

معیارهای بهینگی برای تشخیص مدل درست از میان مدل‌های رقیب

هوشنگ طالبی^۱، فریا زاده‌لباف^۲

چکیده:

در بسیاری از مواقع، آزمایشگر با حالتی مواجه می‌شود که چند مدل رقیب وجود دارد که تنها یکی از آن‌ها درست است اما او قادر به تعیین مدل صحیح نیست. هدف از این مقاله معرفی معیارهای بهینگی برای یافتن طرح مطلوبی است که قادر به بررسی و تشخیص مدل درست باشد. در این راستا به دو رویکرد بیزی و غیربیزی می‌پردازیم. اگرچه رویکرد بیزی محدودیت‌هایی دارد، اما از این نظر که وابستگی استنباط‌های انجام شده نسبت به مقدار اولیه پارامترها را به میزان قابل توجهی کاهش می‌دهد، نسبت به رویکرد غیربیزی مزیت خواهد داشت. در این مقاله علاوه بر معرفی معیارهای گوناگون، برای هریک الگوریتمی نیز ارائه می‌دهیم که در به‌دست آوردن طرح‌های بهینه به صورت عددی سودمند واقع می‌شوند.

واژه‌های کلیدی: تشخیص مدل، طرح بهینه، مدل‌های غیرخطی، KL -بهینگی.

۱ مقدمه

نتایج، تحلیل‌ها و اعتبار آن‌ها دارد. بنابراین پیش از اجرای هر آزمایشی، تعیین روش اجرای آن از اهمیت زیادی برخوردار است و با وجود روش‌های گوناگون، هر آزمایشگر مایل به انتخاب طرحی است که پاسخ‌گوی نیازهایش باشد. لذا با توجه به ضرورت اجرای یک آزمایش با حداکثر کارایی باید شیوه‌ای علمی در طراحی آزمایش به کار گرفته شود. طرح‌های بهینه محقق را قادر می‌سازند تا با انتخاب طرحی متناسب با خواسته‌هایش به اهداف خود دست یابد. بهینگی در طرح‌ها که عبارتست از انتخاب بهینه مکان نقاط آزمایشی و تعداد اجراها در هریک از این نقاط یکی از این شیوه‌های علمی است که در به‌دست آوردن طرح‌های کارا نقشی اساسی

در بسیاری از زمینه‌های تحقیقاتی معمولاً آزمایش‌هایی توسط پژوهشگران برای کشف حقایق نظیر تشخیص عوامل مؤثر بر فرآیند، محاسبه اثرات این عوامل و نیز برازش مدلی مناسب برای متغیر پاسخ (ویژگی مورد بررسی در فرآیند) به منظور پیش‌بینی و بهینه‌سازی فرآیند انجام می‌گیرد. در واقع آزمایش یکی از ابزارهای اساسی در به‌دست آوردن یافته‌های جدید و یا درک بهتر وقایع است. یک طرح آماری آزمایش، طرح‌ریزی یک فرآیند، تعیین مکان و تعداد نقاط آزمایشی و تعداد تکرار آن‌هاست که با استفاده از روش‌های آماری می‌توان آن‌ها را تحلیل کرد. واضح است که چگونگی انجام یک آزمایش و نحوه جمع‌آوری داده‌ها تأثیر بسزایی بر

^۱گروه آمار، دانشگاه اصفهان
^۲گروه آمار، دانشگاه اصفهان

مدل را تا حد امکان آشکار ساخته و تشخیص بین آن‌ها را ساده‌تر کند و به این ترتیب معیارهای انتخاب مدل را در برابر مشکلات گفته شده ایمن می‌سازند.

بنابراین طرح‌های بهینه به‌دست آمده از معیارهای بهینگی برای تمایز بین دو مدل، در ادبیات موضوع از اهمیت بسزایی برخوردار هستند. آتکینسون و فدرف^۶ [۸] طرح‌های T -بهینه^۷ را به این منظور معرفی کردند و سایر محققین این نتایج را برای حالت‌ها و شرایط مختلف توسعه دادند. یکی از تحقیقات اساسی در این زمینه، لویز-فیدالگو^۸ و همکاران [۶] است که با استفاده از فاصله کولبک-لیبلر معیار KL -بهینگی^۹ را برای تمایز دو مدل در شرایط خطی و غیرخطی ارائه کردند. از آن‌جا که طرح‌های T -بهینه و KL -بهینه به مدل درست فرض شده و مقادیر عددی پارامترهای آن وابسته‌اند ناگزیریم مقادیر معلوم اولیه‌ای را جایگزین پارامترهای مجهول سازیم. از این‌رو این‌گونه طرح‌ها را بهینه موضعی^{۱۰} می‌نامند. برای کاهش وابستگی طرح‌های موضعی به مدل و مقادیر اولیه پارامترها، به‌جای در نظر گرفتن یک مدل به‌عنوان مدل درست، احتمال‌های پیشینی برای درستی هریک از مدل‌ها قرار می‌دهند. هم‌چنین به‌جای قرار دادن یک مقدار خاص برای پارامترها، یک توزیع احتمالی پیشین برای آن‌ها در نظر می‌گیرند. پونسه دلن^{۱۱} و آتکینسون [۷] با استفاده

دارد. درحقیقت طرح‌های بهینه رده‌ای از طرح‌های آزمایشی هستند که با توجه به معیارهای آماری گوناگون بهترین‌اند. موضوع طرح‌های بهینه برای اولین بار در سال ۱۹۱۸ توسط اسمیت^۳ مطرح شد و پس از یک وقفه زمانی محققینی از جمله چرنوف^۴ [۳] و کیفر^۵ [۵و۴] به آن پرداختند.

