Компромиссные планы для дробно-рациональных моделей

Страшко Владислав Алексеевич, гр. 422

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели

Научный руководитель: д.ф.-м.н. профессор Мелас В.Б.
Рецензент: к.ф.-м.н. доцент Шпилев П.В.

СтатМод

Санкт-Петербург
2018г.

Регрессионная модель

Рассмотрим регрессионную модель:

$$y_i = \eta(x_i, \Theta) + \varepsilon_i, i = 1, \dots, n, \Theta \in \Omega \subset \mathbb{R}^m$$

где:

- $\eta(x_i, \Theta)$ — функция, известная с точностью до вектора параметров;
- $\Theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)^{\mathrm{T}}$;
- Ω — компактное множество в $\mathbb{R}^m$;
- $x_1, \dots, x_n$ — входные данные;
- $y_i, \dots, y_n$ — сигналы на выходе;
- ε_i — независимые одинаково распределенные случайные величины такие, что $E\varepsilon_i = 0, D\varepsilon_i = \sigma^2$.

Задачи

- Выбор одной из двух конкурирующих регрессионных моделей,
- Оценка параметров выбранной модели.

Регрессионная модель: задачи

Рассмотрим два класса моделей:

- $\eta_1(x,\Theta_1) = \theta_{0,1} + \theta_{1,1}x + \ldots + \theta_{n,1}x^n$,
- $\eta_2(x,\Theta_2) = \theta_{0,2} + \theta_{1,2}x + \ldots + \theta_{n,2}x^n + \sum_{i=1}^{k} \dfrac{\theta_{n+i}}{x - \theta_{i+n+k}}$,

$x \in \mathcal{X} = [0,d], \theta_{i+n+k} > d \qquad \forall i$

Возникают две задачи:

1. Оценка параметров

МНК-оценка

$$\sum_{j=1}^{n} (\eta_i(x_j,\Theta_i) - y_j)^2 \to \min_{\Theta}, \qquad i = 1,2$$

2. Задача дискриминации:
   $\eta_1(x,\Theta_1)$ «вложена» в $\eta_2(x,\Theta_2)$
   Задача проверки гипотезы

   $$H_0 : (\theta_{n+1},\ldots,\theta_{n+k}) = (0,\ldots,0)$$

   Против альтернативы

   $$H_1 : (\theta_{n+1},\ldots,\theta_{n+k}) \neq (0,\ldots,0).$$

Определение

План эксперимента — дискретная вероятностная мера

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_n \\ \omega_1 & \dots & \omega_n \end{pmatrix}, x_i \in \mathcal{X}, i = 1, \dots, n,$$

где $\mathcal{X}$ — множество планирования, $\omega_i \geq 0, \sum_{i=1}^{n} \omega_i = 1, \omega_i$ — весовые коэффициенты, n — число точек в плане.

Если нужно выполнить N измерений, в опорных точках плана реализуется примерно Nw_i вычислений.

Информационная матрица

$$M(\xi, \Theta) = \int_{\mathcal{X}} f(x, \Theta) f^{\mathrm{T}}(x, \Theta) \xi(dx) = \begin{pmatrix} M_{11}(\xi, \Theta) & M_{12}(\xi, \Theta) \\ M_{21}(\xi, \Theta) & M_{22}(\xi, \Theta) \end{pmatrix},$$

где

$$f^{\mathrm{T}}(x, \Theta) = (f_1, \dots, f_m), f_i(x, \Theta) = \frac{\partial \eta(x, \Theta)}{\partial \theta_i}.$$

$$M_s(\xi, \Theta) = M_{22}(\xi, \Theta) - X^{\mathrm{T}} M_{11}(\xi, \Theta) X,$$

где X — любое решение матричного уравнения $M_{11}(\xi, \Theta) X = M_{12}(\xi, \Theta)$.

D-критерий

План ξ^*, максимизирующий $\det M(\xi, \Theta)$ при $\Theta = \Theta_0$, называется **локально D-оптимальным**.

D_s-критерий

План ξ^*, максимизирующий $\det M_s(\xi, \Theta)$ при $\Theta = \Theta_0$, называется **локально D_s-оптимальным**.

Замечание [Карлин, Стадден, 1976]

$$\det M_s(\xi, \Theta) = \frac{\det M(\xi, \Theta)}{\det M_{11}(\xi, \Theta)}$$

Эффективность

$$\mathrm{Eff}(\xi) = \frac{\sqrt[m]{\det \Phi(\xi, \Theta)}}{\sqrt[m]{\det \Phi(\xi^*, \Theta)}},$$

где Φ — некоторый критерий оптимальности, m — количество оцениваемых параметров, ξ^* — оптимальный план в смысле критения Φ

Задача

Построение плана эксперимента, который позволит эффективно решить две задачи одновременно:

- Выбор одной из двух регрессионных моделей,
- Оценка параметров выбранной модели.

