СБОРНИК **НАУЧНЫХ ТРУДОВ НГТУ. – 2017. – № 3 (89).** – 92–108

ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ

УДК 519.24

БАЙЕСОВСКИЕ ПЛАНЫ ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛОВ ДУБОВА: ПРИМЕРЫ И ЭФФЕКТ ВЕТВЛЕНИЯ*

Ю.Д. ГРИГОРЬЕВ[1], А.С. ГРУНЯШИН[2]

[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, максимино-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.

---

* Статья получена 03 мая 2017 г.

Для проверки байесовских планов на оптимальность используется теорема оптимальности Чалонера–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: 10.17212/2307-6879-2017-3-92-108

ВВЕДЕНИЕ

Планирование эксперимента для оценивания параметров нелинейных функций отклика $\eta(x,\theta)$ в модели наблюдений

$$y=\eta(x,\theta)+e\,,\quad \eta\in C^2(\Theta)\,,\quad \theta\in\Theta\subset R^p\,,\quad e\sim N(0,\sigma^2) \qquad (1)$$

требует в общем случае специальных подходов, отличных от локально оптимального планирования. Одним из таких подходов является байесовское планирование. Впервые этот подход был рассмотрен в работе [1]. В работе [2] для произвольного выпуклого функционала от информационной матрицы $M(\theta,\xi)$ с усреднением его по априорному распределению $\pi(\theta)$ найдены условия оптимальности байесовских планов ξ_B, являющиеся обобщением теоремы оптимальности Кифера–Вольфовица [3, 4]. В работах [5, 6] концепция байесовской *D*-оптимальности расширена до пяти функционалов, включающих функционал Григорьева. Наконец, работе [7] сформулирована и доказана теорема для первого из функционалов Дубова Φ_1, 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 $M(\xi)$, как это было в линейном случае. Именно это обстоятельство лежит в основе опирающегося на теорему Каратеодори доказательства существования оптимального плана ξ, имеющего не более чем $m(m+1)/2$ точек. Поскольку теорема Каратеодори не имеет места в байесовском случае, то нельзя говорить и о конечности верхней границы для числа опорных точек в байесовских планах ξ_B.

Последний факт строго доказан в работах [8, 9], а затем более подробно исследован в серии последующих работ (см., например: [10, 12–14]). 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 $\eta(x,\theta)$ и априорных распределений $\pi(\theta)$. 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 $\psi[M(\theta,\xi)]$. 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 θ), тем больше опорных точек появляется в байесовском плане ξ_B. Это поведение планов иллюстрируется на примерах в разделе 2.3.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Будем рассматривать такое планирование, при котором для $\theta \in \Theta \subset R^1$ в модели (1) задается априорное распределение $\pi(\theta)$, которое в общем случае может быть как дискретным, так и непрерывным. Эта априорная информация инкорпорируется в план эксперимента ξ с помощью функционалов Дубова $\Phi_1(\xi)\ldots\Phi_5(\xi)$, представляющих усреднения критерия планирования $\psi[M(\theta,\xi)]$ по данному априорному распределению $\pi(\theta)$. В качестве модели регрессии рассматривается экспоненциальная модель

$$\eta(x,\theta) = e^{-\theta x}, \quad \theta \in \Theta = [a,b], \quad a < b < \infty, \quad x \ge 0, \tag{2}$$

а в качестве априорного распределения – равномерное распределение

$$\pi(\theta) = \begin{cases} 0, & \theta \le a, \\ \dfrac{\theta - a}{b - a}, & \theta \in \Theta, \\ 1, & \theta \ge b. \end{cases} \tag{3}$$

Цель работы заключается в исследовании поведения планов ξ_B при максимизации байесовских функционалов Дубова $\Phi(\xi)$ при $b \to \infty$ и определении их первой точки ветвления, т. е. точки b_1, при которой одноточечный байесовский план ξ_B становится двухточечным.

