А. Я. ДОРОГОВЦЕВ, доц.
Киевский университет

О ПЛАНИРОВАНИИ РЕГРЕССИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В настоящей заметке рассматриваются две задачи о наилучших в определенном смысле оценках коэффициентов линейной комбинации известных функций, когда оценки строятся по методу наименьших квадратов по искаженной «шумом» линейной комбинации, а известные функции могут быть взяты из некоторого множества. Аналогичные задачи рассматриваются в работе [1].

1. Пусть X — конечномерное пространство непрерывных действительных функций на интервале $[a, b]$, $\varphi_1(t), \varphi_2(t), \ldots, \varphi_m(t)$ — ортонормированный базис в X; каждую функцию $f(t)$ из X можно представить в виде $f(t) = \sum_{k=1}^{m} a_k \varphi_k(t)$, где $a_1, a_2, \ldots, a_m$ — действительные числа, причем

$$\|f\|^2 = \int_a^b f^2(t)\,dt = \sum_{k=1}^{m} a_k^2 .$$

Рассмотрим оценки $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \ldots, \hat{\theta}_n$ параметров $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_n$, построенные по методу наименьших квадратов по реализации процесса

$$y(t) = \sum_{k=1}^{n} \theta_k f_k(t) + \xi(t), \tag{1}$$

наблюдаемой на интервале $[a, b]$. Процесс $\xi(t)$ из формулы (1) имеет нулевое среднее и известную непрерывную корреляционную функцию $r(t, s)$, а функции $f_k(t) \in X$, $k = 1, 2, \ldots, n$.

Нас интересует следующая задача: определить функции $f_1(t)$, $f_2(t), \ldots, f_n(t)$, принадлежащие множеству X и удовлетворяющие условию $\sum_{k=1}^{m} \|f_k\|^2 \leqslant R^2$ ($R > 0$, R — фиксированное число), так, чтобы сумма дисперсий оценок $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \ldots, \hat{\theta}_n$ была наименьшей.

Легко видеть, что оценки $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \ldots, \hat{\theta}_n$ существуют, если функции $f_1(t), f_2(t), \ldots, f_n(t)$ линейно независимы (предполагаем, что

$m \geqslant n$) и определяются формулой

$$\hat{\vec{\theta}} = \mathrm{G} \int\limits_a^b y(t) \vec{f}(t)\, dt,$$

в которой $\hat{\vec{\theta}}$ — вектор-столбец оценок $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \ldots, \hat{\theta}_n$, $\vec{f}(t)$ — вектор-столбец из функций $f_1(t), f_2(t), \ldots, f_n(t)$, а G — матрица размера $n \times n$ с элементами

$$g_{ij} = \int\limits_a^b f_i(t) f_j(t)\, dt, \qquad i, j = 1, 2, \ldots, n.$$

Пусть $f_k(t) = \sum\limits_{i=1}^{m} a_{ki}\varphi_i(t)$, $k = 1, 2, \ldots, n$ и A — матрица размера $n \times m$ с элементами a_{ki}, $k = 1, 2, \ldots, n$; $i = 1, 2, \ldots$ $\ldots, m$. Выражения для суммы дисперсий $\sum\limits_{k=1}^{n} D^2\hat{\theta}_k = \Delta^2$ и суммы $\sum\limits_{k=1}^{n} \| f_k \|^2$ имеют вид

$$\Delta^2 = \int\limits_a^b \int\limits_a^b r(t, s) [\mathrm{G}^{-1}\vec{f}(t)]' [\mathrm{G}^{-1}\vec{f}(s)]\, dt ds = \mathrm{Sp}\, \mathrm{B}\overline{\Phi},$$

$$\sum_{k=1}^{n} \| f_k \|^2 = \mathrm{Sp}\, \mathrm{A'A} = \mathrm{Sp}\, \mathrm{G},$$

где $\mathrm{B} = \mathrm{A'} (\mathrm{AA'})^{-2} \mathrm{A}$, а Φ — матрица размера $m \times m$ с элементами

$$\int\limits_a^b \int\limits_a^b r(t, s) \varphi_k(t) \varphi_j(s)\, dt ds, \qquad k, j = 1, 2, \ldots, m.$$

Очевидно, $\mathrm{A'ABA'A} = \mathrm{A'A}$; отметим, что матрица $\mathrm{A'A}$ размера $m \times m$, вообще говоря, необратима, так как имеет ранг n.

