СБОРНИК **НАУЧНЫХ ТРУДОВ НГТУ. –**

УДК 519.24

Байесовские планы эксперимента для функционалов Дубова: примеры и эффект ветвления[[1]](#footnote-1)\*

Ю. Д. Григорьев1, А. С. груняшин2

1*197022, РФ, г. Санкт-Петербург, ул. профессора Попова, 5, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет, доктор технических наук, профессор кафедры математического обеспечения и применения ЭВМ. E-mail:* yuri\_grigoriev@mail.ru

2*197022, РФ, г. Санкт-Петербург , ул. профессора Попова, 5, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет, магистрант факультета компьютерных технологий и информатики по направлению прикладная математика и информатика. E-mail:agruniashin@gmail.com*

При планировании эксперимента для нелинейных по параметрам моделей регрессии используются различные подходы – локально оптимальное планирование, минимаксное, максимин байесовское и байесовское. Все эти подходы соответствуют различным уровням априорной информации о параметрах модели.

В статье рассматривается байесовский подход для построения планов эксперимента для однопараметрической экспоненциальной модели регрессии. В качестве критерия оптимальности используются пять байесовских *D*-функционалов Дубова. Для этих функционалов в работах Григорьева, Дубова, Федорова, Аткинсона и Донева получены необходимые и достаточные условия оптимальности, обобщающие на байесовский случай классическую теорему эквивалентности Кифера-Вольфовица.

В одномерном случае эти пять функционалов сводятся к трем функционалам, порождающим три класса байесовских планов. В общем случае для построения таких планов требуется задание априорного распределения, удовлетворяющего соответствующим условиям регулярности. В данной работе в качестве такого распределения рассматривается равномерное распределение.

Для рассматриваемых функционалов Дубова и заданного априорного распределения в работе построены одноточечные байесовские планы и найдены их точки ветвления, т. е. такие параметры носителя априорного распределения, при которых спектр одноточечного плана пополняется второй точкой. При дальнейшем увеличении диаметра носителя происходит расширение спектра оптимального плана за счет ветвления второй точки спектра и т. д. Задача численного отыскания второй точки ветвления в работе не рассматривается.

Для проверки байесовских планов на оптимальность используется теорема оптимальности Чалонер-Ларнца, из которой следует, что в общем случае спектр байесовского плана может содержать число точек, превышающее число неизвестных параметров модели.

В статье на примере однопараметрической экспоненциальной модели показано, что три рассматриваемых функционала Дубова (а в общем случае – и все пять функционалов) обладают разным уровнем информативности. Для наиболее информативного критерия, имеющегося среди указанных трех функционалов Дубова, первая точка ветвления отнесена в бесконечность. Это означает, что для любого диаметра носителя собственного априорного распределения байесовский оптимальный план является одноточечным.

**Ключевые слова:** байесовские планы эксперимента, нелинейные функции отклика, одноточечные и двухточечные планы, функционалы Дубова, функция дисперсии, эффект ветвления, теорема эквивалентности, априорное распределение.

DOI: 10.17212/2307-6879-2016-2-58-67

ВВЕДЕНИЕ

Планирование эксперимента для оценивания параметров нелинейных функций отклика  в модели наблюдений

, , , , (1)

требует, в общем случае, специальных подходов, отличных от локально оптимального планирования. Одним из таких подходов является байесовское планирование. Впервые этот подход был рассмотрен в (Григорьев, Денисов, Кораблев [1]). В последующей работе (Григорьев [2]) для произвольного выпуклого функционала от информационной матрицы  с усреднением его по априорному распределению  найдены условия оптимальности байесовских планов , являющиеся обобщением теоремы оптимальности Кифера-Вольфовица (Федоров [3]; Григорьев [4]). В работах Дубова [5], [6] концепция байесовской *D*-оптимальности расширена до пяти функционалов, включающих функционал Григорьева. Наконец, в (Федоров [7]) сформулирована и доказана теорема для первого из функционалов Дубова , при этом Федоров, в дополнение к доказательству, делает замечание относительно числа опорных точек в байесовских планах.

