\alpha}_i = r p \hat{\alpha}_* = 0; \quad \sum_j H_j \hat{\beta}_j = k \sum_j \hat{\beta}_j = k q \hat{\beta}_* = 0. \quad (4.61)$$

Подставляя (4.61) в (4.47), (4.49), (4.50), (4.53), получим уравнения в более простом виде

$$\hat{\mu}n = \sum_{(i,j) \in D} y_{ij}; \quad (4.62)$$

$$r\hat{\mu} + r\hat{\alpha}_i + \sum_j \hat{\beta}_j K_{ij} = g_i; \quad (4.63)$$

$$k\hat{\mu} + \sum_i K_{ij} \hat{\alpha}_i + k \hat{\beta}_j = h_j; \quad (4.64)$$

$$a_{ie} = r \delta_{ie} - \frac{1}{k} \sum_j K_{ij} K_{ej}; \quad (4.65)$$

$$R_i = g_i - \frac{1}{k} \sum_j K_{ij} h_j. \quad (4.66)$$

Обозначим через λ_{ie} следующее выражение:

$$\lambda_{ie} = \sum_j K_{ij} K_{ej}, \quad (4.67)$$

λ_{il} —это число блоков, в которых уровень i встречается с уровнем l . Очевидно, что $\lambda_{il} = r$, поскольку λ_{il} —это число блоков, в которых имеется уровень i .

Анализ еще сильнее упрощается, если мы будем иметь дело со сбалансированными неполными блоками, когда число блоков, в которых появляется данная пара уровней фактора A , является одинаковым для всех пар, т. е.

$$\lambda_{il} = \begin{cases} r, & \text{при } i=l \\ \lambda, & \text{при } i \neq l. \end{cases}$$

Подсчитаем теперь двумя различными способами число пар уровней, в которые входит некоторый уровень i . В каждом блоке, в который входит уровень i , он сочетается наряду с другими $k-1$ уровнями, следовательно, повторяясь в различных блоках r раз, уровень i входит в $r(k-1)$ пар. С другой стороны, i -й уровень сочетается с $(p-1)$ остальными уровнями. А поскольку каждая пара встречается λ раз, то i -й уровень встречается в $\lambda(p-1)$ парах. Следовательно, доказали равенство $\lambda(p-1) = r(k-1)$, откуда можно найти величину λ :

$$\lambda = \frac{r(k-1)}{(p-1)}. \quad (4.68)$$

С учетом (4.65), (4.66), (4.68) уравнение (4.53) примет следующий вид:

$$\left(r - \frac{r}{k}\right) \hat{\alpha}_i - \frac{\lambda}{k} \sum_{l, l \neq i} \hat{\lambda}_l = R_i. \quad (4.69)$$

Учитывая $\hat{\alpha}_* = 0$, получим $\sum_{i=1}^p \hat{\alpha}_i = 0$, откуда

$$\sum_{l, l \neq i} \hat{\alpha}_l = -\hat{\alpha}_i. \quad (4.70)$$

Подставляя (4.70) в (4.69), будем иметь

$$\frac{rk - r + \lambda}{k} \hat{\alpha}_i = R_i. \quad (4.71)$$

Подставляя в (4.71) вместо λ соотношение (4.68), получим

$$\hat{\alpha}_i = \frac{R_i}{R_0}, \quad (4.72)$$

где

$$R_0 = \frac{(k-1)r \cdot p}{k(p-1)}.$$

Величину $\hat{\mu}$ найдем из (4.62)

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{(i,j) \in D} y_{ij} = y_{**}. \quad (4.73)$$

Для получения $\hat{\beta}_j$ подставим (4.72) в (4.64). Тогда получим

$$\hat{\mu} + \hat{\beta}_j = \frac{1}{k} \left(h_j - \sum_I K_{ij} \hat{\alpha}_i \right) = \frac{1}{k} \left(h_j - \frac{1}{R_0} \sum_I K_{ij} R_i \right). \quad (4.74)$$

Из (4.72), (4.74) можем получить $\hat{\eta}_{ij}$

$$\hat{\eta}_{ij} = \hat{\mu} + \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_j = \hat{\alpha}_i + \frac{h_j}{k} - \frac{1}{k} \sum_I K_{ij} \hat{\alpha}_i.$$

Теперь найдем величину S_e^2

$$\begin{aligned}
 S_e^2 = S_u = \sum_{(ij) \in D} (y_{ij} - \hat{\mu} - \hat{\alpha}_i - \hat{\beta}_j)^2 = \\
 = \sum_{(ij) \in D} (y_{ij} - \hat{\alpha}_i - \frac{h_j}{k} + \frac{1}{n} \sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_e)^2. \quad (4.75)
 \end{aligned}$$

Факторы A и B не взаимодействуют, следовательно, полная дисперсия наблюдений может быть разложена в виде

$$S^2 = S_A^2 + S_B^2 + S_e^2,$$

откуда

$$S_A^2 + S_B^2 = S^2 - S_e^2, \quad (4.76)$$

где

$$S^2 = \sum_{(ij) \in D} (y_{ij} - \hat{\mu})^2 = \sum_{(ij) \in D} (y_{ij} - y_{**})^2. \quad (4.77)$$

