АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК СССР

ТЕХНИЧЕСКАЯ КИБЕРНЕТИКА

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

МОСКВА · 1976

ТЕХНИЧЕСКАЯ
КИБЕРНЕТИКА
№ 2 · 1976

ЗАДАЧА ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБУСЛОВЛЕННОСТЬ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

В. Ю. БУРМИН

(*Москва*)

В последнее время появились работы, в которых обсуждается возможность нестатистического подхода к задачам планирования экспериментов, например [1, 2]. В частности, если связь между наблюдаемыми величинами и искомыми параметрами описывается системой линейных уравнений, то планирование эксперимента в этом случае сводится к отысканию такой матрицы плана, обратная матрица которой имела бы минимальную норму.

Предположим, что цель эксперимента — определение оценок некоторых неизвестных параметров x_j по наблюдаемым величинам u_i, причем связь между ними записывается в виде

$$Ax=u, \tag{1}$$

где A — прямоугольная матрица полного ранга размерности $n\times m$ $(n\geqslant m)$, вид которой определяется планом эксперимента; $u=\{u_1, u_2, \ldots, u_n\}$ — наблюдаемый вектор; $x=\{x_1, x_2, \ldots, x_m\}$ — искомый вектор. Пусть величины u_i определяются с некоторыми погрешностями Δu_i, которые могут носить как систематический, так и случайный характер. Тогда уравнение $A\tilde{x}=\tilde{u}$, где $\tilde{u}=u+\Delta u$, определяет вектор $\tilde{x}=x+\Delta x$. Учитывая (1), это уравнение можно записать в виде

$$A\Delta x=\Delta u. \tag{2}$$

При принятых предположениях относительно матрицы A решение уравнения (2) запишется в виде

$$\Delta x=(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}\Delta u=A^{+}\Delta u,$$

где A^{+} — обобщенная обратная матрица [3].

Справедливы следующие оценки:

$$\|\Delta x\|\leqslant\|A^{+}\|\cdot\|\Delta u\|, \qquad \|\Delta x\|/\|x\|\leqslant\|A\|\cdot\|A^{+}\|\|\Delta u\|/\|u\|, \tag{3}$$

где $\|\cdot\|$ — любые из норм матриц и векторов, согласованные друг с другом [4]. Соотношения (3) дают оценки соответственно для абсолютного и относительного уклонений вектора x. Легко видеть, что эти оценки тем меньше, чем меньше величины $\|A^{+}\|$ и $\|A\|\cdot\|A^{+}\|$. Таким образом, задача планирования эксперимента сводится к минимизации величины $\|A^{+}\|$ или $\|A\|\cdot\|A^{+}\|$.

Величина $\|A\|\cdot\|A^{+}\|$ часто обозначается через $\mathrm{cond}(A)$ и носит название числа обусловленности системы линейных алгебраических уравнений. Число обусловленности является мерой устойчивости решения системы к возмущениям в исходных данных. В дальнейшем для краткости критерий оптимальности, связанный с минимизацией $\|A^+\|$ или $\|A\|\cdot\|A^+\|$, будем называть критерием C-оптимальности (от condition).

При сопоставлении двух подходов (статистического и нестатистического) к планированию эксперимента естественным образом возникает вопрос: каким образом соотносятся между собой критерии, выработанные статистической теорией планирования эксперимента, и критерий C-оптимальности?

В настоящей работе выясняются условия, при которых эти подходы эквивалентны. Наиболее просто этот вопрос решается для критериев A- и E-оптимальности. Пусть минимизируется эвклидова норма матрицы A^+. Тогда

$$\|A^+\| = \mathrm{Sp}[(A^+)^{\mathrm{T}}A^+] = \mathrm{Sp}[A^+(A^+)^{\mathrm{T}}] =$$
$$= \mathrm{Sp}[(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}A(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}] = \mathrm{Sp}[(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}]$$

и получается критерий A-оптимальности.

