

ЛОКАЛЬНО-ОПТИМАЛЬНЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ ПЛАНЫ В ДУАЛЬНОЙ ПОСТАНОВКЕ

С. М. БЕРСЕНЕВ, Н. И. САБЛИН

(Представлена научным семинаром НИИ ядерной физики, электроники и автоматики)

В настоящей работе вводится функционал, отражающий дуальность эксперимента, приводятся необходимые и достаточные условия локальной оптимальности, предлагается итерационная процедура построения локально-оптимального плана. Подобная задача решалась, например, в [1] с помощью информационного метода, однако без вывода условий оптимальности.

Пусть $\eta_1(x, \Theta_1)$, $\eta_2(x, \Theta_2)$, ..., $\eta_m(x, \Theta_m)$ непрерывные, линейные по параметрам функции, заданные на замкнутом множестве X , X — область возможных измерений, $X \subseteq \bar{X}$; $\xi(x)$ — вероятностная мера, заданная на области X , $y(x)$ — результаты наблюдения, причем

$$E(y/x) = \begin{cases} \eta_1(x, \theta_1), \\ \eta_m(x, \theta_m), \end{cases} \quad (1)$$

E — оператор усреднения по результатам наблюдений.

Будем предполагать, что результаты наблюдений распределены по нормальному закону с функцией плотности вероятности

$$\varphi_i(y_n) = (2\pi(\lambda(x)^{-1} + d_i(x, \varepsilon)))^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{(y_n - \hat{\eta}_i(x, \hat{\theta}_i(\varepsilon)))^2}{\lambda(x)^{-1} + d_i(x, \varepsilon)}\right\};$$

здесь $\hat{\eta}_i(x, \hat{\theta}_i, \varepsilon)$ — оценка i -й гипотезы по методу наименьших квадратов после проведения эксперимента по плану ε , который понимается как

$$\varepsilon = \left\{ \begin{matrix} \xi(x_1) \cdots \xi(x_n) \\ x_1 \cdots x_n \end{matrix} \right\}, \quad x_i \in X, \quad \int_X d\xi(x) = 1;$$

$d_i(x, \varepsilon) = f_i^T(x) M_i^{-1}(\varepsilon) f_i(x)$ — коридор ошибок i -й гипотезы;

$M_i(\varepsilon) = \int_X \lambda(x) f_i^T(x) d\xi(x)$ — информационная матрица;

$\lambda(x)^{-1}$ — дисперсия наблюдений в точке x .

Введем вектор априорных вероятностей, связанных с соответствующими гипотезами

$$P^T = \|p_1, \dots, p_m\|,$$

элементы которого после каждого измерения в точке x могут быть рассчитаны по формуле Байеса:

$$p_{i,n} = \frac{p_{i,n-1} \Phi_i(y_n)}{\sum_{j=1}^m p_{j,n-1} \Phi_j(y_n)} \quad (2)$$

Поставим задачу о поиске плана эксперимента, осуществляя который мы проведем наилучший эксперимент не только для дискриминации, но и для уточнения параметров истинной модели в смысле D -оптимальности. Введем функционал:

$$\begin{aligned} \Delta(\varepsilon) &= P^T A(\varepsilon) P; \\ A(\varepsilon) &= \omega_1 \int_X D(\varepsilon, x) d\xi(x) + \omega_2 L(\varepsilon); \end{aligned} \quad (3)$$

здесь ω_1 и ω_2 — весовые множители;

$D(\varepsilon, x)$ $L(\varepsilon)$ — матрицы, характеризующие дискриминацию и уточнение соответственно. Определим их элементы следующим образом:

$$\begin{aligned} d_{ij} &= \begin{cases} 0, & i=j \\ \lambda(x) (\hat{\eta}_i(\varepsilon) - \hat{\eta}_j(\varepsilon)), & i \neq j; \end{cases} \\ \hat{\eta}_i(\varepsilon) &= \hat{\eta}_i(x, \hat{\theta}_i, \varepsilon), \\ l_{ij} &= \begin{cases} \ln |M_j(\varepsilon)|, & i=j \\ 0, & i \neq j, \end{cases} \end{aligned}$$

Кроме того, введем матрицы

$$\begin{aligned} \bar{A}(\varepsilon, x) &= \omega_1 D(\varepsilon, x) + \omega_2 \bar{L}(\varepsilon, x), \\ \bar{l}_{ij} &= \begin{cases} 0, & i \neq j \\ \lambda(x) d_j(x, \varepsilon), & i=j; \end{cases} \\ \tilde{A}(\varepsilon) &= \omega_1 \int_X D(\varepsilon, x) d\xi(x) + \omega_2 K, \\ k_{ij} &= \begin{cases} 0, & i \neq j \\ k_j, & i=j, \end{cases} \end{aligned}$$

k_j — число параметров в j -й гипотезе.