Величины S^2 , S_e^2 известны. Найдем S_A^2 , S_B^2 . Возводя в квадрат и суммируя в (4.77), получим

$$S^2 = \sum_{(ij) \in D} (y_{ij}^2 - 2 y_{ij} y_{**} + y_{**}^2) = \sum_{(ij) \in D} y_{ij}^2 - n y_{**}^2. \quad (4.78)$$

Величину S_e^2 получим иным путем

$$\begin{aligned}
 \sum_{(ij) \in D} y_{ij}^2 = \sum_{(ij) \in D} \left[y_{ij} - \left(\hat{\alpha}_i - \frac{1}{k} \sum_e K_{ej} \hat{\alpha}_e \right) - \frac{h_j}{k} \right]^2 + \\
 + \left(\hat{\alpha}_i - \frac{1}{k} \sum_e K_{ej} \hat{\alpha}_e + \frac{h_j}{k} \right)^2 = \\
 = S_e^2 + \sum_{(ij) \in D} \left(\hat{\alpha}_i - \frac{1}{k} \sum_e K_{ej} \hat{\alpha}_e \right)^2 + \sum_{(ij) \in D} \frac{h_j^2}{k^2}. \quad (4.79)
 \end{aligned}$$

При возведении в квадрат в (4.79) удвоенные суммы произведений обращаются в нуль. Следовательно, из (4.79) получим

$$S_e^2 = \sum_{ij \in D} y_{ij}^2 - \sum_{(ij) \in D} \left(\hat{\alpha}_i - \frac{1}{k} \sum_e K_{ej} \hat{\alpha}_e \right)^2 - \frac{1}{k} \sum_j h_j^2. \quad (4.80)$$

Подставляя (4.78), (4.80) в (4.76), будем иметь

$$S_A^2 + S_B^2 = \sum_{ij} \left(\hat{\alpha}_i - \frac{1}{k} \sum_e K_{ej} \hat{\alpha}_e \right)^2 + \left[\frac{1}{k} \sum_j h_j^2 - n y_{**}^2 \right]. \quad (4.81)$$

Получим конкретное выражение для S_A . Введем гипотезу $H_A: \alpha_i = 0, i = \overline{1, p}$. Тогда

$$S_A^2 = S_{w_A} - S_B, \quad (4.82)$$

где

$$S_{w_A} = \min_{\mu, \{\beta_j\}} \sum_{ij} (y_{ij} - \mu - \beta_j)^2 = \sum_{ij} (y_{ij} - \mu^* - \beta_j^*)^2.$$

Величины μ^*, β_j^* есть МНК-оценки при ограничении на параметры $\alpha_i = 0, i = \overline{1, p}$. Найти эти оценки можно из (4.64), приравняв $\hat{\alpha}_i$ нулю:

$$\mu^* + \beta_j^* = \frac{h_j}{k}.$$

Следовательно,

$$S_{w_A} = \sum_{(ij) \in D} \left(y_{ij} - \frac{h_j}{k} \right)^2 = \sum_{ij} y_{ij}^2 - \frac{1}{k} \sum_j h_j^2. \quad (4.83)$$

Подставляя (4.75), (4.83) в (4.82), получим

$$S_A^2 = \sum_{(ij) \in D} \left(\hat{\alpha}_i - \frac{1}{k} \sum_l k_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2. \quad (4.84)$$

С учетом (4.81) нетрудно записать теперь выражение для S_B^2

$$S_B^2 = \frac{1}{k} \sum_j h_j^2 - n y_{**}^2. \quad (4.85)$$

Упростим (4.84), (4.85). После возведения в квадрат в (4.84) получим

$$S_A^2 = \sum_{(ij) \in D} \left[\hat{\alpha}_i^2 - \frac{2}{k} \hat{\alpha}_i \sum_e K_{ej} \hat{\alpha}_e + \frac{1}{k^2} \left(\sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2 \right]. \quad (4.86)$$

Первое слагаемое в (4.86) имеет вид

$$\sum_{(ij) \in D} \hat{\alpha}_i^2 = r \sum_i \hat{\alpha}_i^2.$$

Упростим второе слагаемое в (4.86)

$$\frac{1}{k} \sum_{(ij) \in D} \hat{\alpha}_i \sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l = \frac{1}{k} \sum_{j \in D_j} \sum_i \hat{\alpha}_i \sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l =$$

$$= \frac{1}{k} \sum_j \left(\sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2. \quad (4.87)$$

В (4.87) через D_j обозначено подмножество множества D при фиксированном j . Очевидно, что $\sum_{l \in D_j} \hat{\alpha}_l = \sum_{l=1}^p K_{lj} \hat{\alpha}_l$.