2. УСЛОВИЯ ОПТИМАЛЬНОСТИ БАЙЕСОВСКИХ ПЛАНОВ

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

2.1. Функционалы Дубова

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

$$f^T(x,\theta) = \left(\frac{\partial}{\partial\theta_1}\eta(x,\theta), \ldots, \frac{\partial}{\partial\theta_p}\eta(x,\theta) \right).$$

Запишем информационную матрицу как

$$M(\xi,\theta) = \int\limits_X f(x,\theta) f^T(x,\theta)\xi(dx) = \int\limits_X M(x,\theta)\xi(dx) \in R^{m\times m}.$$

Обобщением локально оптимального подхода $\psi[M(\xi,\theta)] \to \min_{\xi\in\Xi}$, где ψ – некоторый, скажем, D-, A- и иной функционал, является рассмотрение критериев планирования вида

$$\Phi_\pi(\xi) = E_\theta \psi[M(\xi,\theta)] = \int_X \psi[M(\xi,\theta)]\pi(d\theta),$$

где $\pi(d\theta)$ – функция распределения $\theta \in \Theta \subseteq R^m$.

Все пять рассматриваемых ниже функционалов $\Phi_\pi(\xi)$ байесовского типа определяют задачу байесовского планирования как поиск плана ξ_B, для которого

$$\Phi_\pi(\xi_B) = \min_{\xi\in\Xi} \Phi_\pi(\xi). \tag{4}$$

1. Усредняем информационную матрицу $M(\theta,\xi)$, затем находим обратную к ней и определяем функционал

$$\Phi_1 = -\log\left|\int_\Theta M(\xi,\theta)\right|\pi(d\theta) = -\log\left|E_\theta M(\xi,\theta)\right|. \tag{5}$$

2. Находим обратную матрицу $D(\xi,\theta) = M^{-1}(\xi,\theta)$, затем производим усреднение и определяем функционал

$$\Phi_2(\xi) = \log\left|\int_\Theta M^{-1}(\xi,\theta)\right|\pi(d\theta) = \log\left|E_\theta M^{-1}(\xi,\theta)\right|. \tag{6}$$

3. Вычисляем $|D(\theta,\xi)|$, затем находим $\log|D(\xi,\theta)| = -\log|\mathrm{M}(\xi,\theta)|$ и после этого производим усреднение

$$\Phi_3(\xi) = -\int_\Theta \log|M(\xi,\theta)|\,\pi(d\theta) = -E_\theta \log|M(\xi,\theta)|. \tag{7}$$

4. Усредняем определитель $|M(\xi,\theta)|$ и полагаем

$$\Phi_4(\xi) = -\log\int_\Theta |M(\xi,\theta)|\,\pi(d\theta) = -\log E_\theta |M(\xi,\theta)|. \tag{8}$$

5. Усредняем определитель $\left|M^{-1}(\xi,\theta)\right|$ и полагаем

$$\Phi_5(\xi) = -\int_{\Theta} \log\left|M(\xi,\theta)\right| \pi(d\theta) = -E_\theta \log\left|M(\xi,\theta)\right| . \qquad (9)$$

Для первых трех критериев в работе [5] сформулирована, а для критерия $\Phi_2(\xi)$ и доказана теорема эквивалентности, являющаяся расширением теоремы эквивалентности Кифера–Вольфовица на байесовский случай.

Критерий $\Phi_3(\xi)$ в более общей постановке (как выпуклый функционал от ξ) – это критерий, который, как уже отмечалось, рассматривался в диссертации Григорьева Ю.Д. [2, с. 90, теорема 3.5], где доказана соответствующая теорема, обобщающая теорему Дубова для критерия D-оптимальности на более общий случай выпуклого функционала ψ. В работе [7, с. 55–57, теорема 5.4] приводится доказательство теоремы эквивалентности Дубова для критерия $\Phi_1(\xi)$, повторяющее ход рассуждений в работе [2].