Суть его состоит в том, что байесовский функционал любого вида нельзя представить как функцию от информационной матрицы , как это было в линейном случае. Именно это обстоятельство лежит в основе опирающегося на теорему Каратеодори доказательства существования оптимального плана , имеющего не более чем **** точек. Поскольку теорема Каратеодори не имеет место в байесовском случае, то нельзя говорить и о конечности верхней границы для числа опорных точек в байесовских планах .

Последний факт строго доказан в работах (Чалонер, Ларнц [8], [9]), а затем более подробно исследован в серии последующих работ, см., например, (Чалонер [10]; Детте, Нойгебауэр[12], [13]; Брэсс, Детте [14]). Наконец, исследованию байесовских планов с помощью функционального подхода Меласа посвящены работы Старосельского [15], [16]. Этот список работ может быть продолжен и далее. В связи с этим представляет интерес исследование конкретных задач байесовского планирования для различных моделей  и априорных распределений . Одной частной задаче такого типа посвящена данная работа.

В разделе 1 приводится постановка задачи байесовского планирования. В разделе 2.1 вводятся функционалы Дубова для *D*-байесовских критериев, получаемых при различных способах усреднения функционалов . Согласно данной теореме байесовские планы, как уже отмечалось, проявляют здравое свойство, состоящее в том, что чем более размытым становится априорное распределение (скажем, увеличивается дисперсия параметра ), тем больше опорных точек появляется в байесовском плане . Это поведение планов иллюстрируется на примерах в разделе 2.3.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Будем рассматривать такое планирование, при котором для в модели (1) задается априорное распределение , которое в общем случае, может быть как дискретным, так и непрерывным. Эта априорная информация инкорпорируется в план эксперимента  с помощью функционалов Дубова , представляющих усреднения критерия планирования  по данному априорному распределению . В качестве модели регрессии рассматривается экспоненциальная модель

, , , , (2)

а в качестве априорного распределения – равномерное распределение

 (3)

Цель работы заключается в исследовании поведения планов  при максимизации байесовских функционалов Дубова  при  и определении их первой точки ветвления, т.е. точки , при которой одноточечный байесовский план  становится двухточечным.

2. УСЛОВИЯ ОПТИМАЛЬНОСТИ БАЙЕСОВСКИХ ПЛАНОВ

Существуют различные обобщения байесовской концепции *D*-оптимальности в случае векторного параметра . Следуя (Дубов [5]), приведем пять обобщений теоремы эквивалентности на байесовский случай, отражающие зависимость информационной матрицы от вектора параметров модели .

2. 1ФУНКЦИОНАЛЫ ДУБОВА

Для линеаризованных нелинейных моделей зависимость планов от , как обычно, осуществляется с помощью вектора частных производных

**.**

Запишем информационную матрицу как

.

Обобщением локально оптимального подхода , где  – некоторый, скажем, *D*-, *A*- и т.д. функционал, является рассмотрение критериев планирования вида

,

где – функция распределения .

Все пять рассматриваемых ниже функционалов  байесовского типа определяют задачу байесовского планирования как поиск плана , для которого

. (4)

1. Усредняем информационную матрицу , затем находим обратную к ней и определяем функционал

. (5)

2. Находим обратную матрицу , затем производим усреднение и определяем функционал

. (6)

3. Вычисляем , затем находим и после этого производим усреднение

. (7)

4. Усредняем определитель  и полагаем

. (8)

5. Усредняем определитель  и полагаем

. (9)

Для первых трех критериев в (Дубов [5]) сформулирована, а для критерия и доказана, теорема эквивалентности, являющаяся расширением теоремы эквивалентности Кифера-Вольфовица на байесовский случай.

Критерий  в более общей постановке (как выпуклый функционал от ) – это критерий, который, как уже отмечалось, рассматривался в диссертации (Григорьев [2, c. 90, теорема 3.5]), где доказана соответствующая теорема, обобщающая теорему Дубова для критерия *D*-оптимальности на более общий случай выпуклого функционала . В (Федоров [7, c. 55-57, теорема 5.4]) проводится доказательство теоремы эквивалентности Дубова для критерия , повторяющее ход рассуждений в (Григорьев [2]).

Функционалы , впервые вводятся Дубовым, но условия оптимальности для соответствующих им планов он не приводит. Они сформулированы в 19-й главе книги (Аткинсон, Донев [17, с. 214, табл. 19.1]).