Третье слагаемое в (4.86) также упрощается

$$\begin{aligned} \frac{1}{k^2} \sum_{(ij) \in D} \left(\sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2 &= \frac{1}{k^2} \sum_j \left(\sum_{l \in D_j} 1 \right) \left(\sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2 = \\ &= \frac{1}{k} \sum_j \left(\sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2. \end{aligned} \quad (4.88)$$

В (4.88) учтено, что $\sum_{l \in D_j} 1 = \sum_{l=1}^p K_{lj} = k$.

С учетом (4.87), (4.88) величина (4.86) примет вид

$$S_{\Lambda}^2 = r \sum_l \hat{\alpha}_l^2 - \frac{1}{k} \sum_j \left(\sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2. \quad (4.89)$$

Упростим теперь второе слагаемое из (4.89). С учетом (4.67) получим

$$\begin{aligned} \sum_j \left(\sum_l K_{lj} \hat{\alpha}_l \right)^2 &= \sum_{j, l, l'} K_{lj} K_{l'j} \hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_{l'} = \\ &= \sum_{l, l'} \hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_{l'} \sum_j K_{lj} K_{l'j} = \sum_{l, l'} \hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_{l'} \lambda_{ll'} = \\ &= r \sum_l \hat{\alpha}_l^2 + \lambda \sum_{l \neq l'} \hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_{l'}. \end{aligned} \quad (4.90)$$

Возводя в квадрат правую и левую части равенства $\sum_l \hat{\alpha}_l = 0$, получим $\sum_l \hat{\alpha}_l^2 + \sum_{l \neq l'} \hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_{l'} = 0$, откуда

$$\sum_{l \neq l'} \hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_{l'} = - \sum_l \hat{\alpha}_l^2. \quad (4.91)$$

Учитывая (4.68), можем продолжить упрощение формулы (4.89)

$$\sum_j (\sum_i K_{ij} \hat{\alpha}_i)^2 = r \sum_i \hat{\alpha}_i^2 - \lambda \sum_i \hat{\alpha}_i^2 = (r - \lambda) \sum_i \hat{\alpha}_i^2. \quad (4.92)$$

Подставляя (4.92) в (4.89), получим окончательно

$$S_A^2 = \left(r - \frac{r - \lambda}{k} \right) \sum_i \hat{\alpha}_i^2 = \frac{rk - r + \lambda}{k} \sum_i \hat{\alpha}_i^2 = R_0 \sum_i \hat{\alpha}_i^2. \quad (4.93)$$

С учетом (4.72) имеется другая форма записи

$$S_A^2 = \frac{1}{R_0} \sum_i R_i^2. \quad (4.94)$$

Величину S_B^2 можно записать в виде

$$S_B^2 = \sum_j k \left(\frac{h_j}{k} - y_{**} \right)^2. \quad (4.95)$$

Правильность формулы проверяется возведением в квадрат с учетом

$$y_{**} = \frac{1}{n} \sum_j h_j.$$

Числа степеней свободы находятся обычным путем

$$f_A = p - 1; \quad f_B = q - 1; \quad f_e = n - p - q + 1.$$

Гипотеза H_A проверяется сравнением величины

$$F_A = \frac{S_A^2 / (p - 1)}{S_e^2 / (n - p - q + 1)}$$

с порогом $F_{\alpha, p-1, n-p-q+1}$.

Аналогично сравнивая с этим же порогом величину

$$F_B = \frac{S_B^2 / (q - 1)}{S_e^2 / (n - p - q + 1)},$$

можно проверить гипотезу H_B о влиянии эффекта блока.

§ 5. Латинские квадраты

1. Пусть исследуется t факторов, v -й фактор имеет p_v уровней. Следовательно, полный набор различных уровней факторов содержит $p_1 \cdot p_2 \cdot \dots \cdot p_t$ ячеек. Чтобы реализовать полный t -факторный дисперсионный анализ, необходимо иметь в каждой ячейке минимум

одно наблюдение. Следовательно, объем выборки при этом равен $n=p_1p_2\dots p_l$. Зачастую такое количество наблюдений является неприемлемым. Тогда вынуждены упростить схему эксперимента, допустив, что в некоторых ячейках наблюдений не будет. Такое планирование и соответствующая обработка называются неполным дисперсионным анализом. Рассмотрим эту идею на примере трех факторов A, B, C , когда соответствующий план эксперимента называется планом латинского квадрата.

Схема латинского квадрата является неполным трехфакторным анализом, в котором все три фактора имеют одно и то же число p уровней, а наблюдения проводятся только в p^2 из p^3 ячеек. Преимущество по сравнению с полным трехфакторным анализом в том, что наблюдений требуется в p раз меньше.

Главное неудобство в том, что анализ существенно опирается на предположение аддитивности и может быть ошибочным, если в действительности взаимодействия присутствуют. Еще одно ограничение состоит в том, что все факторы должны иметь одинаковое количество уровней.

Определение 2. Латинский квадрат — это матрица порядка p чисел $1, 2, \dots, p$, каждое из которых появляется точно один раз в каждой строке и каждом столбце.

