Максиминные планы эксперимента для коррелированных наблюдений

Андреев Роман Валерьевич

Санкт-Петербургский государственный университет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. Мелас В. Б.

Рецензент: к.ф.-м.н. Шпилев П. В.

Санкт-Петербург
2015г.

Постановка задачи

- $y_i = \eta(x_i, \theta) + \varepsilon_i$ — модель с параметром $\theta \in \mathbb{R}^k$.
- $\xi = \{x_1, \ldots, x_N\}$ — план эксперимента, $x_1 < \ldots < x_N$.
- $\varepsilon_i = \varepsilon(x_i)$ — ошибка эксперимента, $\mathrm{E}\,\varepsilon_i = 0$.
- $\varepsilon(x)$ — стационарный процесс с автоковариационной функцией $R(x_1 - x_2) = \sigma^2\rho(|x_1 - x_2|)$, $\rho(0) = 1$.
- $\widetilde{\theta}$ — априорная оценка параметра.
- $\eta(x_i, \theta) \approx \eta(x_i, \widetilde{\theta}) + X_{i\cdot}(\theta - \widetilde{\theta})$ — линейная аппроксимация.
- $Y = X(\theta - \widetilde{\theta}) + \varepsilon$ — классический линейный вид, где $X_{ij} = \frac{\partial\eta}{\partial\theta_j}(x_i, \widetilde{\theta})$, $Y_i = y_i - \eta(x_i, \widetilde{\theta})$.

Локально оптимальные планы

Определение (Локально D-оптимальный план)

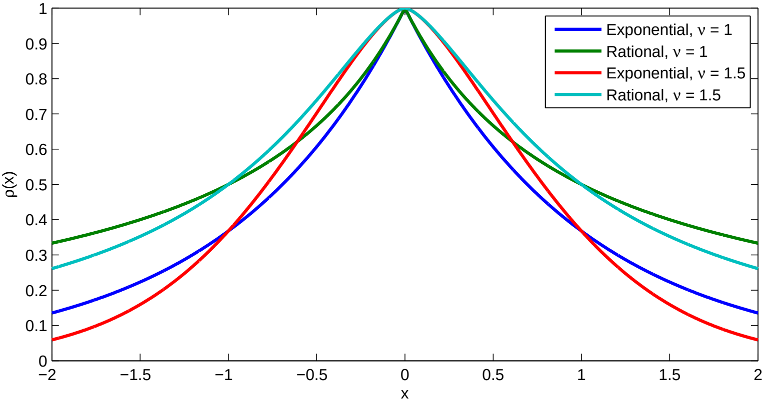
$$\xi_{opt}(\widetilde{\theta}, R(x)) = \arg\max_{\xi} \det M(\xi, \widetilde{\theta}, R(x)),$$ *где*

$M = X^{\mathrm{T}}\Sigma^{-1}X$ — *информационная матрица,*

$\Sigma_{ij} = \operatorname{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = R(x_i - x_j)$ — *ковариационная матрица.*

Корреляционные функции

- Экспоненциальная $e^{-\lambda|x|^{\nu}}$,
- Дробно-рациональная $\frac{1}{1+\lambda|x|^{\nu}}$.



Максиминные планы

Определение (Эффективность плана)

$$\mathrm{eff}(\xi,\lambda) = \left(\frac{\det M(\xi,\lambda)}{\det M(\xi_{opt}(\lambda),\lambda)}\right)^{1/k},$$

$$\mathrm{eff}(\xi) = \min_{\lambda\in[L,R]} \mathrm{eff}(\xi,\lambda),$$ *где*

$\lambda \in [L, R]$ — *неизвестный параметр корреляции,*

k — *размерность пространства параметра* θ.

Определение (Максиминный план)

$$\xi_{maxmin} = \arg\max_{\xi} \mathrm{eff}(\xi).$$

Рассматриваемые задачи

1. Построение ξ_{opt} при фиксированном λ.
2. Изучение поведения $\xi_{opt}(\lambda)$ при $\lambda \in [L, R]$.
3. Построение максиминных планов.
4. Исследование их эффективности.