2. 2 ТЕОРЕМА ДУБОВА

Для каждого из случаев 1-5 сформулируем теорему эквивалентности Дубова [5]. Будем использовать следующие сокращения:

, ,.

**Теорема 2.1** (Дубов [5], Аткинсон, Донев [17, глава 19]). Следующие утверждения эквивалентны:

1. План минимизирует , ;
2. План минимизирует функцию максимума

,

где

,

,

,

,

;

1. Имеет место равенство

. (10)

Доказательство теоремы приводится в указанных источниках. При перечисленные пять критериев Дубова сводятся к трем критериям, представленным в табл.1. В ней также указаны целые степени усредненной информационной матрицы, являющейся в данном случае скаляром. Этот скаляр предполагается минимизировать по .

*Таблица 1.*

Редукция критериев для однопараметрических моделей.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Критерий | Функционал | Степень матрицы | Вес  усредненной дисперсии |
| 3 |  | 0 | 1 |
| 2, 5 |  | -1 |  |
| 1, 4 |  | 1 |  |

2. 3 БАЙЕСОВСКИЕ ПЛАНЫ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛОВ ДУБОВА

Рассмотрим примеры байесовских планов для функционала Дубова в однопараметрическом случае. Для этого вернемся к экспоненциальной модели (2), уточнив для нее область планирования 

, , , .

Пусть – равномерное распределение на ,  и – одноточечный план,. Предполагаем, что рассматривается задача планирования на минимум, т. е. .

**Функционал** . Если – одноточечный план, то согласно табл. 1 и (10) имеем:







где опорная точка байесовского плана подлежит определению. Оптимизация  по приводит к выражениям

, , (11)



 (12)

Одноточечный план является байесовским в том и только том случае, если для него выполняется условие

. (13)

Однако оказывается, что в общем случае это не так.

Пусть, . Тогда из (12) следует

, , 

т. е. условие (13) не выполнено. Таким образом, одноточечный план

, ,

не является байесовским в классе всех планов .

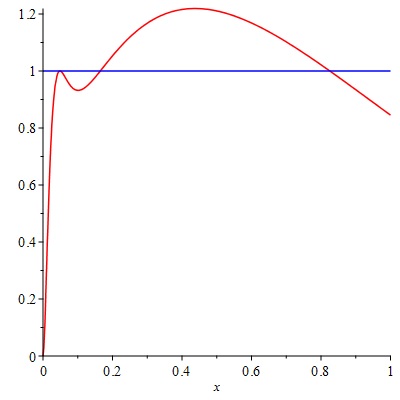


Рис. 1. Функция дисперсии  для одноточечного плана.

Рассмотрим двухточечный план



, .

Поскольку , то отсюда следует, что план лучше плана , хотя это еще не означает его байесовость. Полагая

,

, .

и исследуя усредненную функцию дисперсии

,

заключаем, что для всех  выполняется условие . Следовательно, избыточный план  действительно является байесовским при  и . В этом заключается феномен избыточности, согласно которому при определенных условиях количество опорных точек в байесовских планах будет возрастать.

Ситуация с планами и показывает, что в силу непрерывности существует такое минимальное значение  (при фиксированном ), что при для плана в области нарушается условие байесовости . Это означает, что точка  является границей между одно- и двухточечными планами. В связи с этим значением естественно назвать точкой ветвления плана .

Вычисления показывают, что  Поскольку  , то формально это равенство означает, что оптимальными одновременно являются планы и , при этом фактического противоречия здесь нет. Объясняется это тем, что в двухточечном плане имеется вторая опорная точка , в которой выполнено необходимое и достаточное условие оптимальности , но при этом . Поэтому планы и фактически совпадают. Однако при выполнений условия  вес  точки становится ненулевым, и байесовский план действительно становится двухточечным.

**Функционал** . Аналогично функционалу  получаем



,



,

где опорная точка байесовского плана подлежит определению. Оптимизация  по приводит к точке , являющейся корнем уравнения

,

которое легко разрешимо численно.

Численный анализ показывает, что точкой ветвления в данном случае является точка , при этом пограничный двухточечный план имеет вид:



, .