Предположим, что минимизируется спектральная норма матрицы A^+. Как известно, она равна корню квадратному из максимального собственного значения матрицы $(A^+)^{\mathrm{T}}A^+$. Но так как ненулевые значения матрицы $(A^+)^{\mathrm{T}}A^+$ совпадают с ненулевыми собственными значениями матрицы $A^+(A^+)^{\mathrm{T}}$ [5], то из соотношения $A^+(A^+)^{\mathrm{T}} = (A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}A(A^{\mathrm{T}}A)^{-1} = (A^{\mathrm{T}}A)^{-1}$ следует, что ненулевые собственные значения матрицы $(A^+)^{\mathrm{T}}A^+$ совпадают с собственными значениями матрицы $(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}$. В этом случае критерий C-оптимальности эквивалентен критерию E-оптимальности.

Одним из самых распространенных критериев в теории планирования экспериментов является критерий D-оптимальности. Для этого критерия наиболее полно разработаны методы построения оптимальных планов и доказаны наиболее общие положения, касающиеся связи критерий D-оптимальности с другими критериями. Ниже выясняются условия, накладываемые на матрицу плана A, при которых критерий D- и C-оптимальности эквивалентны.

Сделаем оценки эвклидовой нормы матрицы A^+. В дальнейшем под нормами матриц и векторов будем понимать эвклидовы нормы. В нашем случае $A^+A = E$, где E — единичная матрица. Последнее равенство означает, что каждая j-я вектор-строка матрицы A^+ ортогональна $m-1$ векторам-столбцам матрицы A, а

$$(a_j^{(+)}a_j) = \|a_j^{(+)}\|\,\|a_j\|\cos\varphi_j = \|a_j^{(+)}\|\,\|a_j\|\sin\psi^j_{m-1} = 1,$$

где $a_j^{(+)}$ — j-я вектор-строка матрицы A^+, а a_j — j-й вектор-столбец матрицы A; φ_j — угол между векторами $a^{(+)}$ и a_j; ψ_{m-1} — угол, дополнительный к φ_j до $\pi/2$. Отсюда получим

$$\|a_j^{(+)}\| = \frac{1}{\|a_j\|\sin\psi^j_{m-1}} \quad \text{и} \quad \|A^+\| = \left(\sum_{j=1}^{m}\frac{1}{\|a_j\|^2\sin^2\psi^j_{m-1}}\right)^{1/2}.$$

Для $\sin\psi^j_{m-1}$ $(j = 1, 2, \ldots, m)$ справедлива оценка, $\sin\psi^j_{m-1} \geqslant \sin\psi^{\min}_{m-1}$, и, следовательно, $\|A^+\| \leqslant (\sin\psi^{\min}_{m-1})^{-1}\left(\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^{-2}\right)^{1/2}$, где $\psi^{\min}_{m-1}$ — наименьший угол из всех ψ^j_{m-1} $(j = 1, 2, \ldots, m)$.

Рассмотрим величину $\delta(A) = \left[\det(A^{\mathrm{T}}A) \Big/ \prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2\right]^{1/2}$. Величина $[\det(A^{\mathrm{T}}A)]^{1/2}$ равна объему параллелепипеда, натянутого на вектор-столбцы матрицы A. Его объем можно вычислить следующим образом. Занумеруем в произвольном порядке столбцы матрицы A. Тогда площадь параллелограмма, натянутого на векторы a_1 и a_2, равна $V_1 = \|a_1\|\,\|a_2\|\sin\psi_1$, где

ψ_1 — угол между векторами a_1 и a_2. Объем параллелепипеда, натянутого на векторы a_1, a_2 и a_3, равен

$$V_3=V_2\|a_3\|\sin\psi_2=\|a_1\|\|a_2\|\|a_3\|\sin\psi_1\sin\psi_2,$$

где ψ_2 — угол между вектором a_3 и его проекцией на подпространство A_2, натянутое на векторы a_1 и a_2. Продолжая вычисления таким же образом, найдем, что

$$V_m=V_{m-1}\|a_{m-1}\|\sin\psi_{m-1}=\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|\prod_{j=1}^{m-1}\sin\psi_j=[\det(A^{\mathrm{T}}A)]^{1/2},$$