در اغلب موارد آزمایشگر با چندین مدل ممکن روبروست که تنها یکی از آن‌ها مدل درست است. در این حالت ممکن است معیار بهینگی، توان طرح در تمایز بین مدل‌ها باشد.

باید توجه داشت که در مبحث تشخیص مدل معیارهای AIC و BIC با استفاده از مشاهدات به‌دست آمده به انتخاب مدل درست می‌پردازند. ممکن است با تغییرات اندکی در مشاهدات، این معیارها مدل دیگری را به‌عنوان مدل درست مشخص کنند. پس اگر داده‌ها در نقاط مناسبی جمع‌آوری نشده باشند، این چنین معیارهایی به نتایج گمراه‌کننده منجر شده و مدل را به‌درستی انتخاب نمی‌کنند. بنابراین لازم است مشاهدات به‌گونه‌ای باشند که معیارهای انتخاب مدل در برابر آن‌ها پایدار بوده و تصمیم این معیارها در تعیین مدل درست، با تغییر مشاهدات، از ثبات کافی برخوردار باشد. معیارهایی که در این مقاله معرفی می‌شوند، برای تعیین نقاطی است که پس از به‌دست آمدن مشاهدات در آن نقاط، تفاوت دو

Smith^۳
Chernoff^۴
Kiefer^۵
Atkinson and Fedorov^۶
 T - optimum designs^۷
Lopez - Fidalgo^۸
 KL - optimality criterion^۹
locally optimal^{۱۰}
PoncedeLeon^{۱۱}

را یک طرح دقیق n نقطه‌ای با حجم N گویند. n —نقطه‌ای با حجم N گویند.

به‌طور کلی میدان سیگمایی حاصل از زیرمجموعه‌های بول B در X را که شامل تمام زیرمجموعه‌های تک‌نقطه‌ای است، در نظر بگیرید. اندازه احتمال تعریف شده بر (X, B) یک طرح تقریبی^{۱۵} (پیوسته) نامیده می‌شود. مجموعه کلیه طرح‌های تقریبی را با H نمایش می‌دهیم.

بسیاری از مواقع در عمل، دستیابی به چنین طرح‌هایی مشکل بوده و معمولاً آن‌ها را به‌عنوان تقریبی برای طرح‌های گسسته در نظر می‌گیرند. فرض کنید طرحی که شامل تعداد محدودی نقطه است را با (1) نشان دهیم، به‌طوری‌که ضرایب w_i مقادیر مثبت دلخواه باشند، $\sum w_i = 1$. واضح است که اگر ξ_1 و ξ_2 دو اندازه طرح باشند، آن‌گاه برای $0 \leq \lambda \leq 1$ ، $\lambda \xi_1 + (1 - \lambda) \xi_2$ نیز یک اندازه طرح خواهد بود. به‌طور کلی $\xi(dx)$ را متناظر با طرح دلخواه در نظر می‌گیریم.

۱.۲ T —بهینگی

مدل رگرسیونی زیر را در نظر بگیرید که در آن مشاهدات y_{ik} به‌صورت زیر

$$y_{ik} = \eta_t(x_i) + \varepsilon_{ik} \quad (i = 1, \dots, n; k = 1, \dots, r_i) \quad (2)$$

داده می‌شوند، به‌طوری‌که نقاط طرح x_i مقادیر معلوم و متغیرهای تصادفی ε_{ik} مستقل و دارای توزیع نرمال

از رویکردی بیزی معیار بهینگی T را کلیت بخشیدند. پس از آن توماسی^{۱۲} و لویز [۹] به پیروی از آن‌ها معیار بهینگی KL را به حالت بیزی گسترش دادند.

مقاله حاضر به شکل زیر تنظیم شده است. در بخش ۲ به مرور برخی مفاهیم مورد نیاز در بخش‌های بعد خواهیم پرداخت. در بخش ۳ معیار T —بهینگی را معرفی و الگوریتم مربوط به آن را به‌طور مختصر شرح می‌دهیم. پس از آن، در بخش ۴ به معیار کلی‌تر KL و الگوریتم آن می‌پردازیم. دو بخش پایانی ۵ و ۶ نیز به‌ترتیب به رویکرد بیزی دو معیار T و KL و الگوریتم‌های آن‌ها اختصاص یافته است.

۲ تعاریف

زیرمجموعه $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ از اعضای مجموعه فشرده X ، که بعضی از آن‌ها ممکن است بر هم منطبق باشند، را یک طرح آزمایشی دقیق^{۱۳} (یا گسسته) با حجم N می‌نامند. با توجه به احتمال یکسان بودن بعضی از اعضا، اگر $n (\leq N)$ نقطه مجزا، هریک با r_i تکرار وجود داشته باشد، آن را با $x_1, x_2, \dots, x_n$ نمایش می‌دهیم. برای هر x_i ضرایب وزنی را به‌صورت $w_i = r_i/N$ در نظر بگیرید، $(i = 1, \dots, n)$. یک اندازه احتمال گسسته که به‌صورت زیر نمایش داده می‌شود

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 \dots x_n \\ w_1 \dots w_n \end{pmatrix}, \quad (1)$$

Tommasi^{۱۲}
exactdesign^{۱۳}
normedexactdesign^{۱۴}
approximatedesign^{۱۵}

$$\inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \sum_{i=1}^n w_i \{\eta_t(x_i) - \eta_2(x_i, \theta_2)\}^2$$

و ξ_N به صورت زیر طرح مورد نظر است

$$\xi_N = \begin{pmatrix} x_1 \dots x_n \\ w_1 \dots w_n \end{pmatrix}$$

طرح ξ_N^* به طوری که

$$\Delta_2(\xi_N^*) = \sup_{\xi_N} \Delta_2(\xi_N)$$

T -بهینه است. دقت کنید که به علت وابستگی ξ_N^* به

مقدار θ_1 ، این طرح یک طرح بهینه موضعی است. در

حالت کلی طرح T -بهینه به تعیین مدل درست و مقادیر

پارامترهای رگرسیونی وابسته خواهد بود.