Функционалы $\Phi_4(\xi)$, $\Phi_5(\xi)$ впервые вводятся Дубовым, но условия оптимальности для соответствующих им планов он не приводит. Они сформулированы в 19-й главе книги [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:

$$M = M(\xi,\theta), \quad EM = E_\theta M(\xi,\theta), \quad f(x) = f(x,\theta).$$

Теорема 2.1 [5, 17, глава 19]. Следующие утверждения эквивалентны.

1. План ξ^* минимизирует $\Phi_j(\xi)$, $j = 1..5$.

2. План ξ^* минимизирует функцию максимума

$$G(\xi) = \max_{x\in X} \varphi_j(x,\xi),$$

где

$$\varphi_1(x,\xi) = E\{f^T(x)[EM]^{-1} f(x)\},$$

$$\varphi_2(x,\xi) = E\{f^T(x)M^{-1}(EM^{-1})^{-1}M^{-1}f(x)\},$$

$$\varphi_3(x,\xi) = E\{f^T(x)M^{-1}f(x)\},$$

$$\varphi_4(x,\xi) = E\{|M|\, f^T(x)M^{-1}f(x)\}\big/E|M|,$$

$$\varphi_5(x,\xi) = E\{|M^{-1}|\, f^T(x)M^{-1}f(x)\}\big/E|M^{-1}|.$$

3. Имеет место равенство

$$G(\xi^*) = m. \tag{10}$$

Доказательство теоремы приводится в указанных источниках. При $m=1$ 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 ξ.

Таблица 1

Редукция критериев $\Phi_1(\xi)\ldots\Phi_5(\xi)$ для однопараметрических моделей

Критерий	Функционал	Степень матрицы	Вес $a(\theta)$ усредненной дисперсии
3	$-E_\theta \log M(\xi,\theta)$	0	1
2, 5	$E_\theta M^{-1}(\xi,\theta)$	–1	$M^{-1}(\xi,\theta)$
1, 4	$-E_\theta M(\xi,\theta)$	1	$M(\xi,\theta)$

2.3. Байесовские планы для функционалов Дубова

Рассмотрим примеры байесовских планов для функционала Дубова $\Phi_1(\xi)\ldots\Phi_5(\xi)$ в однопараметрическом случае. Для этого вернемся к экспоненциальной модели (2), уточнив для нее область планирования X:

$$\eta(x,\theta) = e^{-\theta x}, \quad x \in X = [0,1], \quad \theta \in \Theta = [a,b], \quad a > 0.$$

Пусть $\pi(d\theta)$ – равномерное распределение на $\Theta = [a,b]$, $a > 0$ и δ_x – одноточечный план, $x \in [0,1]$. Предполагаем, что рассматривается задача планирования на минимум, т. е. $\Phi(\xi) \to \min$.

Функционал $\Phi(\xi) = \Phi_3(\xi)$. Если $\xi = \xi_{x^*}$ – одноточечный план, то согласно табл. 1 и выражению (10) имеем

$$\Phi(\xi_x) = -E \log |M(\delta_x, \theta)| = -\frac{1}{b-a}\int_a^b \log[x^2 e^{-2\theta x}]\, d\theta =$$

$$= (a+b)x - 2\log x,$$

$$\varphi(x, \delta_{x^*}) = Ef^T(x,\theta)M^{-1}(\delta_{x^*},\theta) f(x,\theta) = \int_a^b d(x, \delta_{x^*}, \theta)\pi(d\theta),$$

$$d(x, \delta_{x^*}, \theta) = (x / x^*)^2 e^{-2\theta(x - x^*)},$$

где опорная точка x^* байесовского плана подлежит определению. Оптимизация $\Phi(\delta_x)$ по x приводит к выражениям:

$$x^* = \arg\min_{x\in[0,1]} \Phi(\delta_x) = 2/(a+b), \quad \Phi(\delta_{x^*}) = 2(1 - \log 2/(a+b)), \tag{11}$$

$$\varphi(x, \delta_{x^*}) = \frac{1}{b-a}\int_a^b d(x, \delta_{x^*}, \theta) d\theta =$$

$$= \frac{1}{2(b-a)}\left(\frac{x}{x^*}\right)^2 \frac{e^{-2a(x-x^*)} - e^{-2b(x-x^*)}}{x - x^*}. \tag{12}$$

Одноточечный план δ_{x^*} является байесовским в том и только том случае, если для него выполняется условие

$$\forall x \in [0,1] : \varphi(x, \delta_{x^*}) \le 1. \tag{13}$$

Однако оказывается, что в общем случае это не так.