где ψ_{m-1} — угол между вектором a_m и подпространством A_{m-1}. Подставляя полученное выражение для $[\det(A^{\mathrm{T}}A)]^{1/2}$ в соотношение для $\delta(A)$, получим $\delta(A)=\prod_{j=1}^{m-1}\sin\psi_j$.

Занумеруем столбцы матрицы A таким образом, чтобы $\psi_{m-1}=\psi_{m-1}^{\min}$ и, следовательно, $\delta(A)=\sin\psi_{m-1}^{\min}\prod_{j=1}^{m-2}\sin\psi_j$. Тогда $\delta^{-1}(A)\geqslant 1/\sin\psi_{m-1}^{\min}$ и $\|A^+\|\leqslant\leqslant\delta^{-1}(A)\left(\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^{-2}\right)^{1/2}$. С другой стороны, для каждого $j=1,2,\ldots,m$ $1/\sin\psi_j\geqslant\geqslant 1$. В результате имеем двустороннюю оценку для $\|A^+\|$:

$$\left(\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^{-2}\right)^{1/2}\leqslant\|A^+\|\leqslant\delta^{-1}(A)\left(\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^{-2}\right)^{1/2}. \tag{4}$$

Нетрудно видеть, что оценки (4) достигаются для матриц с ортогональными столбцами, так как в этом случае для всех $j=1,2,\ldots,m$ $\sin\psi_j=1$ и, следовательно $\|A^+\|=\left(\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^{-2}\right)^{1/2}$. Последнее равенство справедливо также для матриц с $m=2$, поскольку для них $\prod_{j=1}^{m-1}\sin\psi_j=\sin\psi_1$.

Для $\operatorname{cond}(A)=\|A\|\|A^+\|$, где $\|\cdot\|$ — по-прежнему эвклидовы нормы, справедливы следующие оценки:

$$\mu(A)\leqslant\operatorname{cond}(A)\leqslant\beta(A), \tag{5}$$

где $\beta(A)=\mu(A)/\delta(A)$, а $\mu(A)=\left(\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^{-2}\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^2\right)^{1/2}$.

Учитывая неравенства (4) и (5), оценки (3) можно записать в виде

$$\|\Delta x\|\leqslant\delta^{-1}(A)\left(\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^{-2}\right)^{1/2}\|\Delta u\|,\qquad \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}\leqslant\beta(A)\frac{\|\Delta u\|}{\|u\|}.$$

Рассмотрим величины $\delta(A)$, $\mu(A)$ и $\beta(A)$. Величина $\delta(A)$ имеет простой геометрический смысл: $\delta(A)$ суть отношение объема параллелепипеда, натянутого на вектор-столбцы матрицы A, к объему прямоугольного параллелепипеда с ребрами той же длины. Очевидно, что $0\leqslant\delta(A)\leqslant 1$ и равенство $\delta(A)=1$ достигается в том случае, если вектор-столбцы матрицы A взаимно ортогональны. Назовем величину $\delta(A)$ коэффициентом перекоса матрицы A, а $\delta^{-1}(A)$ — скошенностью A. Величина $\mu(A)\geqslant m$ и характеризует неравновесность по столбцам матрицы A, причем равенство $\mu(A)=m$ достигается, если нормы столбцов матрицы A равны между собой, т. е. на равновесных по столбцам матрицах. Величина $\beta(A)$, являясь оценкой $\operatorname{cond}(A)$, служит мерой обусловленности системы линейных уравнений. Для $\beta(A)$ справедлива оценка $\beta(A)\geqslant m$, следующая из соотношений $\delta^{-1}(A)\geqslant 1$ и $\mu(A)\geqslant m$. Равенство $\beta(A)=m$ достигается в том случае, если столбцы матрицы A взаимно ортогональны, а их нормы попарно равны. В этом случае система линейных уравнений будет иметь наилучшую обусловленность.