بنابراین در حالت کلی مایل به حل مسئله بهینه‌سازی زیر

هستیم

$$\Delta_2(\xi_T^*) = \sup_{\xi \in H} \Delta_2(\xi), \quad (4)$$

که در آن ξ اندازه طرحی است که بر ناحیه طرح X

تعریف می‌شود. فرض می‌کنیم X فشرده و برای $x \in X$

$\eta_j(x, \theta)$ پیوسته باشد.

مجموعه $\Omega_2^*(\xi)$ را به صورت زیر در نظر بگیرید

$$\int_X \{\eta_t(x) - \eta_2(x, \theta_2^*)\}^2 \xi(dx) = \inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \int_X \{\eta_t(x) - \eta_2(x, \theta_2)\}^2 \xi(dx) \quad (5)$$

طرح بهینه ξ_T^* که در (۴) صدق می‌کند را طرح باقاعده

گویند^{۱۶} هرگاه برای $\xi_T^* = \xi$ ، مجموعه جواب (۵) دارای

جواب یکتای θ_2^* است.

با میانگین صفر و واریانس ثابت σ^2 هستند. در

مباحث نظری (اما نه در مثال‌های عددی) بدون از دست

دادن کلیت σ^2 را برابر ۱ قرار می‌دهیم. تابع η_t یکی

از دو تابع معلوم $\eta_1(x, \theta_1)$ و $\eta_2(x, \theta_2)$ است و θ_1 و θ_2

مجموعه‌هایی از پارامترهای مجهول در ابعاد p_1 و p_2

هستند. هدف از آزمایش تعیین یکی از این دو مدل

به عنوان مدل درست است.

می‌دانیم برآورد کمترین مربعات پارامترها در دو مدل که

در حالت کلی ممکن است غیرخطی باشند، پاسخ‌های

معادلات زیر است

$$\sum_{i=1}^n w_i \{y_i - \eta_j(x_i, (\hat{\theta})_j)\}^2 = \inf_{\theta_j \in \Omega_j} \sum_{i=1}^n w_i \{y_i - \eta_j(x_i, \theta_j)\}^2,$$

به طوری که

$$N = \sum_{i=1}^n r_i y_i = \frac{1}{r_i} \sum_{k=1}^{r_i} y_{ik} w_i = r_i / N$$

و $\Omega_j \in R^{p_j}$ ($j = 1, 2$) مجموعه‌هایی فشرده‌اند.

در حالت خاص، فرض کنید مدل اول درست باشد، به

این معنی که $\eta_t(x) = \eta_1(x, \theta_1)$ بنابراین بهتر است

آزمایش به گونه‌ای طراحی شود که بزرگترین مقدار ممکن

برای مجموع مربعات نقص برازش مدل دوم را نتیجه

دهد و به طور معادل مقدار زیر را ماکزیمم کند

$$\Delta_2(\xi_N) = \sum_{i=1}^n w_i \{\eta_t(x_i) - \eta_2(x_i, (\hat{\theta})_{t2})\}^2 \quad (3)$$

که در آن

$$\sum_{i=1}^n w_i \{\eta_t(x_i) - \eta_2(x_i, (\hat{\theta})_{t2})\}^2 =$$

regular design^{۱۶}

طرح به دست آمده در گام s -ام را به گام بعد منتقل می کند)

$$\xi_{s+1} = (1 - \alpha_s)\xi_s + \alpha_s \xi(x_{s+1}),$$

که در آن $\xi(x_{s+1})$ طرحی است که اندازه احتمال را در تک نقطه x_{s+1} متمرکز می کند. بعضی از انتخاب های ممکن برای دنباله α_s به قرار زیر است:

(الف) هر دنباله ای که در شرایط زیر صدق کند

$$\alpha_s \rightarrow 0, \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s = \infty, \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s^2 < \infty.$$

(ب) α_s که $\Delta_T\{(1 - \alpha)\xi_s + \alpha\xi(x_{s+1})\}$ را ماکزیمم کند.

۳ KL-بهینگی

فرض کنید $f_1(y, x, \theta_1, \tau)$ و $f_2(y, x, \theta_2, \tau)$ دو تابع چگالی رقیب باشند که در آن ها $i = 1, 2$ و y, θ_i و x مشابه بالا تعریف می شوند و τ پارامتر مزاحم^{۱۷} است که معمولاً به واریانس مدل ها مربوط می شود. همچنین $f(y, x, \tau) = f_1(y, x, \theta_1, \tau)$ را مدل درست در نظر می گیریم. با توجه به این نمادها، فاصله KL بین مدل درست $f(y, x, \tau)$ و مدل رقیب $f_2(y, x, \theta_2, \tau)$ به صورت زیر خواهد بود

$$I(f, f_2, x, \theta_2, \tau) = \int f(y, x, \tau) \log \left\{ \frac{f(y, x, \tau)}{f_2(y, x, \theta_2, \tau)} \right\} dy, \quad x \in X,$$

قضیه ۱ فرض کنید ξ_T^* یک طرح باقاعده باشد.

(i) یک شرط لازم و کافی برای آن که طرح ξ_T^* ، T -بهینه باشد این است که در نابرابری زیر

$$\psi_T(x, \xi_T^*) \leq \Delta_T(\xi_T^*)$$

صدق کند، به طوری که

$$\psi_T(x, \xi_T^*) = \{\eta_T(x) - \eta_T(x, \theta_T^*)\}^2.$$

(ii) در نقاط طرح بهینه، $\psi_T(x, \xi_T^*)$ به کران بالای خود می رسد.