Следующие примеры являются латинскими квадратами второго, третьего, четвертого порядков соответственно

1	2
2	1

3	2	1
1	3	2
2	1	3

1	2	3	4
4	1	2	3
3	4	1	2
2	3	4	1

Получить латинский квадрат произвольного порядка совершенно несложно. Необходимо записать числа $1, 2, \dots, p$ в произвольном порядке в виде строки или столбца и тогда каждая последующая строка или столбец есть циклический сдвиг на одну позицию в какую-нибудь од-

ну сторону. Таким способом построены примеры латинских квадратов второго, третьего и четвертого порядков. Очевидно, что при перестановке строк и столбцов латинский квадрат сохраняет свое основное свойство, отмеченное в определении. Для конкретного p существует множество латинских квадратов, называемое множеством трансформаций. Латинские квадраты, входящие в это множество, отличаются друг от друга перестановкой строк и столбцов. Название будет понятным, если вместо цифр в квадрате поставить латинские буквы. Именно так эти квадраты изучались впервые.

Пусть номер строки (i) является уровнем (i) фактора A , номер столбца (j) является уровнем (j) фактора B и число (k) в соответствующей позиции латинского квадрата является уровнем (k) фактора C . Из построения видно, что схема латинского квадрата позволяет реализовать p^2 наблюдений таким образом, чтобы каждый уровень любого фактора появлялся точно один раз с каждым уровнем любого другого фактора.

Пусть выбран частный латинский квадрат из множества трансформаций. Обозначим через D множество p^2 комбинаций точек чисел (i, j, k) , встречающихся в этом латинском квадрате. Тогда

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i^A + \alpha_j^B + \alpha_k^C + e_{ijk}, \quad (i, j, k) \in D,$$

где $\alpha_i^A, \alpha_j^B, \alpha_k^C$ — главные эффекты факторов A, B, C .
Найдем величину S_Ω

$$S_\Omega = \min_{\mu, \{\alpha_i^A\}, \{\alpha_j^B\}, \{\alpha_k^C\}} \sum_{(i,j,k) \in D} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i^A - \alpha_j^B - \alpha_k^C)^2. \quad (4.96)$$

Приравнивая нулю производную от суммы в (4.96) по μ , получим

$$-2 \sum_{(i,j,k) \in D} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i^A - \alpha_j^B - \alpha_k^C) = 0. \quad (4.97)$$

Обозначим через D_i, D_j, D_k — множества пар чисел $(j, k), (i, k), (i, j)$ при фиксированных i, j, k соответственно. Ясно, что $\bigcup_i D_i = \bigcup_j D_j = \bigcup_k D_k = D$. Множества D_i, D_j, D_k содержат по p элементов. Например, D_i — это множество пар (j, k) , принадлежащих i -й строке квадрата. Этим пар p , причем каждое j и каждое k встре-

чаются в D_i по одному разу. Учитывая, что $\sum_{(j,k) \in D} 1 = \sum_{(i,k) \in D} 1 =$

$$= \sum_{(i,j) \in D_k} 1 = p, \text{ а также } \alpha_*^A = \alpha_*^B = \alpha_*^C = 0, \text{ получим}$$

$$\sum_{(i,j,k) \in D} \alpha_i^A = \sum_{i=1}^p \alpha_i^A \sum_{(j,k) \in D_i} 1 = p \sum_{i=1}^p \alpha_i^A = \frac{1}{p^2} \alpha_*^A = 0;$$

$$\sum_{(i,j,k) \in D} \alpha_j^B = \sum_{j=1}^p \alpha_j^B \sum_{(i,k) \in D_j} 1 = \frac{1}{p^2} \alpha_*^B = 0; \quad \sum_{(i,j,k) \in D} \sigma_k^C = \frac{1}{p^2} \alpha_*^C = 0.$$

Тогда из (4.97) будем иметь

$$\hat{\mu} = \frac{1}{p^2} \sum_{(i,j,k) \in D} y_{ijk} = y_{***}.$$

Приравнивая нулю производную от суммы в (4.96) по α_k , получаем

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_k^C} \sum_{(i,j,k) \in D} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i^A - \alpha_j^B - \alpha_k^C)^2 =$$

$$= -2 \sum_{(i,j) \in D_k} (y_{ijk} - \mu - \alpha_i^A - \alpha_j^B - \alpha_k^C) = 0. \quad (4.98)$$

Обозначим через D_{ki} множество чисел j при фиксированных k, i . Очевидно, что это множество состоит из одного элемента. Аналогично из одного элемента состоит множество D_{kj} . Тогда получим

$$\sum_{(i,j) \in D_k} \alpha_i^A = \sum_{i=1}^p \alpha_i^A \sum_{j \in D_{ki}} 1 = p \alpha_*^A = 0;$$

$$\sum_{(i,j) \in D_k} \alpha_j^B = \sum_{j=1}^p \alpha_j^B \sum_{i \in D_{kj}} 1 = p \alpha_*^B = 0;$$

$$\sum_{(i,j) \in D_k} \alpha_k^C = \alpha_k^C \sum_{(i,j) \in D_k} 1 = p \sigma_k^C.$$