Выясним, как связана величина определителя матрицы $A^{\mathrm{T}}A$ с величинами $\|A^+\|$ и $\operatorname{cond}(A)$. Пусть $\mathscr{A}$ — множество прямоугольных действительных матриц размерности $n\times m$ $(n\geqslant m)$, нормы которых удовлетворяют неравенству

$$\|A\|^2\leqslant C,\quad C>0. \tag{6}$$

Рассмотрим класс матриц из $\mathscr{A}$, определенный равенством

$$\|A\|^2=C^*, \tag{7}$$

где $C^*\in(0,C]$.

Лемма. Функционал $f(A)=\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2$, где $\|a_j\|$ — норма j-го столбца матрицы A, достигает своего максимального значения на классе матриц определенных равенством (7), в том случае, если $\|a_r\|=\|a_s\|$ $(r,s=1,2,\ldots,m)$.

Доказательство. Условие (7) можно записать в виде $\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^2=C^*$. Тогда, записывая функцию Лагранжа и беря производные по соответствующим переменным, будем иметь

$$\varphi(A)=\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2+\lambda\left(C^*-\sum_{j=1}^{m}\|a_j\|^2\right),$$

$$\frac{\partial\varphi(A)}{\partial(\|a_r\|^2)}=\prod_{\substack{j=1\\ j\neq r}}^{m}\|a_j\|^2-\lambda=0\quad\text{и}\quad\prod_{\substack{j=1\\ j\neq r}}^{m}\|a_j\|^2=\lambda\qquad(r=1,2,\ldots,m).$$

Перемножая последние m равенств между собой, получим

$$\left(\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2\right)^{m-1}=\lambda^m\quad\text{или}\quad\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2=\lambda^{1+1/(m-1)}.$$

Подставляя полученное выше выражение для λ в последнее равенство, найдем $\|a_r\|^2=\lambda^{1/(m-1)}$ $(r=1,2,\ldots,m)$ и, учитывая уравнения связи, получим, что $\lambda^{1/(m-1)}=C^*/m$. Окончательно $\|a_r\|^2=C^*/m$ для всех $r=1,2,\ldots,m$.

Теорема 1. Для того, чтобы величина определителя матрицы $A^{\mathrm{T}}A$, где матрица A задана на классе (7), достигала своего максимального значения, необходимо и достаточно, чтобы вектор-столбцы матрицы A были взаимно ортогональны, а их нормы — попарно равны.

Необходимость. Пусть $\det(A^{\text{т}}A)=\max\det(A^{\text{т}}A)$. Определитель $\det(A^{\text{т}}A)$ есть определитель Грама. Поскольку $\det(A^{\text{т}}A)=\max\det(A^{\text{т}}A)$, то, принимая во внимание свойства определителя Грама, заключаем, что векторы a_j ($j=1, 2, \ldots, m$) взаимно ортогональны и $\det(A^{\text{т}}A)=\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2$. Но в силу доказанной выше леммы $\|a_j\|^2=C^*/m$ для всех $j=1, 2, \ldots, m$.

Достаточность. Пусть вектор-столбцы матрицы A взаимно ортогональны и их нормы попарно равны. Умножим A слева на транспонированную матрицу $A^{\text{т}}$. Тогда матрица $A^{\text{т}}A$ – диагональная матрица с равными диагональными элементами. Определитель этой матрицы равен произведению ее диагональных элементов, т. е. $\det(A^{\text{т}}A)=\prod_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|^2=\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2$. Но поскольку $\det(A^{\text{т}}A)\leqslant\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2$ (оценка Адамара) для всех рассматриваемых матриц, а $f(A)=\prod_{j=1}^{m}\|a_j\|^2$ достигает своего максимального значения, то и $\det(A^{\text{т}}A)$ достигает своего максимального значения. Теорема доказана.