(iii) برای هر طرح غیر بهینه ξ ، یعنی طرحی که برای آن شرط $\Delta_T(\xi) < \Delta_T(\xi_T^*)$ برقرار است، داریم

$$\sup_{x \in X} \psi_T(x, \xi) > \Delta_T(\xi_T^*).$$

اثبات: به آتکینسون و فدرف [۱] رجوع شود.

۲.۲ الگوریتم

استفاده از روش های نظری برای ساختن طرح های T -بهینه تنها در شرایط خاصی امکان پذیر است. در غیر این صورت می توان فرآند تکرار زیر را به کار بست.

۱- فرض کنید ξ_s طرح در گام s -ام بوده و x_{s+1} به گونه ای باشد که در شرط زیر

$$\psi_T(x_{s+1}, \xi_s) = \sup_{x \in X} \psi_T(x, \xi_s)$$

صدق کند.

۲- با انتخاب $\alpha_s, 0 \leq \alpha_s \leq 1$ طرح بعدی را به صورت زیر تشکیل دهید (درواقع α_s عددی است که

^{۱۷}nuisanceparameter

که در آن انتگرال روی فضای نمونه‌ای مشاهدات محاسبه می‌گردد.

برای سادگی فرض می‌کنیم پارامتر مزاحم τ معلوم باشد و در نتیجه تابع واریانس، بجز مقادیر پارامترهای $\theta_i, i = 1, 2$ ، کاملاً معلوم خواهد بود. بنابراین با حذف τ از عبارت فوق، تاب معیار KL - بهینگی به صورت زیر تعریف می‌شود

$$I_{\Upsilon \setminus}(\xi) = \min_{\theta_{\Upsilon} \in \Omega_{\Upsilon}} \left\{ \int_X I(f, f_{\Upsilon}, x, \theta_{\Upsilon}) \xi(dx) \right\}.$$

پس برای یک طرح تقریبی، $\int_X I(f, f_\gamma, x, \theta_\gamma) \xi(dx)$ ، با فاصله KL بین مدل‌های f و f_γ برای N مشاهده مستقل، تقریباً متناسب خواهد بود. طرحی که $I_{\gamma_1}(\xi)$ را ماکزیمم می‌کند طرح KL —بهینه نامیده می‌شود.

می‌توان ثابت کرد که $I(f, f_\gamma, x, \theta_\gamma)$ با پارامتر غیرمرکزی توزیع χ برای آزمون

$$H_{\circ} : f(y, x) = f_{\Upsilon}(y, x, \theta_{\Upsilon}),$$

$$H_{\setminus} : f(y, x) = f_{\setminus}(y, x, \theta_{\setminus}).$$

متناسب است. بنابراین با توجه به صعودی بودن تابع توان نسبت به پارامتر غیرمرکزی، مقادیر بزرگتر $I(f, f_2, x, \theta_2)$ تابع توان بزرگتری را برای آزمون نتیجه می‌دهند. می‌توان ثابت کرد

$$I_{Y\setminus}(\xi) \propto \min_{\theta_Y \in \Omega_Y} \{E_{H_Y}(R)\},$$

که در آن R آماره آزمون فوق است. بنابراین طرح KL —بهینه، تابع توان را در بدترین حالت ماکزیمم می‌کند.

مطابق قبل، طرحی که برای آن مسئله بهینه‌سازی

$$\Omega_Y(\xi) = \{\theta_Y^* : \theta_Y^*(\xi) =$$
 (6)

$$\arg \min_{\theta_Y \in \Omega_Y} \{ \int_Y I(f, f_Y, x, \theta_Y) \xi(dx) \}$$

اطلبی پاسخ یکتا باشد، طرح باقاعده نام دارد. در غیر این صورت طرح را منفرد گویند.

پس از تعاریف فوق، به ذکر قضیه زیر می‌پردازیم. ب. رای
مشاهده جزئیات اثبات به لوپز و همکاران [۶] مراجعه
شود.

قضیه ۲ فرض کنید ξ_{KL}^* یک طرح KL -بهینه باقاعده باشد.

(۶) یک شرط لازم و کافی برای آن که طرح $-KL; \xi_{KL}^*$ بهینه باشد، این است که $\psi(x, \xi_{KL}^*) \leq 0, x \in X$ در آن

$$\psi(x, \xi) = I(f, f_{\Upsilon}, x, \theta_{\Upsilon}^*) - \int_{\mathbf{X}} I(f, f_{\Upsilon}, x, \theta_{\Upsilon}^*) \xi(dx)$$

و $\hat{\theta}_2$ پاسخ یکتای مسئله بهینه‌سازی (۶) است.

(ii) تابع $\psi(x, \xi_{KL}^*)$ مقدار ماکزیمم خود را در نقاط تکیه‌گاه طرح بهینه اختیار می‌کند.

۱.۳ الگوریتم

۱- برای یک طرح مفروض ξ_s قرار دهید

$$\theta_{\Upsilon,s} = \arg \min_{\theta_{\Upsilon} \in \Omega_{\Upsilon}} \left\{ \int I(f, f_{\Upsilon}, x, \theta_{\Upsilon}) \xi_s(dx) \right\},$$

$$x_s = \arg \max_{x \in X} \{I(f, f_Y, x, \theta_{Y,s})\}.$$

۲- سپس برای یک α_s به طوری که $0 \leq \alpha_s \leq 1$ قرار دهید

$$\xi_{s+1} = (1 - \alpha_s)\xi_s + \alpha_s \xi_{x,s},$$

که در آن ξ_{x_s} طرحی است که اندازه را در تک نقطه x_s متمرکز کرده است.