**Функционал **. Относительно критерия  Дубов высказал замечание [5, с. 110], что он может приводить к странным планам и привел пример двухпараметрической модели , для которой байесовский *D*-оптимальный план оказался состоящим из одной точки. Это “странное” свойство для рассматриваемой нами экспоненциальной модели проявляется в том, что все байесовские планы для нее оказываются одноточечными, т.е. феномен избыточности не возникает.

Следуя той же схеме, что и выше, для функционала  получаем



,



.

Опорная точка байесовского плана легко определяется, так как необходимое условие экстремума для функционала  приводит к уравнению с левой частью

.

Поскольку

,

то отсюда приходим к асимптотическому решению . В силу того,

что  для любых , имеем также

, .

Отсюда видим, что для всех . Все вместе это говорит о том, что эффект ветвления для функционала не возникает. В приводимой ниже таблице представлены байесовские****оптимальные планы для нескольких значений .

*Таблица 2.*

Байесовские – оптимальные планы для нескольких значений .

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| План |  | | | | | |
| 1.2 | 1.5 | 2 | 5 | 10 | 50 |
|  | 0.9141 | 0.8222 | 0.7228 | 0.5308 | 0.5005 | 0.5000 |
| 2.1851 | 2.4190 | 2.7320 | 3.7888 | 4.5836 | 6.2781 |

Из табл. 2 видим, что с ростом  план быстро приближается к предельному ****, но величина , при этом растет, т.е. качество планирования падает.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отыскание точек ветвления  байесовских *D*-планов представляет самостоятельный интерес, но требует изощренных вычислительных алгоритмов. С другой стороны, три типа байесовских функционалов Дубова могут быть классифицированы по уровню представленной в них информации о параметре  в зависимости от способа усреднения. Рассмотренные примеры показывают, что для экспоненциальной модели с одним параметром наименее информативен функционал . Промежуточное положение занимает функционал , и наиболее информативен функционал , так как для него точка ветвления  отнесена в бесконечность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Григорьев Ю. Д., Денисов В. И., Кораблев В. И.* Байесовские планы эксперимента при нелинейной параметризации. – Вкн.: Применение ЭВМ в оптимальном планировании и проектировании. – Новосибирск: НЭТИ, 1974. – С. 3-9.

2. *Григорьев Ю. Д.* Некоторые вопросы построения планов эксперимента при нелинейной параметризации //Дисс. … канд. технич. наук. – Новосибирск: НЭТИ, 1975. – 157 с.

3. *Федоров В. В.* Теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 312 с.

4. *Григорьев Ю. Д.* Методы оптимального планирования эксперимента: линейные модели: Учебное пособие. – СПб.: Лань, 2015. – 320 с.

5. *Дубов Э. Л.* *D*-оптимальные планы при байесовском подходе для нелинейной параметризации. С. 103-111. – В кн.: Регрессионные эксперименты (Планирование и анализ) / ред. В. В. Налимов. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1977. – 230 с.

6. *Дубов Э. Л,* Байесовские оптимальные планы в нелинейных задачах. С. 27-30. – В кн.: Вопросы кибернетики (Линейная и нелинейная параметризация в задачах планирования эксперимента) / Ред. В. В. Налимов, В. В. Федоров. – М.: Научный Совет по комплексной проблеме “Кибернетика” АН СССР, 1981. – 152 с.

7. *Федоров В. В.* Активные регрессионные эксперименты. – В кн.: Математические методы планирования эксперимента. – С. 19-73 / Ред. В. В. Пененко. – Новосибирск: Наука, 1981. – 256 с.

8. *Chaloner K., Larntz K.* Optimal Bayesian experimental design applied to logistic regression experiments. J. Statist. Plann. Infer., 1989, 21, 191-208.

9. *Chaloner K., Larntz K.* Bayesian design for accelerated life testing. J. Statist. Plann. Infer., 1992, 33, 245-260.

10. *Chaloner K.* A note on optimal Bayesian design for nonlinear problems. J. Statist. Plann. Infer. 1993, 37, 229-236.

11. *Dette H., Sperlich S.*  A note on Bayesian *D*-optimal designs for a generalization of the exponential growth model. South African Statist. J., 1994, Vol. 28, 103-117.