Тогда из (4.98) получим

$$\hat{\alpha}_k^C = \frac{1}{p} \sum_{(i,j) \in D_k} y_{ijk} - \hat{\mu} = y_{**k} - y_{***}.$$

Параметры α_i^A, σ_j^B входят в (4.96) аналогично пара-

метру α_k^C , поэтому МНК-оценка для них будет иметь аналогичный вид, т. е.

$$\hat{\alpha}_i^A = y_{i..} - y_{...}; \quad y_{i..} = \frac{1}{p} \sum_{(jk) \in D_i} y_{ijk};$$

$$\hat{\alpha}_j^B = y_{.j.} - y_{...}; \quad y_{.j.} = \frac{1}{p} \sum_{(ik) \in D_j} y_{ijk}.$$

Нетрудно убедиться в правильности следующей формулы:

$$\sum_{(ijk) \in D} (y_{ijk} - \mu - \hat{\alpha}_i^A - \hat{\alpha}_j^B - \hat{\alpha}_k^C)^2 = \sum_{(ijk) \in D} (y_{ijk} - \mu - \hat{\alpha}_i^A - \hat{\alpha}_j^B - \hat{\alpha}_k^C)^2 + S', \quad (4.99)$$

где

$$S' = p \sum_i (\hat{\alpha}_i^A - \alpha_i^A)^2 + p \sum_j (\hat{\alpha}_j^B - \alpha_j^B)^2 - p \sum_k (\hat{\alpha}_k^C - \alpha_k^C)^2 + p^2 (\hat{\mu} - \mu)^2. \quad (4.100)$$

Подобная формула подробно выводилась при рассмотрении двухфакторного дисперсионного анализа.

Нам необходимо проверить три основные гипотезы:

$$H_A: \alpha_i^A = 0 \quad i = \overline{1, p};$$

$$H_B: \alpha_j^B = 0 \quad j = \overline{1, p};$$

$$H_C: \alpha_k^C = 0 \quad k = \overline{1, p}.$$

Как и раньше, часть параметрического пространства, удовлетворяющую гипотезам H_A , H_B , H_C , обозначим соответственно ω_A , ω_B , ω_C . Тогда получим с учетом (4.96), (4.99), (4.100)

$$S_{\omega_A} = S_{\Omega} + \min_{\mu\{\alpha_j^B\}, \{\alpha_k^C\}} S' = S_{\Omega} + p \sum_i (\hat{\alpha}_i^A)^2;$$

откуда находим

$$S_A^2 = S_{\omega_A} - S_{\Omega} = p \sum_i (\hat{\alpha}_i^A)^2. \quad (4.101)$$

Аналогично получим выражения для S_B^2, S_C^2 :

$$S_B^2 = S_{\omega_B} - S_{\Omega} = p \sum_j (\hat{\alpha}_j^B)^2; \quad (4.102)$$

$$S_C^2 = S_{m_C} - S_{\Omega} = p \sum_k (\hat{\sigma}_k^C)^2. \quad (4.103)$$

Подставив в (4.96) оценки $\hat{\mu}$, $\hat{\alpha}_i^A$, $\hat{\sigma}_j^B$, $\hat{\alpha}_k^C$, получим

$$S_e^2 = S_{\Omega} = \sum_{(ijk) \in D} (y_{ijk} - y_{i..} - y_{.j.} - y_{..k} + 2y_{...})^2. \quad (4.104)$$

Учитывая замечания, сделанные о числах степеней свободы в § 3, получим

$$f_A = f_B = f_C = p - 1, \quad f_e = p^2 - 3p - 2 = (p - 1)(p - 2).$$

При нахождении f_e заметим, что в выражении (4.104) для S_e^2 имеем p^2 случайных величин и на них накладывается $3(p - 1) + 1$ ограничений, связанных с оценкой параметров σ_i^A , α_j^B , α_k^C , μ .

Введем гипотезу $H_0 = H_A \cap H_B \cap H_C$ о том, что факторы A , B , C не влияют. Тогда из (4.99) получим

$$S_{\omega_0} = \sum_{(ijk) \in D} (y_{ijk} - \hat{\mu})^2 = S_{\Omega} + S_e^2;$$

$$S_0^2 = S_A^2 + S_B^2 + S_C^2,$$

откуда видно, что все вариации величин y_{ijk} разложили на четыре составляющие: вариации $S_{\Omega} = S_e^2$, связанные с помехой e_{ijk} ; вариации S_A^2, S_B^2, S_C^2 , связанные с главными эффектами факторов A, B, C соответственно.

