

К ПРОБЛЕМЕ ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ПРИ ПОСТРОЕНИИ ЭМПИРИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ С ИНТЕРВАЛЬНОЙ ОШИБКОЙ

С.И. Жилин, А.В.Крючков, Н.М.Оскорбин
Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия
e-mail: sergei@asu.ru, alvik48@mail.ru, osk46@mail.ru

В докладе излагается общий подход к построению оптимального эксперимента, основанный на прямом решении задачи, формулируемой относительно эмпирической зависимости: прогноза, оценивания параметров, или выбора управляющего воздействия на моделируемый объект. Представлена общая схема, результаты ее применения в простых случаях, а также сравнение с данными, известными из литературы.

При статистическом планировании оптимального эксперимента общая схема состоит в выборе первичного критерия минимизации ошибки прогноза (в конкретной точке или интегральной по области определения зависимости) и в переходе к конкретному частному критерию, так или иначе связанному с общим (D -оптимальному, G -оптимальному и т.п.) [1]. Задача планирования эксперимента при построении зависимостей по эмпирическим данным с интервальной ошибкой в откликовой переменной рассматривалась в работах Г. Бельфорте [2], Л. Пронцато, Э. Вальтера [3], Н.П. Дывака [4]. При этом общая схема остается аналогичной статистической с поправкой на используемые критерии оптимальности экспериментов. Наиболее известными из таких критериев являются минимизация объема или максимального диаметра множества допустимых значений параметров зависимости, а также минимизация максимальной ширины интервального прогноза (соответственно, критерии I_D -, I_E - и I_G -оптимальности в обозначениях Дывака).

Описанный выше подход обладает недостаточной гибкостью для вовлечения дополнительной априорной информации, как о поведении искомой зависимости, так и о значениях оцениваемых параметров, а также не учитывает достижения теории принятия решений.

В работе предлагается общий подход к построению оптимального эксперимента. Он основан на принципе имитационного моделирования и позволяет решать задачи прогноза, оценивания параметров или выбора управляющего воздействия на моделируемый объект, используя лишь априорную информацию об эмпирической зависимости.

В начале определимся с постановкой задачи поиска оптимального плана эксперимента. Предполагается, что на некотором интервале $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^n$ соблюдается зависимость, которую можно выразить в форме, разделяющей детерминированную и случайную составляющие:

$$y = f(x, \beta) + \varepsilon, \quad (1)$$

где $x \in \mathbf{X}$ — входной вектор, $\beta \in \mathbb{R}^m$ — вектор параметров, f — скалярная функция, описывающая детерминированную составляющую, ε — величина, описывающая слу-

чайную составляющую исследуемого объекта (например, погрешность измерений), а y — выходная переменная.

Далее предполагается, что функция $f(x, \beta)$ известна нам с точностью до параметров, наблюдаемые значения входных переменных x_i известны точно, а соответствующие им значения выходной переменной y_i измеряются с ошибками измерений ε_i , для которых известны оценки $\underline{\varepsilon}_i \leq \varepsilon_i \leq \bar{\varepsilon}_i$. В дальнейшем для простоты будем предполагать, что значения $\underline{\varepsilon}_i$ и $\bar{\varepsilon}_i$ постоянны, то есть для любого x_i $\underline{\varepsilon}_i = \underline{\varepsilon}$ и $\bar{\varepsilon}_i = \bar{\varepsilon}$.

На основе введенных предположений требуется составить оптимальный план эксперимента (наименьшую последовательность точек x , в которых необходимо произвести замеры значений y), позволяющий решить следующие задачи:

- оценивания параметров β ,
- прогноза значения функции y в некоторой точке x_0 (в данном случае предполагается, что эксперименты мы можем ставить на некотором множестве \mathbf{X}^* , $x_0 \notin \mathbf{X}^*$).

Специфика излагаемого в докладе метода состоит в том, что для решения данных задач не требуется проводить экспериментов фактически с целью получения дополнительной информации, а достаточно лишь априорной информации об исследуемом объекте (ведь в реальных условиях мы зачастую ограничены в возможности проводить эксперименты физически). Вся необходимая информация может быть получена средствами имитационного моделирования.

Суть метода проще всего изложить на примере задачи прогноза (все условия и обозначения, введенные выше, остаются в силе). К постановке задачи в данном случае обязательно необходимо добавить некоторые изначальные ограничения на параметры β в модели (1): $\underline{\beta}_i \leq \beta_i \leq \bar{\beta}_i$ для всех β_i , входящих в функцию f . Заметим, что уже этой исходной информации достаточно для того, чтобы сформировать некоторые ограничения на значение функции y в точке прогноза: $\underline{y}_0 \leq y(x_0) \leq \bar{y}_0$. Для этого необходимо решить следующие задачи оптимизации:

$$\underline{y}_0 = \min_{\beta} y(x_0), \quad \bar{y}_0 = \max_{\beta} y(x_0). \quad (2)$$

Однако ширина Δ_0 интервала $[\underline{y}_0, \bar{y}_0]$, как правило, слишком велика для практического применения, и нашей задачей будет спланировать такую серию экспериментов, которая позволит за минимальное число итераций (замеров значений y в соответствующих точках) максимально возможно сузить данный интервал.