Определим теперь минимум величины $\Delta^2 = \mathrm{Sp}\mathrm{B}\Phi$ с матрицей B, удовлетворяющей соотношению $\mathrm{A'ABA'A} = \mathrm{A'A}$, при условии $\mathrm{Sp}\mathrm{A'A} = \rho^2$, ρ^2— положительное число. Пусть C — ортогональная матрица, приводящая матрицу Φ к диагональному виду: $\mathrm{C'\Phi C} = \Lambda = \| \sigma_k^2 \delta_{kj} \|_{k,j=1}^{m}$; будем предполагать, что функции $\varphi_1(t)$, $\varphi_2(t), \ldots, \varphi_m(t)$ занумерованы так, что $\sigma_1^2 \leqslant \sigma_2^2 \leqslant \ldots \leqslant \sigma_m^2$. Задача о минимизации $\Delta^2 = \mathrm{Sp}\, \mathrm{B}\Phi$ равносильна задаче минимизации величины

$$\mathrm{Sp}\, \mathrm{D}\Lambda$$

при условиях

$$\mathrm{FDF} = \mathrm{F}, \ \mathrm{Sp}\, \mathrm{F} = \rho^2,$$

где $\mathrm{F} = \mathrm{C'A'AC}$, $\mathrm{D} = \mathrm{C'BC}$. Очевидно, матрица F симметрична и неотрицательно определена, поэтому существует ортогональная матрица $T = \| \tau_{kj} \|_{k,j=1}^{m}$, приводящая матрицу F к диагональному виду:

$$T'FT = \begin{Vmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \cdot & & 0 & \\ 0 & & \cdot & & 0 \\ & & & \cdot & \\ & & & \lambda_n & \\ 0 & & & & 0 \end{Vmatrix},$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ — положительные числа. Из соотношения FDF = F однозначно определяется матрица

$$T'DT = \begin{Vmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & & & & \\ & \cdot & & 0 & \\ & & \cdot & & \\ 0 & & & \cdot & 0 \\ & & & \frac{1}{\lambda_n} & \\ 0 & & & & 0 \end{Vmatrix},$$

откуда

$$D = T \begin{Vmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & & & & \\ & \cdot & & & \\ & & \cdot & 0 & \\ 0 & & & \cdot & 0 \\ & & & \frac{1}{\lambda_n} & \\ 0 & & & & 0 \end{Vmatrix} T'.$$

Из этого представления следует, что величина Δ^2 равна

$$\Delta^2 = \operatorname{Sp} D\Lambda = \sum_{i=1}^{m} \sigma_i^2 \sum_{\nu=1}^{n} \tau_{i\nu}^2 \frac{1}{\lambda_\nu} = \sum_{\nu=1}^{n} \frac{1}{\lambda_\nu} \left(\sum_{i=1}^{m} \sigma_i^2 \tau_{i\nu}^2 \right);$$

очевидно, $\operatorname{Sp} F = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$. Легко убедиться, что

$$\Delta^2 \geqslant \frac{1}{\rho^2} \left(\sum_{k=1}^{n} \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sigma_i^2 \tau_{ik}^2} \right)^2,$$

причем знак равенства возможен только в случае, если:

$$\lambda_k = \rho^2 \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sigma_i^2 \tau_{ik}^2} \cdot \left(\sum_{j=1}^{n} \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sigma_i^2 \tau_{ij}^2} \right)^{-1}.$$

Из результатов работы А. Островского [2] получаем точную оценку величины Δ^2:

$$\Delta^2 \geqslant \rho^{-2}\left(\sum_{k=1}^{n}\sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sigma_i^2\tau_{ik}^2}\right)^2 \geqslant \rho^{-2}\cdot(\sigma_1+\sigma_2+\cdots+\sigma_n)^2,$$

причем знак равенства возможен только в случае, если

$$\tau_{kj}=\delta_{kj},\qquad k,\ j=1,\ 2,\ \ldots,\ m.$$

Для матрицы F вида

$$F=\begin{Vmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & 0 & \\ & & \cdot & & \\ 0 & & & \cdot & \\ & & & \cdot & 0 \\ & & & \lambda_n & \\ 0 & & & & 0 \end{Vmatrix},$$

где $\lambda_k=\rho^2\sigma_k\cdot\left(\sum_{i=1}^{n}\sigma_i\right)^{-1}$,

$$D=\begin{Vmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & & & 0 \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ & & \cdot & 0 \\ 0 & & \frac{1}{\lambda_n} & \\ & & & 0 \end{Vmatrix},$$

а величина $\Delta^2=\mathrm{Sp}\,D\Lambda=\rho^{-2}\left(\sum_{k=1}^{n}\sigma_k\right)^2$.

Из проведенных рассуждений следует теорема.

Теорема 1. Сумма дисперсий оценок $\hat\theta_1,\ \hat\theta_2,\ \ldots,\ \hat\theta_n$, полученных по методу наименьших квадратов по реализации процесса

$$y(t)=\sum_{k=1}^{n}\theta_k f_k(t)+\xi(t)$$

на интервале $[a,\ b]$, при условии, что $f_k\in X,\ k=1,\ 2,\ \ldots,\ n$ и $\sum_{k=1}^{n}\|f_k\|^2\leqslant R^2$, принимает наименьшее значение $R^{-2}\left(\sum_{k=1}^{n}\sigma_k\right)^2$, если вектор $\vec f\ (t)$ с компонентами $f_1(t), f_2(t),\ \ldots,\ f_n(t)$ имеет вид

$A\vec{\varphi}(t)$ с матрицей

$$A = \begin{Vmatrix} \sqrt{\lambda_1'} & & & 0 \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ 0 & & & \sqrt{\lambda_n'} \end{Vmatrix} C'$$

или $f_k(t) = \sqrt{\lambda_k'} \sum_{j=1}^{m} c_{jk}\varphi_j(t)$, $\qquad k = 1, 2, \ldots, n$, где $\lambda_k' = \lambda_k$ при $\rho = R$, а $C = \| c_{kj} \|_{k, j=1}^{m}$ — ортогональная матрица, приводящая матрицу Φ к диагональному виду $\| \sigma_k^2 \delta_{kj} \|_{k, j=1}^{m}$, причем $\sigma_1^2 \leqslant \leqslant \sigma_2^2 \leqslant \cdots \leqslant \sigma_m^2$.