Максиминная постановка:

$$\xi_{opt} = \arg\max_{\xi} \min \left\{ \frac{\sqrt[m]{\det M(\xi,\Theta)}}{\sqrt[m]{\det M(\xi_{pol},\Theta)}}, \frac{\sqrt[m]{\det M(\xi,\Theta)}}{\sqrt[m]{\det M(\xi_{rat},\Theta)}}, \frac{\sqrt[s]{\dfrac{\det M_n(\xi,\Theta)}{\det M_s(\xi,\Theta)}}}{\sqrt[s]{\dfrac{\det M_n(\xi_s,\Theta)}{\det M_s(\xi_s,\Theta)}}} \right\},$$

где ξ_{pol} — D-оптимальный план для полиномиальной модели, ξ_{rat} — для дробно-рациональной, ξ_s — усеченный D-оптимальный план.

Рассматриваемые модели:

$$\eta_1(x,\Theta_1) = \theta_{0,1} + \theta_{1,1}x + \ldots + \theta_{n,1}x^n, \tag{1}$$

$$\eta_2(x,\Theta_2) = \theta_{0,2} + \theta_{1,2}x + \ldots + \theta_{n,2}x^n + \sum_{i=1}^{k} \frac{\theta_{n+i}}{x - \theta_{i+n+k}}, \tag{2}$$

$\mathcal{X} = [0,d], \theta_{i+n+k} > d.$

Обозначим M_1 информационную матрицу для модели (1), а M_2 — информационную матрицу модели (2).

Выпуклая комбинация [Cook, Wong, 1994]

$$\Psi_\alpha(\xi,\Theta) = (1-\alpha)\ln\frac{\det M_2(\xi,\Theta)}{\det M_1(\xi,\Theta)} + \alpha\ln(\det M_1(\xi,\Theta)) \to \max_{\xi}.$$

План ξ^*_α, максимизирующий $\Psi_\alpha(\xi,\Theta)$ при $\Theta = \Theta_0$ будем называть локально Ψ_α-оптимальным, или компромиссным.

Три частных случая:

- $\alpha = 0$: усеченный D-оптимальный план;
- $\alpha = \frac{1}{2}$: D-оптимальный план для полной модели;
- $\alpha = 1$: D-оптимальный план для полиномиальной модели.

Теорема (Эквивалентности)

$$d_\alpha(x,\xi) = \alpha d_1(x,\xi) + (1-\alpha) d_s(x,\xi),$$

где $d_1(x,\xi) = f_1^{\mathrm{T}}(x) M_1^{-1}(\xi) f_1(x)$,
$d_s(x,\xi) = f^{\mathrm{T}}(x) M_2^{-1}(\xi) f(x) - f_1^{\mathrm{T}}(x) M_1^{-1}(\xi) f_1(x)$.
Для любого $\alpha \in [0,1]$ следующие условия эквивалентны:

1. План ξ^* локально Ψ_α- оптимальный;
2. $\max_x d_\alpha(x,\xi^*) = (n+1)\alpha + 2k(1-\alpha)$;

Кроме того, существует единственный локально Ψ_γ-оптимальный план. Он сосредоточен в $n+2k+1$ точках, причем концы отрезка 0 и d являются опорными точками плана.

Теорема

Существует единственное $\alpha \in [0,1]$, такое, что $\xi_\alpha = \xi_{opt}$ — решение максиминной задачи, где $\xi_\alpha = \Psi_\alpha$-оптимальный план.

Рассмотрим модели

$$\eta_1(x,\Theta_1) = \theta_{0,1} + \theta_{1,1}x + \ldots + \theta_{n,1}x^n,$$
$$\eta_2(x,\Theta_2) = \theta_{0,2} + \theta_{1,2}x + \ldots + \theta_{n,2}x^n + \frac{\theta_{n+1}}{x-\theta_{n+2}},$$

для случаев $n = 1,2$. Положим $\mathcal{X} = [0,1], \theta^0_{n+2} = 5$.
Компромиссный план для линейной модели имеет вид

$$\xi^*_\alpha = \begin{pmatrix} 0 & x^*_2 & x^*_3 & 1 \\ \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 & \omega_4 \end{pmatrix}.$$

Компромиссный план для квадратичной модели имеет вид

$$\xi^*_\alpha = \begin{pmatrix} 0 & x^*_2 & x^*_3 & x^*_4 & 1 \\ \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 & \omega_4 & \omega_5 \end{pmatrix}.$$

Задача построения компромиссного плана представляет собой векторную оптимизацию функции$\Psi_\alpha(\xi) = \Psi_\alpha(x_2,\ldots,x_{n+1},\omega_1,\ldots,\omega_{n+2})$.
Построение компромиссных планов реализовано на языке R при помощи метода Nelder-Mead (пакет nloptr).