Исследуемые модели

1. Полиномиальная модель:

$$\eta(x, a_0, a_1, \dots, a_d) = \sum_{i=0}^{d} a_i x^i,$$
$$|x| \leq 1,$$
$$X_i = (x_i^0, x_i^1, \dots, x_i^d).$$

2. Экспоненциальная модель:

$$\eta(x, a_1, b_1, \dots, a_d, b_d) = \sum_{i=1}^{d} a_i e^{-b_i x},$$
$$x \geq 0, b_i > 0,$$
$$X_i = (e^{-b_1 x_i}, -x_i a_1 e^{-b_1 x_i}, \dots, e^{-b_d x_i}, -x_i a_d e^{-b_d x_i}).$$

Планы при фиксированном λ

Задача поиска $\arg\max \det M(\xi)$ в области $\Omega = ([x_{\min}, x_{\max}]^N \cap \{x_1 < x_2 < \ldots < x_N\}) \subset \mathbb{R}^N$.

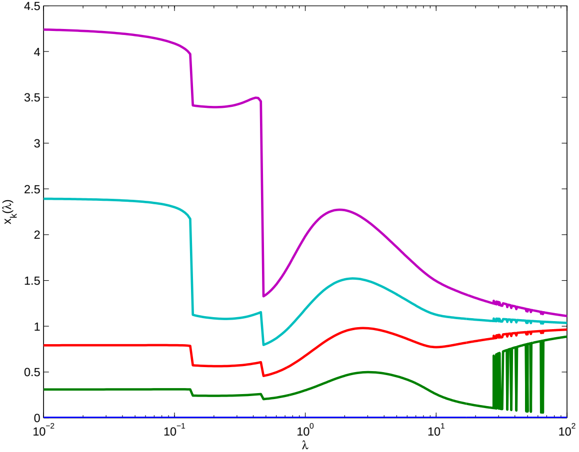
Способы решения:

- Градиентные методы.
- Алгоритм Федорова (модификация градиентного метода): на каждом шаге меняется только одна из точек плана.

Проблемы:

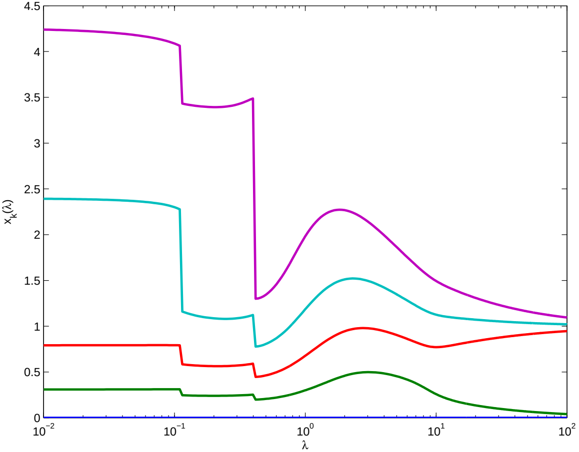
- Выбор стартового приближения.
- Может сойтись к локальному максимуму, а не к глобальному.

Планы при $\lambda \in [L, R]$, наивный алгоритм



Экспоненциальная модель, $d = 1$, $N = 5$, $\rho(x) = e^{-\lambda|x|}$.

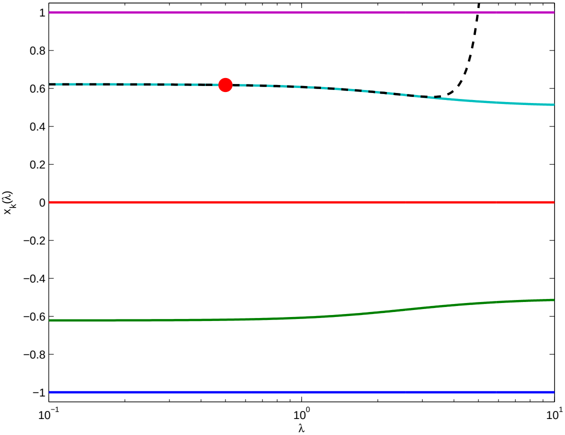
Планы при $\lambda \in [L, R]$, двухпроходный алгоритм



Экспоненциальная модель, $d = 1,\ N = 5,\ \rho(x) = e^{-\lambda|x|}$.

