В.И. Денисов, А.Г. Коровкин, Е.Б. Цой

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЗАДАЧ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА И ИДЕНТИФИКАЦИИ МОДЕЛЕЙ

(Н о в о с и б и р с к)

Существует ряд задач, не зависящих от конкретного вида проводимых прикладных исследований, входящих в состав математического обеспечения систем автоматизации научного эксперимента и определяющих функциональную направленность подобных систем в целом. Их можно сформулировать как задачи математического описания объектов, планирования экспериментов, обработки экспериментальных данных.

Пусть функция отклика, описывающая исследуемый процесс, имеет вид $E(y/x)=\eta(x,\theta)$, где $x^T=\|x_1, \dots, x_k\|$ - вектор контролируемых переменных, $\theta^T=\|\theta_1, \dots, \theta_m\|$ - вектор оцениваемых параметров. Требуется найти оптимальные условия проведения эксперимента, построить план эксперимента ε, обеспечивающий определение оценок параметров θ с максимальной точностью.

В испытаниях на надежность результаты наблюдений группируются так, что после эксперимента известны лишь числа наблюдений, попавших в каждый из интервалов группирования R_i, $i=\overline{1,k}$, но не сами значения наблюдений. Информационная матрица Фишера, характеризующая качество планирования в ситуации группированных наблюдений отклика (ГНО) подобна информационной матрице для нелинейных моделей, а это означает тождественность вычислительных процедур планирования [1], [2].

Рассматриваемый комплекс программ имеет модульную структуру, реализован на ЭВМ ЕС-1020, состоит из трех программ $PRG\,2$, $PRG\,3$, $PRG\,4$, позволяющих строить как точные, так и непрерывные локальные, минимаксные, байесовские D-оптимальные планы эксперимента независимо от типа модели – линейная или нелинейная, а также находить оценки параметров модели.

Программа $PRG\,2$ осуществляет синтез минимаксных планов путем решения следующей дискретной минимаксной задачи:

$$\max_{i \in r} \left\{ \psi_i \left[M(\theta^{(i)}, \varepsilon) \right] \right\} \to \min_{\varepsilon},$$

где $\psi_i[M(\theta^{(i)}, \varepsilon)]$ – функционал от информационной матрицы $M(\theta,\varepsilon)$; r – число параметрических точек $\theta^{(i)} \in \Omega \subset E^n$. В основу процедуры оптимизации положено необходимое условие минимакса в форме $\Gamma^+(x^*) \cap L(x^*) = \emptyset$, где $\Gamma^+(x)$ – конус, сопряженный к конусу возможных направлений множества x в точке x. $L(x) = co\,H(x)$, $H(x) = \{\partial\psi_i(x)/\partial x,\ i = R(x)\}$. Методом оптимизации является наискорейший спуск [3]. Поиск оптимального плана происходит в два этапа. Первый этап – оптимизация по координатам точек плана, второй – по координатам мер плана. Направления вектора наискорейшего спуска в обоих случаях определяются решением квадратичной задачи минимизации расстояния между выпуклой оболочкой $L(x)$ или $L(p)$ конусом $\Gamma^+(x)$ и $\Gamma^+(p)$. Условия Куна-Таккера для квадратичной задачи получены в явном виде.

Применяя метод гладкой аппроксимации для решения минимаксных задач, суть которого заключается в переходе от задачи $\min_{\varepsilon} \max_{i \in r} \{\psi_i[M(\theta^{(i)}, \varepsilon)]\}$ к задаче $\min_{\varepsilon} \Phi_{\psi}(\varepsilon)$ путем построения некоторой обобщенной функции $\Phi_{\psi}(\varepsilon)$, можно получить необходимые и достаточные условия оптимальности минимаксных планов эксперимента [4]. Программа $PRG\,2$ состоит из 57 подпрограмм, две из них являются сменными и составляются пользователем для каждой решаемой задачи; занимаемый объем памяти – 99584 байта без учета памяти под массивы и сменные подпрограммы. Управление программой происходит с помощью 5 индикаторов и 20 констант.