Гипотезы H_A, H_B, H_C проверяются при сравнении величин F_A, F_B, F_C с порогом $F_{\alpha, p-1, (p-1)(p-2)}$,

где

$$F_A = \frac{S_A^2 / (p - 1)}{S_e^2 / (p - 1)(p - 2)} = \frac{S_A^2 (p - 2)}{S_e^2};$$

$$F_B = \frac{S_B^2 (p - 2)}{S_e^2}; \quad F_C = \frac{S_C^2 (p - 2)}{S_e^2}.$$

Соответствующая гипотеза принимается, если сравниваемая величина меньше порога, иначе она отвергается. Если гипотеза отвергается, то возможно применение метода множественного сравнения, который подробно рассматривался в § 2.

II. Рассмотрим пример на применение латинского квадрата. Необходимо провести однофакторный экссле-

римент, когда имеется p уровней фактора C . Обычно для эксперимента необходим материал. Считаем, что этот экспериментальный материал однороден лишь настолько, что имеется возможность провести только один эксперимент с определенным уровнем. При этом необходимо выделить изменчивость наблюдаемой величины, связанную лишь с изменением уровней фактора C и устранить изменчивость, связанную с неоднородностью материала.

Весь материал представим разложенным на плоскости и попытаемся устранить влияние неоднородности материала, соответствующей двум перпендикулярным направлениям. Считаем, что изменчивость материала по вертикали является соответствующими уровнями фактора A , по горизонтали—уровнями фактора B . Число уровней факторов A и B равно p . Применяя схему латинского квадрата, можем получить разложение

$$S^2 = S_e^2 + S_A^2 + S_B^2 + S_C^2. \quad (4.105)$$

Нас интересует лишь гипотеза $H_C : \alpha_k^C = 0 \quad k = \overline{1, p}$. Проверять ее будем согласно теории.

Представим теперь, что мы провели те же p^2 опытов, но обрабатываем при помощи теории однофакторного дисперсионного анализа. Это значит, что та же величина S^2 будет иметь разложение

$$S^2 = S_e'^2 + S_C^2. \quad (4.106)$$

При сравнении (4.105), (4.106) видим, что $S_e'^2 = S_e^2 + S_A^2 + S_B^2$, т. е. гипотеза H_C в однофакторном анализе проверяется при более высоком уровне шума. Таким образом, применение латинских квадратов к однофакторным моделям может существенно повысить чувствительность критерия.

§ 6. Ортогональные латинские квадраты

Определение 3. Два латинских квадрата порядка p называются *ортогональными*, если при наложении одного на другой каждая из p^2 пар чисел встречается только один раз. Множество латинских квадратов называется ортогональным, если ортогональна любая пара квадратов из этого множества.

В качестве примера рассмотрим три латинских квадрата четвертого порядка

1	2	3	4
2	1	4	3
3	4	1	2
4	3	2	1

1	2	3	4
3	4	1	2
4	3	2	1
2	1	4	3

1	2	3	4
4	3	2	1
2	1	4	3
3	4	1	2

Они ортогональны. Проверим на ортогональность первые два квадрата. При наложении одного на другой получим следующую матрицу пар чисел:

11	22	33	44
23	14	41	32
34	43	12	21
42	31	24	13

Видно, что каждая из пар чисел встречается лишь однажды (пары 34 и 43, 32 и 23 и т. д. различны).

Номера строк и столбцов всех латинских квадратов используем как уровни факторов A и B , числа в первом латинском квадрате используем как уровни фактора C , числа во втором квадрате как уровни фактора E и т. д. Два ортогональных латинских квадрата можно использовать в четырехфакторном дисперсионном анализе. И вообще, t ортогональных латинских квадратов можно использовать в дисперсионном анализе с $t+2$ факторами. При этом потребуется всего p^2 наблюдений, тогда как в полном $t+2$ факторном дисперсионном анализе с одним наблюдением в ячейке потребуется p^{t+2} наблюдения, т. е. объем выборки уменьшается в p^t раз.

Задача о нахождении ортогональных латинских квадратов еще не решена полностью. Известно, что они существуют и найдены при $p=3, 4, 5, 7, 8, 9, 10$. Известно, что их нет при $p=6$. Доказано несколько теорем о существовании ортогональных латинских квадратов тех или иных порядков, но сами квадраты еще не найдены.

Решим задачу четырехфакторного дисперсионного анализа с применением двух ортогональных латинских квадратов. Обозначим через D множество совокупностей уровней четырех факторов, которые рекомендованы выбранными двумя ортогональными латинскими квадратами. Тогда множество наблюдений связано с главными эффектами в виде

$$y_{ijkl} = \mu + \alpha_i^A + \alpha_j^B + \alpha_k^C + \alpha_l^E + e_{ijkl}, \quad (i, j, k, l) \in D,$$

где i, j, k, l — уровни факторов A, B, C, E соответственно. Величина S_{Ω} находится при минимизации по $\mu, \{\alpha_i^A\}, \{\alpha_j^B\}, \{\alpha_k^C\}, \{\alpha_l^E\}$ суммы

$$S = \sum_{(ijkl) \in D} (y_{ijkl} - \mu - \alpha_i^A - \alpha_j^B - \alpha_k^C - \alpha_l^E)^2. \quad (4.107)$$