شرایط معمول برای دنباله $\{\alpha_s\}$ به قرار زیر است:

$$\alpha_s \rightarrow 0, \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s = \infty, \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s^2 < \infty.$$

۴ - بهینگی بیزی

همانند قبل، مدل را به صورت

$$E(y) = \eta_t(x), x \in X,$$

در نظر می گیریم که در آن مدل درست، $\eta_t(x)$ یکی از دو تابع معلوم $\eta_1(x, \theta_1)$ یا $\eta_2(x, \theta_2)$ با احتمال های پیشین به ترتیب π_1 و $\pi_2 = 1 - \pi_1$ است. فرض کنید مجموعه پارامترهای θ_j با بُعد m_j طی توزیع احتمالی پیشین $p_j(\theta_j)$ بوده و $\Omega_j \subset R^{m_j}$ فضای پارامتر مجموعه θ_j است ($j = 1, 2$).

کمیت های زیر

$$\Delta_1(\xi, \theta_2) = \inf_{\theta_1 \in \Omega_1} \int_X \{\eta_2(x, \theta_2) - \eta_1(x, \theta_1)\}^2(dx),$$

$$\Delta_2(\xi, \theta_1) = \inf_{\theta_2 \in \Omega_2} \int_X \{\eta_1(x, \theta_1) - \eta_2(x, \theta_2)\}^2(dx),$$

به ترتیب پارامتر غیرمرکزی مدل اول است، هنگامی که مدل دوم درست باشد و بالعکس.

تعمیم از (۴) به یافتن ξ_{BTj} می پردازد به طوری که

$$\Gamma(\xi_{BT}^*) = \sup_{\xi \in H} \Gamma(\xi),$$

که در آن

$$\Gamma(\xi) = \sum \pi_j \gamma_j(\xi) =$$

$$\pi_1 E_{\theta_1} \{\Delta_2(\xi, \theta_1)\} + \pi_2 E_{\theta_2} \{\Delta_1(\xi, \theta_2)\},$$

به طوری که $\gamma_2 = \gamma_1$ و $\gamma_1 = \gamma_2$.

مطابق قبل، $\Omega_j^*(\xi)$ مجموعه جواب معادله زیر

$$\int_X \{\eta_j(x, \theta_j) - \eta_j(x, \theta_j^*)\}^2 \xi(dx) = \quad (7)$$

$$\inf_{\theta_j \in \Omega_j} \int_X \{\eta_j(x, \theta_j) - \eta_j(x, \theta_j)\}^2 \xi(dx)$$

است.

با فرض $\xi = \xi_{BT}^*$ ، اگر r (۷) دلی پاسخ یکتای θ_1^* برای کلیه مقادیر $\theta_2 \in \Omega_2$ و $\theta_1^* \in \Omega_1$ برای کلیه مقادیر $\theta_1 \in \Omega_1$ باشد، قضیه زیر را بیان می کنیم.

قضیه ۳ (i) یک شرط لازم و کافی برای این که $\xi = \xi_{BT}^*$ - بهینه بیزی باشد، این است که برای کلیه $x \in X$ ، $\psi(x, \xi_{BT}^*) \leq \Gamma(\xi_{BT}^*)$ باشد، که در آن

$$\psi(x, \xi_{BT}^*) = \sum \pi_j E_{\theta_j} \{\eta_j(x, \theta_j) - \eta_j(x, \theta_j^*)\}^2.$$

(ii) در نقاط طرح - بهینه بیزی، $\psi(x, \xi_{BT}^*)$ کران بالای خود را اختیار می کند.

(iii) برای هر طرح غیر بهینه ξ ، یعنی طرحی که برای آن داشته باشیم $\Gamma(\xi) < \Gamma(\xi_{BT}^*)$ ، می توان نوشت

$$\sup_{x \in X} \psi(x, \xi) > \Gamma(\xi_{BT}^*).$$

اثبات: به پونسه دین و آتکینسون [۷] رجوع شود.

۱.۴ الگوریتم

۱- فرض کنید ξ_s ، طرح در گام s -ام بوده و x_{s+1} به گونه ای باشد که در شرط

$$\psi(x_{s+1}, \xi_s) = \sup_{x \in X} \psi(x, \xi_s)$$

۵ KL -بهینگی بیزی

صدق کند.

۲- طرح بعدی را به صورت زیر انتخاب کنید

$$\xi_{s+1} = (1 - \alpha_s)\xi_s + \alpha_s \xi(x_{s+1}).$$

همانند قبل، شرایط معمول برای دنباله $\{\alpha_s\}$ به قرار زیر

است:

$$\alpha_s \rightarrow 0, \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s = \infty, \sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s^2 < \infty.$$

مثال ۱ این مسئله شامل طراحی آزمایش در بازه

$X = [-1, 1]$ برای تشخیص بین دو مدل رگرسیونی زیر

است

$$\eta_1(x) = \theta_{10} + \theta_{11}e^x + \theta_{12}e^{-x},$$

$$\eta_2(x) = \theta_{20} + \theta_{21}x + \theta_{22}x^2.$$

در این جا مدل درست را نامعلوم فرض می کنیم، اما احتمال های پیشین برای درست بودن هر مدل در دسترس است. علاوه بر این احتمال ها، توزیع های احتمالی پیشینی که برای هر دو مدل گسسته فرض شده اند نیز برای پارامترهای هر یک از دو مدل موجود است. این احتمال ها و توزیع های پیشین در جدول ۱ نشان داده شده اند.