Программа $PRG\,3$ осуществляет синтез байесовских планов путем решения следующей задачи:

$$\Phi = \sum_{i=1}^{r} W_i \psi_i \left[M(\theta^{(i)}, \varepsilon) \right] \to \min_{\varepsilon},$$

где $W^T = \| W_1, \ldots, W_r \|$ – вектор байесовских весов, $\sum_{i=1}^{r} W_i = 1$, $W_i \in [0, 1]$. В основу алгоритма построения байесовских планов с выпуклой функцией потерь положены условия оптимальности, которые устанавливает следующая теорема.

Т е о р е м а. Необходимым и достаточным условием байесовской ψ -оптимальности плана является выполнение равенства

$$\text{макс} \sum_{i=1}^{r} W_i \varphi_i (x, \varepsilon^*) = \sum_{i=1}^{r} W_i \, Sp \, M(\theta^{(i)}, \varepsilon) \partial \psi_i [M(\theta^{(i)}, \varepsilon)] / \partial M(\theta^{(i)}, \varepsilon),$$

где $\varphi_i (x, \varepsilon) = f^T(x, \theta^{(i)}) \partial \psi_i [M(\theta^{(i)}, \varepsilon)] / \partial M(\theta^{(i)}, \varepsilon) f(x, \theta^{(i)})$.

Если r = I, то имеем условие оптимальности локальных планов.Как и в минимаксе здесь также выделяются две вычислительные схемы:по координатам точек и по мерам плана. Обобщенные векторы-градиенты $d_x \Phi$ и $d_p \Phi$ записываются в явном виде: это значительно уменьшает вычислительные затраты. При поиске оптимального значения шага в направлении соответствующего обобщенного градиента исследовались ряд алгоритмов. Наиболее эффективным показал себя симплексный алгоритм Келдера-Мида [5]. Программа PRG 3 состоит из 56 подпрограмм, две подпрограммы сменные, как и в $PRG2$, занимает объем памяти 9849I байт. Управление программой происходит с помощью 5 индикаторов и I3 констант.

Программа $PRG4$ осуществляет построение оценок неизвестных параметров θ нелинейной модели $\eta(x, \theta)$ методом Маркуардта [5]. Итерационный процесс строится по формуле

$$\theta^{(l+1)} = \theta^{(l)} + [M(\theta^{(l)}, \varepsilon) + \lambda^{(l)} I]^{-1} Y(\theta^{(l)}),$$

где $Y(\theta^{(l)}) = (F^T \omega E)^{(l)}$; $F^{(l)} = \| \partial \eta (x_i, \theta^{(l)}) / \partial \theta_j \|$,

$E^{(l)} = \| y_i - \eta(x_j, \theta^{(l)}) \|$; $\omega = \| \omega_{ij} \|$, $\omega_{ij} = 0$ при $i \neq j$ и ω_i при $i = j$; $\lambda^{(l)}$ - параметр, влияющий на формирование направления оптимизации. Характеристика программы: подпрограмм 25, объем памяти 43370 байт, 4 индикатора и 4 константы.

В каждой программе предусмотрено использование под массивы программы всего остатка оперативной памяти, оставшегося после загрузки программы. Такой режим использования оперативной памяти дает возможность работать в ДОС ЕС ЭВМ, в фоновом разделе памяти.

При этом не требуется изменений в головных подпрограммах, связанных с резервированием памяти под массивы. Апробация программного обеспечения производилась на ряде тестовых и практических задач.

П р и м е р I. Расход свежего пара в паровой турбине опи-

2-485.

сывается моделью $D_0 = \theta_0 + \theta_1 N_э + \theta_2 G_п + \theta_3 Q_т$, где $N_э$ – мощность на клемах генератора; $G_п$ – давление производственного отбора; $Q_т$ – давление отопительного отбора. Область планирования $\mathscr{X}$ имеет вид:

$$G_п + 2Q_т \leqslant 550 \qquad -33N_э + 75G_п \leqslant 555$$

$$-11N_э + 8Q_т \leqslant 130 \qquad 105N_э + 24G_п \leqslant 23595$$

$$4N_э + Q_т \leqslant 688 \qquad 155N_э - 24G_п \leqslant 20105.$$

$$40 \leqslant N_э \leqslant 160, \quad 40 \leqslant Q_т \leqslant 90, \quad 200 \leqslant G_п \leqslant 400.$$

С помощью программы $PRG3$ в условиях негруппированных наблюдений был построен точный D-оптимальный план из I0 опытов, табл. I с $\ln|M(\varepsilon^*)| = -24{,}84$.