Приравнявая нулю производную от S по μ , получим

$$\frac{\partial S}{\partial \mu} = -2 \sum_{(ijkl) \in D} (y_{ijkl} - \mu - \alpha_i^A - \alpha_j^B - \alpha_l^E) = 0. \quad (4.108)$$

Обозначим через D_i, D_j, D_k, D_l множества четверок чисел при фиксированных i, j, k, l соответственно. Ясно, что эти множества содержат p элементов. Например D_i — это множество чисел по четыре, принадлежащих i -й строке наложенных друг на друга квадратов. Число элементов множества D_i равно p . Отсюда ясно, что

$$\sum_{(ijkl) \in D} 1 = p^2, \quad \sum_{(ijkl) \in D} \alpha_i^A = \sum_{i=1}^p \alpha_i^A \sum_{(jkl) \in D_i} 1 = p^2 \alpha_*^A = 0;$$

$$\sum_{(ijkl) \in D} \alpha_j^B = p^2 \alpha_*^B = 0; \quad \sum_{(ijkl) \in D} \alpha_k^C = p^2 \alpha_*^C = 0; \quad \sum_{(ijkl) \in D} \alpha_l^E = p^2 \alpha_*^E = 0.$$

С учетом всего сказанного из (4.108) получим

$$\mu = \frac{1}{p^2} \sum_D y_{ijkl} = y_{*****}.$$

Решая уравнение:

$$-\frac{\partial S}{\partial x_k^C} = -2 \sum_{(ijl) \in D_k} (y_{ijkl} - \mu - \alpha_i^A - \alpha_j^B - \alpha_k^C - \alpha_l^E) = 0,$$

получим

$$\hat{\alpha}_k^C = \frac{1}{p} \sum_{D_k} y_{ijkl} - \hat{\mu} = y_{***k} - y_{****}.$$

Учитывая, что параметры α_i^A , α_j^B , α_k^C , α_l^E входят симметрично в (4.107), можем сразу записать выражение для остальных оценок

$$\hat{\alpha}_i^A = y_{i****} - y_{****}; \quad y_{i****} = \frac{1}{p} \sum_{D_i} y_{ijkl};$$

$$\hat{\alpha}_j^B = y_{*j***} - y_{****}; \quad y_{*j***} = \frac{1}{p} \sum_{D_j} y_{ijkl};$$

$$\hat{\alpha}_l^E = y_{****l} - y_{****}; \quad y_{****l} = \frac{1}{p} \sum_{D_l} y_{ijkl}.$$

Нетрудно убедиться в правильности следующей формулы, полученной из (4.107):

$$S = S_\Omega + S', \quad (4.109)$$

где

$$\begin{aligned} S_\Omega &= \sum_D (y_{ijkl} - \mu - \hat{\alpha}_i^A - \hat{\alpha}_j^B - \hat{\alpha}_k^C - \hat{\alpha}_l^E)^2; \\ S' &= p^2 (\hat{\mu} - \mu)^2 + p \sum_i (\hat{\alpha}_i^A - \alpha_i^A)^2 + p \sum_j (\hat{\alpha}_j^B - \alpha_j^B)^2 + \\ &+ p \sum_k (\hat{\alpha}_k^C - \alpha_k^C)^2 + p \sum_l (\hat{\alpha}_l^E - \alpha_l^E)^2. \end{aligned} \quad (4.110)$$

Необходимо проверить четыре основные гипотезы:

$$H_A: \alpha_i^A = 0, \quad i = \overline{1, p};$$

$$H_B: \alpha_j^B = 0, \quad j = \overline{1, p};$$

$$H_C: \alpha_k^C = 0, \quad k = \overline{1, p};$$

$$H_E: \alpha_l^E = 0, \quad l = \overline{1, p}.$$

Часть параметрического пространства Ω , удовлетворяющую гипотезам H_A , H_B , H_C , H_E , обозначим через ω_A ,

$\omega_B, \omega_C, \omega_E$ соответственно. Тогда получим с учетом (4.109)

$$S_{\omega_A} = S_{\omega} + \min_{\mu, \{\alpha_j^B\}, \{\alpha_k^C\}, \{\alpha_l^E\}} S' = S_{\omega} + p \sum_I (\hat{\alpha}_I^A)^2,$$

откуда находим

$$S_A^2 = S_{\omega_A} - S_{\omega} = p \sum_I (\hat{\alpha}_I^A)^2.$$

Аналогично получаем остальные величины:

$$S_B^2 = S_{\omega_B} - S_{\omega} = p \sum_j (\hat{\alpha}_j^B)^2;$$

$$S_C^2 = S_{\omega_C} - S_{\omega} = p \sum_k (\hat{\alpha}_k^C)^2;$$

$$S_E^2 = S_{\omega_E} - S_{\omega} = p \sum_l (\hat{\alpha}_l^E)^2.$$

Подставив в (4.110) оценки $\hat{\mu}, \hat{\alpha}_I^A, \hat{\alpha}_j^B, \hat{\alpha}_k^C, \hat{\alpha}_l^E$, получим

$$S_e^2 = S_{\omega} = \sum_D (y_{ijkl} - y_{i***} - y_{*j**} - y_{**k*} - y_{***l} + 3y_{*****})^2.$$