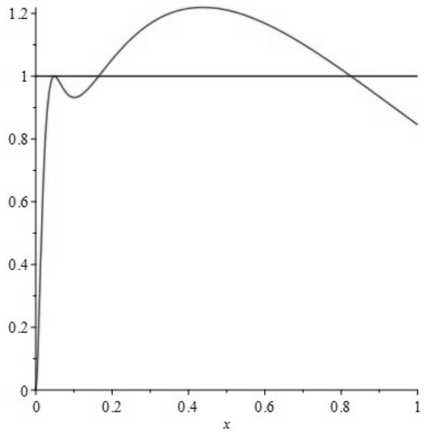
Пусть $a = 1$, $b = 40$. Тогда из (12) следует

$$x^* = \frac{2}{41} = 0.048,\ 780, \quad \max_{x\in[0,1]} \varphi(x, \delta_{x^*}) = \varphi(x_0, \delta_{x^*}) = 1.219, \quad x_0 = 0.437,$$

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

$$\xi_1 = \{x^* = 0.048,\ 780\}, \quad \Phi(\delta_{x^*}) = 8.0408$$

не является байесовским в классе всех планов Ξ.



Функция дисперсии $\varphi(x, \delta_{x^*})$ для одноточечного плана $\delta_{x^*} = 0.437$

Рассмотрим двухточечный план

$$\xi_2 = \{(x_i, \omega_i)\}_{i=1}^2 = \begin{pmatrix} x_1 = 0.047,\ 404 & x_2 = 0.346,\ 781 \\ \omega_1 = 0.979,\ 294 & \omega_2 = 0.020,\ 706 \end{pmatrix}, \quad \Phi(\xi_2) = 8.039,\ 241.$$

Поскольку $\Phi(\xi_2) < \Phi(\xi_1)$, то отсюда следует, что план ξ_2 лучше плана ξ_1, хотя это еще не означает его байесовость. Полагая

$$d(x, \xi_2, \theta) = \frac{x^2 e^{-2\theta x}}{B_1 e^{-2\theta x_1} + B_2 e^{-2\theta x_2}},$$

$$B_1 = \omega_1 x_1^2 = 0.002,\ 200\,, \quad B_2 = \omega_2 x_2^2 = 0.002,\ 490$$

и исследуя усредненную функцию дисперсии

$$\varphi(x,\xi_2) = \frac{1}{39}\int_1^{40} d(x,\xi_2,\theta)d\theta\,,$$

заключаем, что для всех $x \in [0,1]$ выполняется условие $d(x,\xi_2) \le 1$. Следовательно, избыточный план ξ_2 действительно является байесовским при $a = 1$ и $b = 40$. В этом заключается феномен избыточности, согласно которому при определенных условиях количество опорных точек в байесовских планах будет возрастать.

Ситуация с планами ξ_1 и ξ_2 показывает, что в силу непрерывности существует такое минимальное значение b_1 (при фиксированном $a = 1$), что при $b > b_1$ для плана ξ_1 в области $[0,1]$ нарушается условие байесовости $\varphi(x,\xi_1) \le 1$. Это означает, что точка b_1 является границей между одно- и двухточечными планами. В связи с этим значением b_1 естественно назвать точкой ветвления плана ξ_1.