طرح T -بهینه بیزی که با استفاده از روش های متداول بهینه سازی به دست می آوریم، دارای پنج نقطه است و مقدار ماکزیمم تابع معیار $\Gamma(\xi)$ برای این طرح با مقدار زیر برابر است

$$\xi_{BT}^* = \begin{pmatrix} -1 & -0.781 & 0.105 & 0.847 & 1 \\ 0.244 & 0.426 & 0.254 & 0.067 & 0.009 \end{pmatrix},$$

$$\Gamma(\xi_{BT}^*) = 6.346 * 10^{-4}.$$

برای اطمینان از این که این طرح بهینه است، نمودار تابع $\psi(x, \xi_{BT}^*)$ در شکل ۱ نشان داده شده است. درواقع مقدار ماکزیمم که در هر پنج نقطه طرحی حاصل شده است، تقریباً با $\Gamma(\xi_{BT}^*)$ برابر است.

^{۱۸} *partially Bayesian KL - optimality criterion*

اگر i به مفهوم غیر از $i = 1, 2$ باشد، کمیت زیر

$$F_{7,i}(\xi, \theta_i) = \quad (۸)$$

$$\min_{\theta_i \in \Omega_T} \int_X l[f_i(y, x, \theta_i), f_7(y, x, \theta_7)] \xi(dx)$$

هنگامی که $f_i(y, x, \theta_i)$ را مدل درست فرض کرده باشیم

تابع معیار KL برای مدل $f_7(y, x, \theta_7)$ است.

با میانگین گیری روی دو مدل و بر توزیع های پیشین

پارامترها، معیار KL -بهینگی بیزی به صورت زیر به دست

می آید

$$I^B(\xi) = \pi_1 E_{\theta_1} [I_{21}(\xi, \theta_1)] + \pi_2 E_{\theta_2} [I_{12}(\xi, \theta_2)],$$

که در آن E_{θ_i} بیانگر امید ریاضی برحسب $p_i(\theta_i)$ یعنی

توزیع احتمالی پیشین پارامتر θ_i و π_i احتمال پیشین

مدل آماری $f_i(y, x, \theta_i)$ ، $i = 1, 2$ است. طرح ξ_{BKL}^*

به طوری که برای آن داشته باشیم

$$\xi_{BKL}^* = \arg \max_{\xi \in H} I^B(\xi),$$

طرح KL -بهینه بیزی نام دارد.

اگر فرض بر این باشد که مدل $f_i(y, x, \theta_i)$ درست است،

اما تنها اطلاعات موجود درباره پارامتر θ_i توزیع پیشین

$p_i(\theta_i)$ باشد، معیار KL -بهینگی جزئاً بیزی^{۱۸} به صورت

زیر تعریف می شود

$$I_i^{PB}(\xi) = E_{\theta_i} [I_{7,i}(\xi, \theta_i)], i = 1, 2. \quad (۹)$$

$$- \int_X l[f_i(y, x, \theta_i), f_{\bar{i}}(y, x, \theta_{\bar{i}}^*)] \xi(dx)$$

مشتق سوئی $I_{\bar{i}}(\xi, \theta_i)$ در ξ و در جهت $\xi - \xi_x = \delta_{\xi_x}$ بوده و ξ_x طرحی است که تمام جرم را در نقطه x متمرکز کرده است و θ_i^* عضو یکنای $\Omega_i^*(\xi, \theta_i)$ است. پس از محاسبات ساده، مشتق سوئی $I^B(\xi, \theta_i)$ در ξ و در جهت $\xi - \bar{\xi} = \delta_{\bar{\xi}}$ به صورت زیر به دست می آید

$$\partial I^B(\xi, \bar{\xi}) = \int_X \psi^B(x, \xi) \bar{\xi}(dx), \quad (11)$$

که در آن

$$\psi^B(x, \xi) = \sum_{i=1}^2 \pi_i E_{\theta_i}[\psi_{ii}(x, \xi, \theta_i)]$$

مشتق سوئی $I^B(\xi)$ در ξ و در جهت δ_{ξ_x} است. در زیر قضیه هم‌ارزی را برای این‌گونه طرح‌ها بیان می‌کنیم. برای مشاهده اثبات، توماسی و لویز [۹] مشاهده شود.

قضیه ۴ فرض کنید ξ_{BKL}^* یک طرح باقاعده باشد. طرح (i) ξ_{BKL}^* ، KL —بهینه ییزی است اگر و تنها اگر

$$\psi^B(x, \xi_{BKL}^*) \leq 0, \quad x \in X.$$

(ii) تابع $\psi^B(x, \xi_{BKL}^*)$ مقدار ماکزیمم خود را در نقاط تکیه‌گاه طرح بهینه اختیار می‌کند.

۱.۵ الگوریتم

ساختار تحلیلی طرح‌های KL —بهینه موضعی و ییزی پیچیده است. بنابراین در عمل ناگزیر به استفاده از

طرحی که $I_i^{PB}(\xi)$ را ماکزیمم می‌کند، طرح KL —بهینه جزئاً ییزی نامیده شده و با $\xi_{PB_i}^*$ نمایش می‌دهند.