2. Сумма дисперсий оценок является одной из мер качества оценок $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \ldots, \hat{\theta}_n$. Другой мерой качества, также употребляемой в статистике, является «обобщенная дисперсия» — определитель матрицы ковариаций оценок. При предположениях п. 1. рассмотрим задачу об определении функций $f_1(t), f_2(t), \ldots, f_n(t)$, для которых определитель

$$\delta^2 \geqslant \det \| M(\hat{\theta}_k - \theta_k)(\hat{\theta}_j - \theta_j) \|_{k,j=1}^{n}$$

принимает наименьшее значение. Эта задача состоит в нахождении матрицы A, удовлетворяющей условию

$$\mathrm{Sp}\, AA' \leqslant R^2,$$

для которой величина

$$\delta^2 = \frac{\det(A\Phi A')}{[\det(AA')]^2}$$

минимальна. Для определения минимального значения величины δ^2 рассмотрим ортогональную матрицу U, приводящую положительно определенную матрицу AA' к диагональному виду, и собственные числа $\lambda_1^2, \lambda_2^2, \ldots, \lambda_n^2$ матрицы AA^1. Величина δ^2, очевидно, равна

$$\delta^2 = \frac{\det(U'A\Phi A'U)}{\left(\prod_{i=1}^{n} \lambda_i^2\right)^2} = \frac{\det(W\Phi W')}{\prod_{k=1}^{n} \lambda_k^2},$$

где $W = VU'A, \quad V = \| \delta_{kj}\lambda_k \|_{k,j=1}^{n}, \quad WW' = \| \delta_{kj} \|_{k,j=1}^{n}$.

При условии $\mathrm{Sp}AA' = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 \leqslant R^2$ величина δ^2 удовлетворяет неравенству

$$\delta^2 \geqslant \frac{n^n}{R^{2n}} \det(W\Phi W').$$

Пусть $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_n$ — ортонормированная последовательность собственных векторов матрицы $W\Phi W'$, очевидно; имеем

$$\det(W\Phi W') = \prod_{k=1}^{n} \vec{x}_k' W\Phi W' \vec{x}_k = \prod_{k=1}^{n} \vec{y}_k' \Phi \vec{y}_k ,$$

где $\vec{y}_k = W'\vec{x}_k$, причем $\vec{y}_k' \vec{y}_j = \vec{x}_k' W W' \vec{x}_j = \delta_{kj}$, $k, j = 1, 2, \ldots, n$.

Используя известное неравенство [3], получаем

$$\prod_{k=1}^{n} \vec{y}_k' \Phi \vec{y}_k \geqslant \sigma_1^2 \cdot \sigma_2^2 \cdot \ldots \cdot \sigma_n^2 .$$

Таким образом,
$$\delta^2 \geqslant \frac{n^n}{R^{2n}} \prod_{k=1}^{n} \sigma_k^2 .$$

Отмегив, что

$$\frac{\det(A\Phi A')}{[\det(AA')]^2} = \frac{\det(H\Lambda H')}{[\det(HH')]^2}, \ \mathrm{Sp}\, AA' = \mathrm{Sp}\, HH',$$

где $H = AC$ или $A = HC'$, получаем такое утверждение.

Теорема 2. Пусть $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \ldots, \hat{\theta}_n$ — оценки параметров $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_n$, полученные по методу наименьших квадратов по реализации процесса

$$y(t) = \sum_{k=1}^{n} \theta_k f_k(t) + \xi(t)$$

на интервале $[a, b]$. Определитель ковариационной матрицы оценок $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \ldots, \hat{\theta}_n$ принимает наименьшее значение

$$n^n R^{-2n} \cdot \prod_{k=1}^{n} \sigma_k^2$$

при условиях $f_k(t) \in X$, $k = 1, 2, \ldots, n$ и $\sum_{k=1}^{n} \|f_k\|^2 \leqslant R^2$;

если
$$f_k(t) = \frac{R}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^{m} c_{jk} \varphi_j(t), \qquad k = 1, 2, \ldots, n.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Дороговцев А. Я. Про деякі задачі оптимального керування регресійним експериментом,— Доповіді АН УРСР, сер. А, № 12, 1968.

2. Ostrowski A. Sur quelques applications des fonctions convexes et concaves au sens de I. Schur.— J. Math. Pures, Appl., 31, 1952.

3. Беккенбах Э., Беллман Р. Неравенства. «Мир», М., 1965.

A. Ya. Dorogovtsev

ON DESIGN OF REGRESSION EXPERIMENT

Summary

Two problems on optimal designs in regression experiment are considered.

Поступила в редколлегию 22.X. 1969.