Вычисления показывают, что $b_1 = 29.498,\ 672$. Поскольку $\Phi[\xi_1(b_1)] = \Phi[\xi_2(b_1)]$, то формально это равенство означает, что оптимальными одновременно являются планы $\xi_1(b_1)$ и $\xi_2(b_2)$, при этом фактического противоречия здесь нет. Объясняется это тем, что в двухточечном плане $\xi_2(b_1)$ имеется вторая опорная точка x_2, в которой выполнено необходимое и достаточное условие оптимальности $x_2 = \mathrm{argmax}_{x\in[0,1]}\,\varphi(x,\xi_2) = 1$, но при этом $\omega(x_2) = 0$. Поэтому планы $\xi_1(b_1)$ и $\xi_2(b_2)$ фактически совпадают. Однако при выполнений условия $b > b_1$ вес $\omega(x_2)$ точки x_2 становится ненулевым, и байесовский план $\xi_2(b)$ действительно становится двухточечным.

Функционал $\Phi(\xi) = \Phi_2(\xi) = \Phi_5(\xi)$. Аналогично функционалу Φ_3 получаем

$$\Phi(\delta_x) = \log\left|EM^{-1}(\delta_x,\theta)\right| =$$

$$= \log \int_a^b M^{-1}(\delta_x, \theta)\pi(d\theta) = \log\left(\frac{1}{2(b-a)} \frac{e^{-2ax} - e^{-2bx}}{x^3 e^{-2(a+b)x}} \right),$$

$$\varphi(x, \delta_{x^*}) = E\left[f^T M^{-1}(\delta_{x^*}, \theta)\left(EM^{-1}(\delta_{x^*}, \theta)\right)^{-1} M^{-1}(\delta_{x^*}, \theta) f \right] =$$

$$= \frac{x^2}{x^*(x-2x^*)} \frac{e^{-2(x-2x^*)} - e^{-2b(x-2x^*)}}{e^{2bx^*} - e^{2ax^*}},$$

где опорная точка x^* байесовского плана подлежит определению. Оптимизация $\Phi(\delta_*)$ по x приводит к точке x^*, являющейся корнем уравнения

$$2x(be^{-2ax} - ae^{-2bx}) - 3(e^{-2ax} - e^{-2bx}) = 0,$$

которое легкоразрешимо численно.

Численный анализ показывает, что точкой ветвления в данном случае является точка $b_1 = 108.082{,}984$, при этом пограничный двухточечный план имеет вид

$$\xi_2 = \{(x_i, \omega_i)\}_{i=1}^2 = \begin{pmatrix} x_1 = 0.013,\ 034 & x_2 = 0.470,\ 683 \\ \omega_1 = 1 & \omega_2 = 0 \end{pmatrix}, \quad \Phi(\xi_2) = 10.408,\ 043.$$

Функционал $\Phi(\xi) = \Phi_1(\xi) = \Phi_4(\xi)$. Относительно критерия $\Phi_1(\xi)$ Дубов высказал замечание [5, с. 110], что он может приводить к странным планам, и привел пример двухпараметрической модели $(m = 2)$, 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 Φ_1 получаем

$$\Phi(\delta_x) = \log[EM(\delta_x, \theta)]^{-1} =$$

$$= \log\left(\int_a^b M(\delta_x, \theta)\pi(d\theta) \right)^{-1} = \log\left(\frac{2(b-a)}{x(e^{-2ax} - e^{-2bx})} \right),$$

$$\varphi(x, \delta_{x^*}) = E\left[f^T (EM(\delta_{x^*}, \theta))^{-1} f \right] = E(f^T f) \Big/ EM(\delta_{x^*}, \theta) =$$

$$= \frac{x}{x^*} \frac{e^{-2ax} - e^{-2bx}}{e^{-2ax^*} - e^{-2bx^*}} .$$

Опорная точка x^* байесовского плана легко определяется, так как необходимое условие экстремума для функционала $\Phi(\delta_x)$ приводит к уравнению $g(x;\ a, b) = 0$ с левой частью

$$g(x;\ a, b) = 2x(b\,\mathrm{e}^{-2bx} - ae^{-2ax}) - (\mathrm{e}^{-2bx} - e^{-2ax}) .$$

Поскольку

$$\lim_{b \to \infty} g(x;\ a, b) = (1 - 2ax)e^{-2ax} ,$$

то отсюда приходим к асимптотическому решению $x^* \sim 1/2a$. В силу того что $x^* \in [0,1]$ для любых $b > a$, имеем также

$$\varphi(x, \delta_{x^*}) \sim (x / x^*) e^{-2ax} , \quad b \to \infty .$$

Отсюда видим, что $\varphi(x, \delta_{x^*}) \le 1$ для всех $x \in [0,1]$. Все вместе это говорит о том, что эффект ветвления для функционала Φ_1 не возникает. В табл. 2 представлены байесовские Φ_1 оптимальные планы для нескольких значений b.