توابع معیار $I_{\bar{i}}(\xi, \theta_1)$ و $I_{\bar{i}}(\xi, \theta_2)$ بر پایه فاصله‌های کولبک—لیبلر و متناظر با درستی به ترتیب مدل‌های $f_1(y, x, \theta_1)$ و $f_2(y, x, \theta_2)$ به دست می‌آیند. این دو تابع معیار ممکن است از لحاظ اندازه به قدری متفاوت باشند که طرح KL —بهینه ییزی نزدیک و یا مطابق با طرح KL —بهینه متناظر با بزرگ‌ترین مقدار تابع معیار KL باشد. برای غلبه بر این مشکل تابع معیار ییزی استاندارد شده زیر مورد استفاده قرار می‌گیرد

$$\begin{aligned} I^{SB}(\xi) &= \sum_{i=1}^2 \pi_i E_{\theta_i} \left[\frac{I_{\bar{i}}(\xi, \theta_i)}{I_{\bar{i}}(\xi_{ii}^*, \theta_i)} \right] \\ &= \sum_{i=1}^2 \pi_i E_{\theta_i} [Ef f_{\bar{i}}(\xi, \theta_i)], \quad i = 1, 2, \end{aligned}$$

که در آن نسبت

$$Ef f_{\bar{i}}(\xi, \theta_i) = I_{\bar{i}}(\xi, \theta_i) / I_{\bar{i}}(\xi_{ii}^*, \theta_i)$$

اندازه‌ای برای کارایی طرح ξ نسبت به طرح KL —بهینه ξ_{ii}^* است. طرح KL —بهینه ییزی استاندارد شده 19 طرحی است که $I^{SB}(\xi)$ را ماکزیمم می‌کند. این طرح با نماد ξ_{SB}^* نمایش داده می‌شود.

طرح ξ به‌طوری که برای آن مجموعه‌های زیر

$$\Omega_i^*(\xi, \theta_i) = \quad (10)$$

$$\arg \min_{\theta_i \in \Omega_i} \int_X l[f_i(y, x, \theta_i), f_{\bar{i}}(y, x, \theta_{\bar{i}}^*)] \xi(dx),$$

برای هر $\theta_i \in \Omega_i$ ، $i = 1, 2$ منحصر به فرد باشند، یک طرح باقاعده و در غیر این صورت منفرد نامیده می‌شود.

اگر ξ یک طرح باقاعده باشد آن‌گاه تابع زیر

$$\psi_{ii}(x, \xi, \theta_i) = l[f_i(y, x, \theta_i), f_{\bar{i}}(y, x, \theta_{\bar{i}}^*)]$$

¹⁹standardized Bayesian KL - optimum design

مثال ۲ بسیاری از مواقع در تحلیل‌های قابلیت اعتماد ممکن است توزیع‌های وایبل یا گاما را به مجموعه یکسانی از داده‌ها برازش داده و به نتیجه مطلوب رسید. هر دو توزیع معمولاً برای داده‌های چوله استفاده می‌شوند. علاوه بر این در مباحث قابلیت اعتماد و کنترل کیفیت معمولاً اطلاعات پیشین نیز در دسترس بوده و مورد استفاده قرار می‌گیرند. اگر بتوان این اطلاعات را در قالب یک توزیع احتمالی پیشین درآورد می‌توان از رویکردی بیزی در تحلیل‌ها استفاده نمود. در این قسمت به بررسی طرح KL -بهینه بیزی برای مقایسه تابع چگالی احتمال وایبل،

$$f_W(y; b, c) = \frac{cy^{c-1}}{b^c} \exp[-(\frac{y}{b})^c], \quad b > 0, c > 0$$

و تابع چگالی احتمال گاما،

$$f_G(y; \beta, \alpha) = \frac{y^{\alpha-1} \exp(-\frac{y}{\beta})}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)}, \quad \beta > 0, \alpha > 0$$

می‌پردازیم.

در این جامدل‌سازی $b = \exp(\lambda_1 x)$ و $\beta = \exp(\gamma_1 x)$ مورد توجه خواهد بود که در آن‌ها x یک متغیر توضیحی است که در ناحیه آزمایشی $X = [1, 2]$ تغییر می‌کند. واضح است که برای $\lambda_1, \gamma_1 \in R$ شروط $b > 0$ و $\beta > 0$ برقرار خواهند بود. با توجه به این پارامترسازی داریم

$$\begin{aligned} l[f_G(y, x, \gamma_1, \alpha), f_W(y, x, \lambda_1, c)] = & \quad (12) \\ -\log[\Gamma(\alpha)] - \log c + (\alpha - c) \frac{\Gamma'(\alpha)}{\Gamma(\alpha)} - \alpha \\ + \frac{\Gamma(\alpha+c)}{\Gamma(\alpha)} \exp[c(\gamma_1 - \lambda_1)x] - c(\gamma_1 - \lambda_1)x \end{aligned}$$

$$l[f_W(y, x, \lambda_1, c), f_G(y, x, \gamma_1, \alpha)] = \quad (13)$$

روش‌های عددی هستیم. در این جا یکی از معروف‌ترین الگوریتم‌های موجود را برای محاسبه طرح‌های KL -بهینه بیزی شرح می‌دهیم. شایان ذکر است که با تعمیمی ساده می‌توان از این روش برای یافتن طرح‌های KL -بهینه بیزی استاندارد شده نیز استفاده کرد.

۱- فرض کنید که ξ_s طرح به دست آمده در گام s -ام باشد. برای هر نقطه از تکیه‌گاه $(i = 1, 2)$, $\theta_{i,s}, p_i(\theta_i)$ را به صورت زیر بیابید

$$\theta_{i,s} = \arg \min_{\theta_i \in \Omega_i} \int_X l[f_i(y, x, \theta_i), f_i(y, x, \theta_i)] \xi_s(dx)$$

و سپس مقدار زیر را محاسبه کنید

$$x_s = \arg \max_{x \in X} \psi^B(x, \xi_s)$$

۲- $0 \leq \alpha_s \leq 1$ را به گونه‌ای انتخاب کنید که $\sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s^2 < \infty$, $\sum_{s=0}^{\infty} \alpha_s = \infty$, $\alpha_s \rightarrow 0$ پس از آن ξ_{s+1} را تشکیل دهید، به طوری که

$$\xi_{s+1} = (1 - \alpha_s) \xi_s + \alpha_s \xi_{x_s}$$

که در آن ξ_{x_s} طرحی است که کل جرم را در نقطه آزمایشی x_s متمرکز کرده است.