Функциональный подход

Разложим $\xi_{opt}(\lambda)$ в ряд Тейлора в окрестности точки λ_0.



Полиномиальная модель, $d = 3$, $N = 5$, $\rho(x) = e^{-\lambda|x|}$.

Разложение x_4 в точке 0.5.

Планы при $\lambda \in [L, R]$, рекурсивный алгоритм с использованием функционального подхода

- Используя функциональный подход аппроксимируем планы для всех λ в целом отрезке $[L, R]$.
- В результате работы алгоритма мы получим разбиение отрезка $[L, R]$ на подотрезки, на каждом из которых планы аппроксимируются соответствующим рядом Тейлора.

Построение максиминных планов

- Разобьем отрезок $[L, R]$ точками λ_j.
- $\min\limits_{\lambda \in [L,R]} \mathrm{eff}(\xi, \lambda) \approx \min\limits_{j} \mathrm{eff}(\xi, \lambda_j)$.
- Заранее построим аппроксимацию графика

$$f(\lambda) = \det M(\xi_{opt}(\lambda), \lambda),\ \lambda \in \lambda_i.$$

- Запускаем градиентный метод для вычисления $\arg\max\limits_{\xi}$.

Влияние корреляционной функции на максиминный план

Максиминные планы для различных корреляционных функций, экспоненциальная модель, $d = 1$, $N = 6$, $\lambda \in [0, 100]$.

$\rho \backslash \xi$	ξ_1	ξ_2	ξ_3	ξ_4	ξ_5	ξ_6
$\rho_1 = e^{-\lambda\|x\|^{0.5}}$	**0.829**	0.818	0.716	0.778	0.590	0.665
$\rho_2 = \frac{1}{1+\lambda\|x\|^{0.5}}$	0.828	**0.858**	0.715	0.776	0.588	0.663
$\rho_3 = e^{-\lambda\|x\|}$	0.761	0.770	**0.876**	0.841	0.805	0.834
$\rho_4 = \frac{1}{1+\lambda\|x\|}$	0.828	0.838	0.873	**0.915**	0.802	0.859
$\rho_5 = e^{-\lambda\|x\|^{1.5}}$	0.718	0.721	0.824	0.840	**0.937**	0.913
$\rho_6 = \frac{1}{1+\lambda\|x\|^{1.5}}$	0.778	0.787	0.897	0.908	0.944	**0.966**

Влияние степени модели и числа точек плана на эффективность

- Эффективность максиминных планов для полиномиальной модели, $\rho(x) = \frac{1}{1+\lambda x^{1.5}}$, $\lambda \in [0, 100]$.

N / d	1	2	3	4
4	0.9051	0.9693	0.9692	
5	0.9347	0.9730	0.9705	0.9636

- Эффективность максиминных планов для экспоненциальной модели, $\rho(x) = \frac{1}{1+\lambda|x|^{1.5}}$, $\lambda \in [0, 100]$.

$d \backslash N$	2	3	4	5	6
1	0.8865	0.8942	0.9473	0.9594	0.9663
2			0.9233	0.9261	0.9320

Итоги

- Построены зависимости $\xi_{opt}(\lambda)$, а также максиминные планы.
- Показано, что максиминные планы имеют высокую эффективность.
- Найдено, что в случае экспоненциальной модели и малого числа измерений эффективность максиминных планов более чем в два раза превосходит эффективность планов, построенных без учета корреляции.
- Рассмотрено поведение эффективности максиминных планов при корреляционной модели, отличающейся от истинной.
- Изучена зависимость эффективности максиминных планов от числа точек плана и от степени модели.