Для этого предлагается совершить следующую последовательность действий:

1. из множества \mathbf{X}^* выберем N равномерно расположенных в нем точек x_i . Чем больше точек мы выберем, тем выше будет точность требуемого результата. Однако следует учитывать и то, что скорость алгоритма снижается при росте N , что на практике нельзя игнорировать;
2. для каждой выбранной точки $x_i \in \mathbf{X}^*$ мы можем априори оценить интервал, в который гарантированно попадет значение $y(x_i)$: $\underline{y}_i \leq y(x_i) \leq \bar{y}_i$, решив задачи оптимизации:

$$\underline{y}_i = \min_{\beta} y(x_i), \quad \bar{y}_i = \max_{\beta} y(x_i); \quad (3)$$

3. из каждого такого интервала $[y_i, \overline{y}_i]$ выбираем M равномерно расположенных в нем точек $y_j(x_i)$ (так же, как и на первом шаге, увеличение M ведет к большей точности, но меньшей скорости выполнения алгоритма);
4. для каждой такой точки $y_j(x_i)$ предполагаем, что реальное значение $y(x_i)$ попало в интервал $[y_j(x_i) - \varepsilon, y_j(x_i) + \varepsilon]$. Затем вычисляем значение y в точке прогноза x_0 с учетом данного предположения. Для этого решаем задачи оптимизации (2), добавляя к ограничениям на параметры β еще одно двойное ограничение:

$$y_j(x_i) - \varepsilon \leq y(x_i) \leq y_j(x_i) + \varepsilon;$$

5. для каждого x_i выбираем *наихудший* случай, то есть находим такое j^* , для которого ширина Δ_0^{ij} полученного интервала $[y(x_0), \overline{y}(x_0)]$ максимальна:

$$\Delta_0^i = \Delta_0^{ij^*} = \max_j \Delta_0^{ij};$$

6. среди всех Δ_0^i выбираем *наилучший* случай, то есть находим такое i^* , для которого

$$\Delta_0 = \Delta_0^{i^*} = \max_j \Delta_0^i.$$

Затем происходит переход ко второму шагу, но в задачах оптимизации (2) и (3) добавляются ограничения $y_{j^*}(x_{i^*}) - \varepsilon \leq y(x_{i^*}) \leq y_{j^*}(x_{i^*}) + \varepsilon$. Алгоритм продолжается до тех пор, пока уменьшается Δ_0 . Последовательность получаемых точек $x_{i^*}^i$, где i — номер итерации, является оптимальным планом эксперимента.

Изложенный алгоритм был апробирован на задаче прогноза, в которой в качестве функции f использовалась зависимость вида

$$f(x, \beta) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n + \beta_{12} x_1 x_2 + \dots + \beta_{n-1, n} x_{n-1} x_n + \dots + \beta_{1, \dots, n} x_1 \dots x_n. \quad (4)$$

Результаты, полученные при решении данной задачи, полностью согласуются с результатами, известными из литературы (см., например, [5, 6]). В частности, при использовании в качестве функции f функции вида (4) и выбора следующих параметров:

$$\mathbf{X} = \mathbb{R}^n,$$

$$[\underline{\beta}_i, \overline{\beta}_i] = [0.5, 1.5] \quad \forall i = \overline{0, n},$$

$$\mathbf{X}^* = [-1, 1] \in \mathbb{R}^n,$$

$$x_{0i} = 10 \quad \forall i = \overline{1, n},$$

$$[\underline{\varepsilon}, \overline{\varepsilon}] = [-0.1, 0.1],$$

были получены следующие оптимальные планы (верхние индексы обозначают номер эксперимента):

- для $n = 1$: $x^1 = 1, x^2 = -1$,
- для $n = 2$: $x_1^1 = 1, x_2^1 = 1; x_1^2 = 1, x_2^2 = -1; x_1^3 = -1, x_2^3 = 1; x_1^4 = -1, x_2^4 = -1$.

Дальнейшее развитие алгоритма предполагает апробацию на моделях с функцией f вида (4) при $n > 2$ и на моделях с более сложными конструкциями детерминированных составляющих f .

Список литературы

- [1] ФЕДОРОВ В.В. Теория оптимального эксперимента (планирование регрессионных экспериментов). М.: Наука, 1971.
- [2] BELFORTE G., BONA B., FREDIANI S. Optimal Sampling Schedule for Parameter Estimation of Linear Models with Unknown But Bounded Measurement Errors // IEEE Trans. on Automatic Control. 1987. Vol. 32. N 2. P. 179-182.
- [3] PRONZATO L., WALTER E. Experiment Design for Bounded-Error Models // Mathematics and Computers in Simulation. 1990. Vol. 32. P. 571-584.
- [4] ДЫВАК Н.П. Теоретические основы построения моделей «вход-выход» статических систем методами анализа интервальных данных: Дис. ... док. тех. наук. Львов, 2003. (на укр. яз.)
- [5] АХНАЗАРОВА С.Л., КАФАРОВ В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: Учеб. пособие. М.: Высш. шк., 1985.
- [6] АФАНАСЬЕВА Н.Ю. Вычислительные и экспериментальные методы научного эксперимента: Учеб. пособие. М.: КНОРУС, 2010.