Числа степеней свободы имеют вид

$$f_A = f_B = f_C = f_E = p - 1; \quad f_e = p^2 - 4p + 3 = (p - 1)(p - 3).$$

При нахождении f_e заметим, что в выражении для S_e^2 имеем p^2 случайных величин и на них наложено $4p - 3$ ограничений, связанных с оценкой параметров:

$$\mu; \{\alpha_i^A\}; \{\alpha_j^B\}; \{\alpha_k^C\}; \{\alpha_l^E\}.$$

Рассуждая точно так же, как и при рассмотрении одного латинского квадрата, получим, что полная вариация наблюдений относительно y_{*****} разложена на пять слагаемых: вариации S_e^2 , связанные с наличием шума, и вариации $S_A^2, S_B^2, S_C^2, S_E^2$, связанные с влиянием факторов A, B, C, E соответственно. При проверке гипотез H_A, H_B, H_C, H_E необходимо вычислить величины:

$$F_A = \frac{S_A^2(p-3)}{S_e^2}; \quad F_B = \frac{S_B^2(p-3)}{S_e^2};$$

$$F_{\zeta} = \frac{S_{\zeta}^2(p-3)}{S_e^2}; \quad F_E = \frac{S_E(p-3)}{S_e^2}$$

и сравнить их с порогом $F_{\alpha, p-1, (p-1)(p-3)}$. Если какая-либо из гипотез H_A, H_B, H_C, H_E отвергнута, можно воспользоваться методами множественного сравнения.

ЛИТЕРАТУРА

Кориков А. М. Математические методы планирования эксперимента.—Томск: Изд-во ТГУ, 1973.

Налимов В. В., Чернова Н. А. Статистические методы планирования экстремальных экспериментов.—М.: Наука, 1965.

Налимов В. В. Теория эксперимента.—М.: Наука, 1971.

Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. / Под ред. Лецкого Э. К. — М.: Мир, 1977.

Рао С. Р. Линейные статистические методы и их применения.—М.: Наука, 1968.

Федоров В. В. Теория оптимального эксперимента.—М.: Наука, 1971.

Хьютсон А. Дисперсионный анализ.—М.: Статистика, 1971.

Шеффе Г. Дисперсионный анализ. Физматгиз, 1963.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Введение.	
I. Предмет математической теории эксперимента	4
II. Модель	5
III. Основные идеи и структура курса	8
Глава I. ЛИНЕЙНЫЙ РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ	
§ 1. МНК-оценки при равноточных некоррелированных наблюдениях	11
§ 2. Свойства МНК-оценок	15
§ 3. Законы распределения МНК-оценок и их функций	23
§ 4. Некоторые обобщения МНК-оценок	26
§ 5. МНК-оценки при ограничениях на параметры	28
§ 6. Проверка гипотез и интервальное оценивание	34
Глава II. ПЛАНИРОВАНИЕ РЕГРЕССИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ	
§ 1. Сравнение экспериментов. Функция потерь.	38
§ 2. План эксперимента. Центральные планы. Непрерывные нормированные планы	41
§ 3. Основные свойства информационной матрицы	46
§ 4. Эквивалентность D -оптимальных и минимаксных планов	50
§ 5. Свойства D -оптимальных планов	57
§ 6. Численный метод построения D -оптимальных планов	60
§ 7. Округление непрерывных D -оптимальных планов	72
§ 8. Численный метод построения точных D -оптимальных планов	77
§ 9. Последовательные D -оптимальные планы	81
Глава III. ОРТОГОНАЛЬНЫЕ И РОТАТАБЕЛЬНЫЕ ПЛАНЫ	
§ 1. Принцип ортогональности и принцип ротатабельности в планировании эксперимента	86

§ 2. Планы первого порядка. Полный факторный эксперимент	89
§ 3. Дробный факторный эксперимент	96
§ 4. Симплексные планы	104
§ 5. Центральное композиционное планирование второго порядка	111
§ 6. Ротатабельное планирование порядка d	115
§ 7. Ротатабельное планирование первого и второго порядков	122
§ 8. Обработка результатов эксперимента	127
§ 9. Планирование экстремальных экспериментов	133

Глава IV. ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ

§ 1. Постановка задачи и общее решение	140
§ 2. Однофакторный дисперсионный анализ	145
§ 3. Двухфакторный дисперсионный анализ	149
§ 4. Сбалансированные неполные блоки	163
§ 5. Латинские квадраты	169
§ 6. Ортогональные латинские квадраты	175
Литература	181

1 р. 20 коп.

*Издательство
Томского
университета*