План ε считаем локально-оптимальным, если он доставляет максимум (3) при заданном P .

Рассмотрим план, являющийся линейной комбинацией двух планов

$$\varepsilon = (1-\alpha)\varepsilon_1 + \alpha\varepsilon_2, \quad \alpha \in [0, 1];$$

ε_1 — невырожденный, т. е. $|M_j(\varepsilon_1)| = 0, j=1, \dots, m$.

Л е м м а.

$$\frac{\partial \Delta(\varepsilon)}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0} = P^T \int_X \bar{A}(\varepsilon_1, x) d\xi_2(x) P - P^T \tilde{A}(\varepsilon_1) P, \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta(\varepsilon)}{\partial \alpha^2} < 0; \quad \alpha \in [0, 1]. \quad (5)$$

Доказательство. Вычислим указанные производные для элементов $L(\varepsilon)$, $\int_X D(\varepsilon, x) d\xi(x)$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |M_j(\varepsilon)| &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln |(1-\alpha)M_j(\varepsilon_1) + \alpha M_j(\varepsilon_2)| = \\ &= \text{sp } M_j^{-1}(\varepsilon) [M_j(\varepsilon_2) - M_j(\varepsilon_1)] \Big|_{\alpha=0} = \\ &= \text{sp } M_j^{-1}(\varepsilon_1) M_j(\varepsilon_2) - \text{sp } M_j^{-1}(\varepsilon_1) \cdot M_j(\varepsilon_1) = \\ &= \int_X \lambda(x) f_j^T(x) M_j^{-1}(\varepsilon_1) f_j(x) d\xi(x) - k_j, \\ \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \ln |M_j(\varepsilon)| &= \text{sp} \{-M_j^{-1}(\varepsilon) [M_j(\varepsilon_2) - M_j(\varepsilon_1)] M_j^{-1}(\varepsilon) [M_j(\varepsilon_2) - M_j(\varepsilon_1)]\} = \\ &= -\text{sp} \{M_j^{-1}(\varepsilon) [M_j(\varepsilon_2) - M_j(\varepsilon_1)]\}^2 < 0. \end{aligned}$$

Преобразуем элемент матрицы $\int_X D(\varepsilon, x) d\xi(x)$:

$$\int_X \lambda(x) (\hat{\eta}_i(\varepsilon) - \hat{\eta}_j(\varepsilon))^2 d\xi(x) = \int_X \lambda(x) (\hat{\eta}_i(\varepsilon) - \eta_u + \eta_u - \hat{\eta}_j(\varepsilon))^2 d\xi(x),$$

где η_u — истинная гипотеза, равная в точке x результату наблюдения,

$\hat{\eta}_i(\varepsilon)$ — величина, построенная по типу наилучшей линейной оценки. Предполагая, что система гипотез независима, получим

$$\begin{aligned} \int_X \lambda(x) (\hat{\eta}_i(\varepsilon) - \hat{\eta}_j(\varepsilon))^2 d\xi(x) &= \int_X \lambda(x) (\eta_u - \hat{\eta}_i(\varepsilon))^2 d\xi(x) + \\ &+ \int_X \lambda(x) (\eta_u - \hat{\eta}_j(\varepsilon))^2 d\xi(x). \end{aligned}$$