Доказанной теореме нетрудно дать геометрическую интерпретацию. Для этого заметим, что если корень квадратный из оценки Адамара определителя матрицы $A^{\text{т}}A$, т. е. произведение длин вектор-столбцов матрицы A, равен объему прямоугольного параллелепипеда с ребрами, равными длине вектор-столбцов матрицы A, то эвклидова норма матрицы A равна длине диагонали того же параллелепипеда. Следовательно, теорема устанавливает тот факт, что из всех m-мерных параллелепипедов в n-мерном эвклидовом пространстве, у которых диагонали равны, наибольшим объемом обладает прямоугольный параллелепипед с ребрами одинаковой длины, т. е. куб. С другой стороны, если столбцы матрицы A взаимно ортогональны, а их нормы равны, то, как было показано, величина $\operatorname{cond}(A)=\beta(A)=m$ в этом случае минимальна и, следовательно, минимальна величина $\|A^+\|=\operatorname{cond}(A)/\|A\|=m/C^{*1/2}$.

Результат, близкий к результату теоремы 1, но для более узкого класса матриц, устанавливает следующая

Теорема 2. Для того, чтобы величина определителя матрицы $A^{\text{т}}A$, заданной на классе матриц, определенном соотношением $\|a_j\|^2=C_j^*$ из множества $\mathscr{A}$, где $\sum_{j=1}^{m}C_j^*\in(0, C]$ $(j=1, 2, \ldots, m)$, достигала своего максимального значения, необходимо и достаточно, чтобы вектор-столбцы матрицы A были взаимно ортогональны.

Доказательство теоремы 2, опирающееся на свойства определителя Грама и неравенства Адамара, аналогично доказательству теоремы 1.

В этом случае $\operatorname{cond}(A)=\left(\sum_{j=1}^{m}1/C_j^*\sum_{j=1}^{m}C_j^*\right)^{1/2}$, а $\|A^+\|=\operatorname{cond}(A)/\|A\|=\left(\sum_{j=1}^{m}1/C_j^*\right)^{1/2}$.

Теорема 3. Определитель матрицы $A^{\text{т}}A$, где $A\in\mathscr{A}$, достигает своего максимального значения, на классе $\|A\|^2=C$ на матрицах с ортогональными столбцами с одинаковой нормой.

Доказательство. Из теоремы 1 следует, что для каждого $C^*\in(0, C]$ найдется такая матрица A, что $\det(A^{\text{т}}A)=\max\det(A^{\text{т}}A)$. Рассмотрим по одному представителю из каждого класса, а именно тому, который обеспечивает $\max\det(A^{\text{т}}A)$, т. е. рассмотрим множество кубов с разными диагоналями. Ясно, что наибольший объем у куба с наибольшей диагональю, т. е. $\max\det(A^{\text{т}}A)$ из всего множества матриц $\mathscr{A}$, достигается на классе $\|A\|^2=C$ матриц с ортогональными столбцами одинаковой нормы.

Очевидно, при этом cond $(A)=m$, $\|A^+\|=\mathrm{cond}\,(A)/\|A\|=m/C^{1/2}$.

Таким образом, показано, что при соответствующих ограничениях, накладываемых на матрицу плана A, критерии C- и D-оптимальности эквивалентны.

Поступило 22 I 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. «Наука», 1973.
2. *Успенский А. Б., Федоров В. В.* Планирование эксперимента в некоторых задачах математической физики. Кибернетика, 1974, № 4.
3. *Penrose R.* A generalised inverse for matrices. Proc. Cambridg Philos. Soc., 1955, No. 51.
4. *Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н.* Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз, 1961.
5. *Воеводин В. В.* Линейная алгебра. «Наука», 1974.