12. *Dette H., Neugebauer H.M.* Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models. J. Statist. Plann. Infer., 1996, Vol. 52, 17-31.

13. *Dette H., Neugebauer H. M.* Bayesian *D*-optimal designs for exponential regression models. J. Statist. Plann. Infer., 1997, Vol. 60, 331-349.

14. *Brass D., Dette H.* On the number of support points of maximin and Bayesian D-optimal designs in nonlinear regression models. Annals of Statistics, 2007, 35 (2), 772-792.

15. *Старосельский Ю. М.* Исследование байесовских *D*-оптимальных планов для дробно-рациональных моделей // Вестн. С.-Петербург. Ун-та, СПб., Изд. СПб-ГУ, 2008. – Серия 10. Вып. 3. – С. 98-105.

16. *Старосельский Ю. М.*  Исследование оптимальных планов эксперимента для нелинейных по параметрам регрессионных моделей // Дисс. … канд. физ.-мат. наук. – СПб.: С.-Петербург. ун-т, 2008. – 109 с.

17. *Atkinson A. C., Donev A. N.* Optimal experimental designs. Clarendon Press. Oxford, 1992. -352 p.

***Григорьев Юрий Дмитриевич***, доктор технических наук, профессор кафедры математического обеспечения и применения ЭВМ СПбГЭТУ (ЛЭТИ), специалист в области теории планирования эксперимента, теории риска и теории математической гармонии. Имеет более 130 публикаций в том числе 4 монографии.E-mail: yuri\_grigoriev@mail.ru

***Груняшин Александр Сергеевич,*** магистрант факультета компьютерных технологий и информатики СПбГЭТУ (ЛЭТИ) по направлению прикладная математика и информатика, тематика научных исследований – планирование эксперимента при нелинейной параметризации. E-mail:agruniashin@gmail.com

**Bayesian experimental designs for Dubov’s functionals: examples and branching effect[[2]](#footnote-2)\***

**Y. D. Grigoriev1, A. S. Grunyashin2**

1*St. Petersburg State Electrotechnical University, 5 professor Popov street, St. Petersburg, 197022, Russian Federation, doctor of Technical Sciences, professor of the department of Computer Science of ETU (LETI), an expert in the field of experimental design theory, risk theory and the theory of mathematical harmony. E-mail:* yuri\_grigoriev@mail.ru

2*St. Petersburg State Electrotechnical University, 5 professor Popov street, St. Petersburg, 197022, Russian Federation, graduate student of the department of Computer Science of ETU(LETI) the subject of scientific research is the planning of an experiment for nonlinear parametrization. E-mail:* agruniashin@gmail.com

Different approaches used in designs an experiment for nonlinear regression models are locally optimal design, minimax, maximin bayesian and bayesian. All these approaches correspond to different levels of a priori information about the parameters of the model.

The bayesian design of construction experimental designs for one-parametric exponential regression model are considered in this article. Five bayesian Dubov’s D-functionals are used as a optimally criterion. Necessary and sufficient optimal conditions generalizing classic theorem of Kifer-Volfovich to bayesian case are obtained in Grigoriev, Dubov, Fedorov, Atkinson and Donev works for these functionals.

In the one-dimensional case, these five functionals reduce to three functionals that generate three classes of bayesian designs. In the general case, the construction of such designs requires the assignment of an a priory distribution satisfying the corresponding regularity conditions. In this paper, a uniform distribution is considered as such a distribution.

For the Dubov functionals under consideration and for a given a priori distribution, one-point bayesian designs are constructed and their branch points are found, that is, parameters of the support of the a priori distribution for which the spectrum of the one-point design is replenished by the second point. With a further increase in the diameter of the carrier, the spectrum of the optimal design is expanded due to the branching of the second point of the spectrum, and so on. The problem of finding the second branch point in the paper is not considered.

To verify bayesian designs for optimality, the Chaloner-Larnz optimality theorem is used, from which it follows that in the general case the bayesian spectrum may contain a number of points exceeding the number of unknown parameters of the model.

In this article for example of one-parameter exponential model shows that three concerned Dubov’s functional (in general case-all five functional) possess different level of self-descriptiveness. For more information criterion being among three mentioned Dubov’s functional, first bifurcation point is taken to infinity. It is mean that bayesian optimal design is one-pointed for any diameter bearer of own a prior distribution.