Таблица 2

Байесовские Φ_1 – оптимальные планы для нескольких значений *b*

План $\delta_{x^*}, a = 1$	b					
	1.2	1.5	2	5	10	50
x^*	0.9141	0.8222	0.7228	0.5308	0.5005	0.5000
$\Phi(\delta_{x^*}) = -\log E[M(\delta_{x^*}, \theta)]$	2.1851	2.4190	2.7320	3.7888	4.5836	6.2781

Из табл. 2 видим, что с ростом b план δ_{x^*} быстро приближается к предельному $\delta_{1/2}$, но величина $\Phi_{\delta_{x^*}}$ при этом растет, т. е. качество планирования падает.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отыскание точек ветвления b_i байесовских *D*-планов ξ_B 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 $\theta \in [a,b]$ в зависимости от способа усреднения. Рассмотренные примеры показывают, что для экспоненциальной модели с одним параметром наименее информативен функционал Φ_3. Промежуточное положение занимает функционал Φ_2 и наиболее информативен функционал Φ_1, так как для него точка ветвления b_1 отнесена в бесконечность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Григорьев Ю.Д., Денисов В.И., Кораблев В.И.* Байесовские планы эксперимента при нелинейной параметризации // 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: дис. … канд. техн. наук. – Новосибирск, 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 // Регрессионные эксперименты: (планирование и анализ) / под общ. ред. В.В. Налимова. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1977. – С. 103–111.

6. *Дубов Э.Л,* Байесовские оптимальные планы в нелинейных задачах // Вопросы кибернетики. Линейная и нелинейная параметризация в задачах планирования эксперимента / под ред. В.В. Налимова, В.В. Федорова. – М., 1981. – С. 27–30.

7. *Федоров В.В.* Активные регрессионные эксперименты // Математические методы планирования эксперимента / под ред. В.В. Пененко. – Новосибирск: Наука, 1981. – С. 19–73.

8. *Chaloner K., Larntz K.* Optimal Bayesian experimental design applied to logistic regression experiments // Journal of Statistical Planning and Inference. – 1989. – Vol. 21 (2). – P. 191–208.

9. *Chaloner K., Larntz K.* Bayesian design for accelerated life testing // Journal of Statistical Planning and Inference. – 1992. – Vol. 33 (2). – P. 245–260.

10. *Chaloner K.* A note on optimal Bayesian design for nonlinear problems // Journal of Statistical Planning and Inference. – 1993. – Vol. 37 (2). – P. 229–236.

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

12. *Dette H., Neugebauer H.M.* Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models // Journal of Statistical Planning and Inference. – 1996. – Vol. 52 (1). – P. 17–31.

13. *Dette H., Neugebauer H.M.* Bayesian *D*-optimal designs for exponential regression models // Journal of Statistical Planning and Inference. – 1997. – Vol. 60 (2). – P. 331–349.

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

15. *Старосельский Ю.М.* Исследование байесовских *D*-оптимальных планов для дробно-рациональных моделей // Вестник СПбГУ. Серия 10. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. – 2008. – Вып. 3. – С. 98–105.