При вычислении производных воспользуемся результатом [2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_X \lambda(x) (\eta_u - \hat{\eta}_j(\varepsilon))^2 d\xi(x) \Big|_{\alpha=0} &= \int_X \lambda(x) (\eta_u - \hat{\eta}_j(\varepsilon_1))^2 d\xi_2(x) - \\ &- \int_X \lambda(x) (\eta_u - \hat{\eta}_j(\varepsilon_1))^2 d\xi_1(x). \\ \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \int_X \lambda(x) (\eta_u - \hat{\eta}_j(\varepsilon))^2 d\xi(x) &< 0. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_X \lambda(x) (\hat{\eta}_i(\varepsilon) - \hat{\eta}_j(\varepsilon))^2 d\xi(x) \Big|_{\alpha=0} &= \int_X \lambda(x) (\hat{\eta}_i(\varepsilon_1) - \hat{\eta}_j(\varepsilon_1))^2 d\xi_2(x) - \\ &- \int_X \lambda(x) (\hat{\eta}_i(\varepsilon_1) - \hat{\eta}_j(\varepsilon_1))^2 d\xi_1(x). \end{aligned}$$

Теперь, используя введенные обозначения, нетрудно получить (4) и (5).

Теорема. Для того, чтобы план ε был локально-оптимальным, необходимо и достаточно

$$P^T \tilde{A}(\varepsilon) P \geq P^T \bar{A}(\varepsilon, x) P, \forall x \in X. \quad (6)$$

Доказательство.

1. Необходимость. Пусть ε^* — локально-оптимальный план и в точке \hat{X} не выполняется (6). Тогда рассмотрим план

$$\varepsilon = (1 - \alpha)\varepsilon^* + \alpha\varepsilon(\hat{x}),$$

$\varepsilon(\hat{x})$ — план, сосредоточенный в одной точке, и, выбрав достаточно малое α , мы, используя (4), получим

$$\Delta(\varepsilon) > \Delta(\varepsilon^*),$$

что противоречит определению ε^* .

2. Достаточность. Предположим (6) выполняется для ε , который не является локально-оптимальным, т. е. существует $\tilde{\varepsilon}$, для которого

$$\Delta(\tilde{\varepsilon}) > \Delta(\varepsilon).$$

Тогда, взяв линейную комбинацию

$$\varepsilon = (1 - \alpha)\tilde{\varepsilon} + \alpha\varepsilon.$$

и в силу вогнутости (условие (5)), получим

$$\left. \frac{\partial \Delta(\varepsilon)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} = P^T \int_X \bar{A}(\tilde{\varepsilon}, x) d\tilde{\xi}(x) P - P^T \tilde{A}(\tilde{\varepsilon}) P > 0,$$

т. е.

$$\max_{x \in X} P^T \bar{A}(\tilde{\varepsilon}, x) P > P^T \tilde{A}(\tilde{\varepsilon}) P,$$

что противоречит (6). Теорема доказана.

Используя доказанную теорему, можно предложить следующую итерационную процедуру построения стратегии локально-оптимального плана эксперимента.

А. Проводится затравочный эксперимент с планом ε^s , невырожденным для всех гипотез, делаются оценки $\hat{\eta}_i^s(\varepsilon)$, $i=1, \dots, m$.

Б. Задается вектор априорных вероятностей

$$P_s^T = \|p_{1,s}, \dots, p_{m,s}\|.$$

В. Находится точка x^s , удовлетворяющая

$$\max_{x \in X} P_s^T \bar{A}(\varepsilon^s, x) P_s.$$

Г. В этой точке проводится дополнительное измерение, пересчитывается вектор вероятностей, строятся новые оценки $\hat{\eta}_i^{s+1}(\varepsilon)$, $i=1, \dots, m$ затем возвращаемся к В.

Процедура (В, Г) проводится до тех пор, пока не выполнится (6).
 На каждом шаге итерационной процедуры мы имеем неравенство

$$\Delta(\varepsilon^{s+1}) > \Delta(\varepsilon^s),$$

(s — номер итерации), так как при малом α_s справедливы следующие соотношения:

$$\varepsilon^{s+1} = (1 - \alpha_s) \varepsilon^s + \alpha_s \varepsilon^s(x),$$

$$\frac{\Delta(\varepsilon^{s+1}) - \Delta(\varepsilon^s)}{\alpha_s} \simeq P_s^T \bar{A}(\varepsilon^s, x) P_s - P_s^T \tilde{A}(\varepsilon^s) P_s.$$

Условие (6) при равенстве одной из $p_{j,s}$ единице переходит в условие D — оптимальности для j -й гипотезы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. С. Федорова. «Заводская лаборатория», 1970, № 5.
2. В. В. Федоров. Локально-оптимальные последовательные планы дискриминирующих экспериментов, М., изд-во МГУ, 1970.