**Keywords:** bayesian design of experiment, nonlinear response functions, single-point and two-point designs, Dubov’s functionals, variance function, branching effect, equivalence theorem, a priori distribution.

DOI: 10.17212/2307-6879-2016-2-58-67

REFERENCES

1. Grigoriev Yu. D., Denisov V. I., Korablev V. I. Bayesovskie plany eksperimenta pri nelinejnoj parametrizatsii. – V knige: Primenenie EVM v optimiljnom planorovanii I proektirovanii. – Novosibirsk: NETI, 1974. – S. 3-9.

2. Grigoriev Yu. D. Nekotorye voprosy postroeniya planov eksperimenta pri nelinejnoj parametrizatsii // Diss. ... kand. tekhnich. nauk. – Novosibirsk: NETI, 1975. 157 s.

3. Fedorov, V. V. (1972). Theory of Optimal Experiments / Translated by W. J. Studden and E. M. Klimko. Academic Press, New York.

4. Grigoriev Yu. D. Metody optimalnogo planirovaniya eksperimenta: linejnye modeli: Uchebnoe posobie. – SPb.: Lan, 2015. – 320 s.

5. Dubov E. L. *D*-optimaljnye plany pri bajesovskom podkhode dlya nelinejnoi parametrizatsii. S. 103-111. – V knige: Regressionnye eksperimenty (Planirovanie I analis) / Red. V. V. Nalimov. – M.: Izd-vo Mosk. un-ta, 1977. – 230 s.

6. Dubov E. L. Bajesovskie optimaljnye plany v nelinejnykh zadachakh. S. 27-30. – V knige: Voprosy kibernetiki ( Linejnaya i nelinejnaya parametrizatsiya v zadachakh planirovaniya eksperimenta) / Red. V. V. Nalimov, V. V. Fedorov. – M.: Nauchnyj Sovet po kompleksnoj problem “ Kibernetika” AN SSSR, 1981. – 152 s.

7. Fedorov V. V. Aktivnye Regressionnye eksperimenty. – V knige: Matematicheskie metody planirovaniya eksperimenta. – C. 19-73 / Red. V. V. Penenko. – Novosibirsk: Nauka, 1981. – 256 s.

8. *Chaloner K., Larntz K.* Optimal Bayesian experimental design applied to logistic regression experiments. J. Statist. Plann. Infer., 1989, 21, 191-208.

9. *Chaloner K., Larntz K.* Bayesian design for accelerated life testing. J. Statist/ Plann. Infer., 1992, 33, 245-260.

10. *Chaloner K.* A note on optimal Bayesian design for nonlinear problems. J. Statist. Plann. Infer. 1993, 37, 229-236.

11. *Dette H., Sperlich S.*  A note on Bayesian *D*-optimal designs for a generalization of the exponential growth model. South African Statist. J., 1994, Vol. 28, 103-117.

12. *Dette H., Neugebauer H. M.* Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models. J. Statist. Plann. Infer., 1996, Vol. 52, 17-31.

13. *Dette H., Neugebauer H. M.* Bayesian *D*-optimal designs for exponential regression models. J. Statist. Plann. Infer., 1997, Vol. 60, 331-349.

14. *Brass D., Dette H.* On the number of support points of maximin and Bayesian *D*-optimal designs in nonlinear regression models. Annals of Statistics, 2007, 35 (2), 772-792.

15. Staroseljsky Yu. M. Issledovanie bajesovskikh *D*-optimaljnykh planov dlya drobno-ratsionaljnykh modolej // Vestnk. S.-Peterburg. un-ta, SPb., Izd. SPbGU, 2008. – Seriya 10. – Vyp. 3. – S. 98-105.

16. Staroseljsky Yu. M. Issledovanie optimaljnykh planov eksperimenta dlya nelinejnykh po parametram regressionnykh modolej // Diss. … kand. Phis.-mat. Nauk. – SPb.: S.-Peterburg. un-t, 2008. – 109 s.

17. *Atkinson A. C., Donev A. N.* Optimal experimental designs. Clarendon Press. Oxford, 1992. -352 p.

1. \* [↑](#footnote-ref-1)
2. \* [↑](#footnote-ref-2)