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

17. *Atkinson A.C., Donev A.N.* Optimal experimental designs. – Oxford: Clarendon Press, 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*

Y.D. Grigoriev[1], A.S. Grunyashin[2]

[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 func-

* *Received 03 May 2017.*

tional, 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: 10.17212/2307-6879-2017-3-92-108

REFERENCES

1. Grigor'ev Yu.D., Denisov V.I., Korablev V.I. Baiesovskie plany eksperimenta pri nelineinoi parametrizatsii [Bayesian experiment plans for nonlinear parameterization]. *Primenenie EVM v optimal'nom planirovanii i proektirovanii* [Computer application in optimal planning and design]. Novosibirsk, Novosibirsk Electrotechnical Institute Publ., 1974, pp. 3–9.

2. Grigor'ev Yu.D. *Nekotorye voprosy postroeniya planov eksperimenta pri nelineinoi parametrizatsii*. Diss. kand. tekhn. nauk [Some questions of constructing experimental plans for nonlinear parameterization. PhD eng. sci. diss.]. Novosibirsk, 1975. 157 p.

3. Fedorov V.V. *Teoriya optimal'nogo eksperimenta* [Theory of optimal experiments]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 312 p.

4. Grigor'ev Yu.D. *Metody optimal'nogo planirovaniya eksperimenta: lineinye modeli* [Methods of optimal experiment planning: linear models]. St. Petersburg, Lan' Publ., 2015. 320 p.

5. Dubov E.L. D-optimal'nye plany pri baiesovskom podkhode dlya nelineinoi parametrizatsii [D-optimal plans for the Bayesian approach for nonlinear parameterization]. *Regressionnye eksperimenty: (planirovanie i analiz)* [Regression experiments (planning and analysis)]. Ed. by V.V. Nalimov. Moscow, Moskovskii universitet Publ., 1977, pp. 103–111.

6. Dubov E.L, Baiesovskie optimal'nye plany v nelineinykh zadachakh [Bayesian optimal plans for nonlinear problems]. *Voprosy kibernetiki. Lineinaya i nelineinaya parametrizatsiya v zadachakh planirovaniya eksperimenta* [Problems of cybernetics. Linear and nonlinear parametrization in problems of experimental design]. Ed. by V.V. Nalimov, V.V. Fedorov. Moscow, 1981, pp. 27–30.

7. Fedorov V.V. Aktivnye regressionnye eksperimenty [Active regression experiments]. *Matematicheskie metody planirovaniya eksperimenta* [Mathematical methods of experiment planning]. Ed. by V.V. Penenko. Novosibirsk, Nauka Publ., 1981, pp. 19–73.

8. Chaloner K., Larntz K. Optimal Bayesian experimental design applied to logistic regression experiments. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1989, vol. 21 (2), pp. 191–208.

9. Chaloner K., Larntz K. Bayesian design for accelerated life testing. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1992, vol. 33 (2), pp. 245–260.

10. Chaloner K. A note on optimal Bayesian design for nonlinear problems. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1993, vol. 37 (2), pp. 229–236.

11. Dette H., Sperlich S. A note on Bayesian *D*-optimal designs for a generalization of the exponential growth model. *South African Statistical Journal*, 1994, vol. 28, pp. 103–117.

12. Dette H., Neugebauer H.M. Bayesian optimal one point designs for one parameter nonlinear models. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1996, vol. 52 (1), pp. 17–31.

13. Dette H., Neugebauer H.M. Bayesian *D*-optimal designs for exponential regression models. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1997, vol. 60 (2), pp. 331–349.

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

15. Staroselskiy Yu.M. Issledovanie baiesovskikh D-optimal'nykh planov dlya drobno-ratsional'nykh modelei [Study of Bayesian *D*-optimal designs for rational vodels]. *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta. Seriya 10. Prikladnaya matematika. Informatika. Protsessy upravleniya – Vestnik of Saint Petersburg university. Applied mathematics. Computer science. Control processes*, 2008, iss. 3, pp. 98–105.

16. Starosel'skii Yu.M. *Issledovanie optimal'nykh planov eksperimenta dlya nelineinykh po parametram regressionnykh modelei*. Dis. kand. phis.-mat. Nauk [Investigation of optimal experimental designs for regression models that are nonlinear in parameters. PhD phys. and math. sci. diss.]. St. Petersburg, 2008. 109 p.

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