Таблица: Компромиссные планы при различных значениях α для линейной модели

α	x1	x2	x3	x4	w1	w2	w3	w4
0	0	0.329	0.736	1	0.191	0.301	0.299	0.209
0.15	0	0.324	0.739	1	0.203	0.291	0.288	0.217
0.3	0	0.318	0.744	1	0.219	0.278	0.275	0.228
0.45	0	0.31	0.750	1	0.241	0.258	0.257	0.243
0.5	0	0.304	0.755	1	0.25	0.25	0.25	0.25
0.6	0	0.3	0.759	1	0.272	0.229	0.232	0.267
0.75	0	0.287	0.773	1	0.319	0.183	0.192	0.305
0.9	0	0.268	0.796	1	0.401	0.101	0.115	0.383
1	0	0.033	0.976	1	0.5	0	0	0.5

Таблица: Эффективность компромиссных планов относительно различных критериев оптимальности

α	rational	linear	truncated
0	0.974	0.705	1
0.15	0.984	0.721	0.998
0.3	0.993	0.740	0.990
0.45	0.999	0.764	0.970
0.5	1	0.774	0.959
0.6	0.996	0.798	0.924
0.73	0.971	0.838	0.836
0.9	0.803	0.920	0.521
1	0.0003	1	0.0005

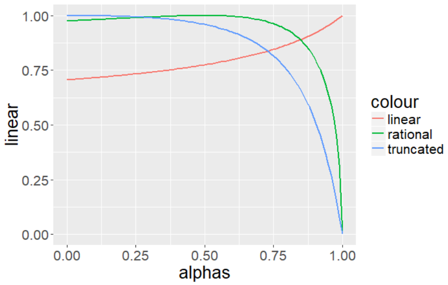

Рис.: Эффективность компромиссных планов при различных α относительно D-оптимального для линейной модели, D-оптимального плана для дробно-рациональной модели, усеченного D-оптимального плана

Таблица: Компромиссные планы для различных α для квадратичной модели

α	x1	x2	x3	x4	x5	w1	w2	w3	w4	w5
0	0	0.193	0.533	0.838	1	0.134	0.251	0.2	0.263	0.152
0.15	0	0.191	0.532	0.840	1	0.149	0.241	0.199	0.249	0.162
0.3	0	0.188	0.531	0.842	1	0.169	0.227	0.197	0.231	0.176
0.45	0	0.188	0.529	0.843	1	0.191	0.208	0.198	0.209	0.194
0.5	0	0.189	0.528	0.843	1	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
0.6	0	0.191	0.526	0.843	1	0.219	0.181	0.205	0.179	0.216
0.75	0	0.199	0.522	0.841	1	0.253	0.143	0.22	0.137	0.247
0.9	0	0.219	0.513	0.835	1	0.297	0.079	0.261	0.072	0.291
1	0	0.033	0.5	0.6	1	0.333	0	0.333	0	0.333

Таблица: Эффективность компромиссных планов относительно различных критериев оптимальности

α	rational	quadratic	trunc
0	0.965	0.748	1
0.15	0.979	0.769	0.996
0.3	0.991	0.791	0.983
0.45	0.999	0.817	0.954
0.5	1	0.827	0.939
0.6	0.996	0.849	0.895
0.65	0.99	0.86	0.86
0.75	0.964	0.888	0.772
0.9	0.824	0.944	0.475
1	0.037	1	0.0001

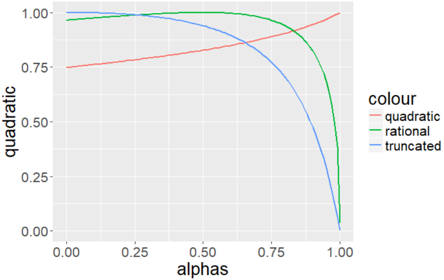

Рис.: Эффективность компромиссных планов при различных α относительно D-оптимального для квадратичной модели, D-оптимального плана для дробно-рациональной модели, усеченного D-оптимального плана

Влияние начального приближения

- $\eta_1(x, \Theta_1) = \theta_{0,1} + \theta_{1,1}x + \ldots + \theta_{n,1}x^n$,
- $\eta_2(x, \Theta_2) = \theta_{0,2} + \theta_{1,2}x + \ldots + \theta_{n,2}x^n + \dfrac{\theta_{n+1}}{x - \theta_{n+2}}$,

Компромиссные планы являются локально оптимальными.