Таблица I

N п/п	$N_э$	$G_п$	$Q_т$	r
I	50	60	40	2
2	90	255	I40	3
3	I62	274	40	2
4	83	470	40	2
5	I39	60	86	I

Таблица 2

План эксперимента	$\varepsilon^*_л$	$\varepsilon^*_м$	$\varepsilon^*_б$
x_1	0.00	0.00	0.00
x_2	I.00	0.26	0.25
x_3	I0.00	0.54	I0.00
Φ л,м,б	5.30	9.73	6.I2
t c	–	90	I20

Пример 2. $\eta(x,\theta) = \theta_1 + \theta_2 e^{\theta_3 x}$, $0 \leqslant x \leqslant 10$, $\theta^T_{ист} = \|I, -I, -I\|$. Область Ω, $r=3$ определяется тремя точками $\theta^T_1 = \|0{,}5, -2, -3\|$, $\theta^T_2 = \|-0{,}2, -4, -1\|$ $\theta^T_3 = \|0{,}8, -1, -5\|$. $W_i = 1/3$, $i = \overline{1,3}$.
Результаты счета представлены в табл.2.

$$\Phi_Л = \min_{\varepsilon}\{-\ln|M(\theta_{ист}, \varepsilon)|\}, \quad \Phi_М = \underset{\varepsilon}{\text{мин}}\ \underset{i\in r}{\text{макс}}\{-\ln|M(\theta^i, \varepsilon)|\},$$

$$\Phi_Б = \underset{\varepsilon}{\text{мин}}\left\{-\sum_{i=1}^{r} W_i \ln|M(\theta^{(i)}, \varepsilon)|\right\}.$$

Литература

1. Денисов В.И. Математическое обеспечение системы ЭВМ-экспериментатор. М., "Наука", 1977, с. I22-I28.

2. Денисов В.И., Цой Е.Б. К вопросу построения

планов эксперимента при группированных наблюдениях отклика. – В сб.: Применение ЭВМ в оптимальном планировании и управлении. Новосибирск, НГУ, 1976, с. 105-110.

3. Демьянов В.Ф., Малоземов В.Н. Введение в минимакс. М., "Наука", 1972, с. 77-86.
4. Денисов В.И., Цой Е.Б. Условия оптимальности для минимаксных планов эксперимента. – В сб.: Применение ЭВМ в оптимальном планировании и управлении. Новосибирск НГУ, 1977, с. 95-101.
5. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. М., "Мир", 1973, с. 415-421.

А.А. Наумов

О МАТЕМАТИЧЕСКОМ ОБЕСПЕЧЕНИИ СИСТЕМЫ ОПТИМАЛЬНОГО М-ИНВАРИАНТНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ РЕГРЕССИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

(Новосибирск)

Рассматриваются вопросы построения математического обеспечения, предназначенного для решения задач оптимального планирования регрессионных экспериментов в случае неадекватных математических моделей в рамках системы автоматизации экспериментальных исследований. Для полилинейных относительно базисных функций и многооткликовых моделей строятся оптимальные планы, инвариантные относительно неоцениваемых параметров. Оптимальное М-планирование экспериментов проводится с учетом априорной информации качественного и количественного характера.

Пусть истинное уравнение регрессии и ее оценка имеют вид:

$$f(x,A) = L\,(A;\ \varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_p(x)) \qquad (1)$$

и

$$\hat{y}\,(x,\hat{A}_1) = L_1\,(\hat{A}_1;\ \tau_0(x), \tau_1(x), \dots, \tau_r(x)), \qquad (2)$$

где $L(\cdot)$ и $L_1(\cdot)$ – полилинейные формы относительно множеств векторов $\{\varphi_i(x)\}_{i=\overline{0,p}}$ и $\{\tau_i(x)\}_{i=\overline{0,r}}$ с матрицами неизвестных коэффициентов A и оценок $\hat{A}_1$ размерности $(n_0 \times n_1 \times \dots \times n_p)$ и $(\ell_0 \times \ell_1 \times \dots \times \ell_r)$