- $\xi^* = \xi^*(\theta^0_{n+2})$, где θ^0_{n+2} — начальное приближение θ_{n+2};
- Зафиксируем θ_{n+2};
- найдем компромиссные планы при различных θ^0_{n+2}, вычислим эффективности.

Пусть $\theta_3 = 5$, $\theta_3^0 \in [1.5, 10]$.

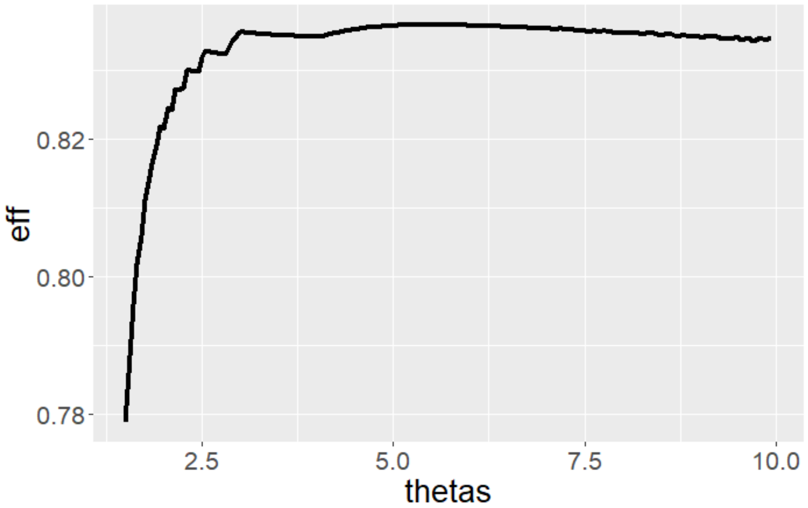

Рис.: Зависимость эффективности максиминного плана от начального приближения θ_3^0 для линейной модели при истинном значении равном 5

Пусть $\theta_4 = 5$, $\theta_4^0 \in [1.5, 6.5]$.

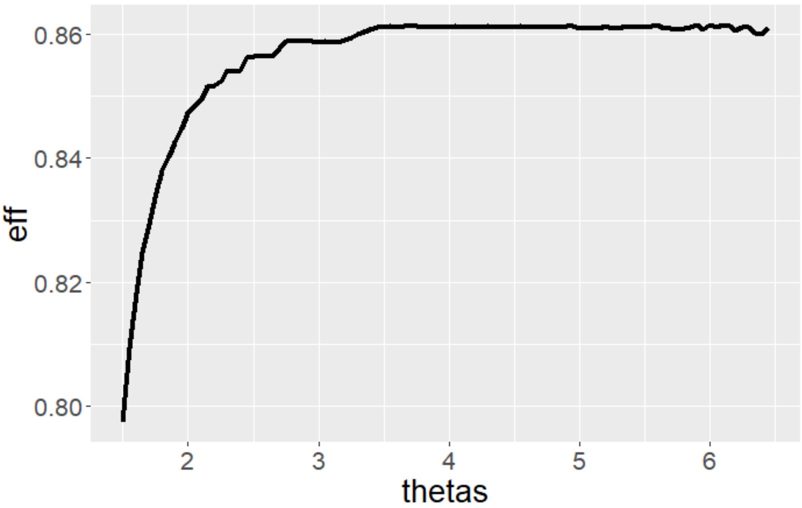

Рис.: Зависимость эффективности максиминного плана от начального приближения θ_4^0 для квадратичной модели при истинном значении равном 5

Заключение

Итоги:

- Предложен компромиссный критерий оптимальности, доказана теорема эквивалентности;
- Доказано утверждение о том, что решение максиминной задачи содержится в классе компромиссных планов;
- Численно построены планы для $n = 1, 2,\ k = 1$ и также исследованы показатели эффективности;
- Исследовано влияние начального приближения на эффективность.

Cook R., Wong W. K. On Equivalence of Constrained and Compound Optimal Designs // Journal of the American Statistical Association. — 1994. — Vol. 89, no. 426. — P. 687–692.

Карлин С., Стадден В. Чебышевские системы и их применение в анализе и статистике. — М. : Наука, 1976. — 568 с.

Мелас В.Б. Локально оптимальные планы эксперимента: учеб. пособие. — СПб : Изд-во СПбГТУ, 1999. — 48 с.