به سادگی می‌توان ثابت کرد که یک کران پایین برای کارایی طرح KL -بهینه بیزی، که با $E f_{BKL}(\xi)$ نمایش داده می‌شود، به صورت زیر به دست می‌آید

$$I(\xi) = [1 + \frac{\max_{x \in X} \psi^B(x, \xi)}{I^B(\xi)}]^{-1} \leq E f_{BKL}(\xi) \leq 1.$$

بنابراین فرایند تکرار در گام s -ام متوقف می‌گردد، اگر برای مقدار مناسب δ مثل $\delta = 0.99$ ، داشته باشیم $I(\xi) > \delta$.

$$\begin{aligned} \min_{\gamma_1, \alpha} \int_X l[f_W(y, x, \lambda_1, c), f_G(y, x, \gamma_1, \alpha)] \xi(dx) = & \log[\Gamma(\alpha)] + \log c - ۱.۵۷۷۲ + ۰.۵۷۷۲ \frac{\alpha}{c} \\ & + \frac{\Gamma(c+1)}{c} \exp[(\lambda_1 - \gamma_1)x] - \alpha(\lambda_1 - \gamma_1)x \quad (۱۴) \\ \min_{\gamma_1, \alpha} \{ & \log[\Gamma(\alpha)] + \log c - ۱.۵۷۷۲ \frac{\alpha}{c} \\ & + \int_X \Gamma(\frac{c+1}{c}) \exp[\gamma_1 x] - \alpha \gamma_1 x \xi(dx) \}, \end{aligned}$$

به طوری که $\bar{\gamma}_1 = \lambda_1 - \gamma_1$.

همان گونه که پیش از این نیز بیان گردید، طرح KL - بهینه بیزی به احتمالات پیشین درست بودن هر مدل و توزیع های احتمالی پیشین پارامترهای دو مدل آماری که در این جا گسسته فرض می شوند، وابسته است. در این مثال، $\pi_1 = ۰.۴$ و $\pi_2 = ۱ - \pi_1 = ۰.۶$ به ترتیب بیانگر احتمالات پیشین برای چگالی های وایبل و $\theta_1 = (\alpha, \gamma_1)$ و $\theta_2 = (c, \lambda_1)$ به ترتیب متغیرهای تصادفی مستقل با توزیع های احتمالی پیشین p_1 و p_2 هستند. در حالات الف و ب از جدول ۲، توزیع های کناری پارامترهای α و c یکسان فرض شده اند، در حالی که توزیع های کناری γ_1 و λ_1 متفاوت هستند. با توجه به استقلال معیارهای KL - بهینگی از γ_1 و λ_1 ، طرح KL - بهینه بیزی برای هر دو حالت برابر بوده و به صورت زیر است

$$\xi_{BKL}^* = \begin{pmatrix} ۰.۶۱۷ & ۰.۳۸۳ \end{pmatrix}.$$

تابع $\psi^B(x, \xi_{BKL}^*)$ برای این طرح نیز در شکل زیر نشان داده شده است. واضح است که این تابع مقدار ماکزیمم خود را در نقطه طرحی اختیار می کند.

که به ترتیب فاصله های کولیک - لیبیلر بین توابع چگالی گاما و وایبل و بالعکس خواهند بود.

اگر Y متغیری تصادفی با توزیع وایبل باشد، آن گاه $X = \log(Y/b)$ دارای توزیع گامبل با پارامترهای c^{-1} و α خواهد بود. امید ریاضی این توزیع، شناخته شده و در این جا برابر است با $E_W(x) = -\gamma/c$ که در آن $\gamma \approx ۰.۵۷۷۲$ عدد اولر^{۲۰} است. بنابراین $E_W(\log Y) = \log b - \gamma/c$.

فرض کنید توزیع گاما درست باشد آن گاه با توجه به (۱۲) داریم

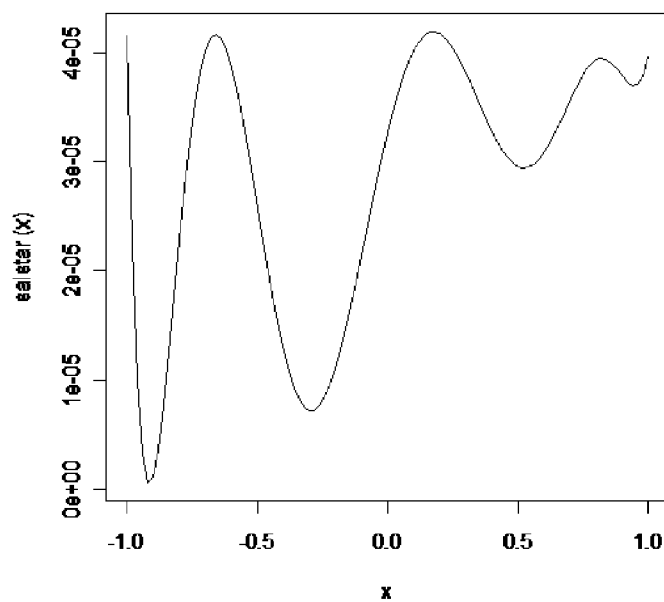
$$\begin{aligned} I_{21}(\xi, \gamma_1, \alpha) = & \min_{\lambda_1, c} \int_X l[f_G(y, x, \gamma, \alpha), f_W(y, x, \lambda_1, c)] \xi(dx) = \\ & \min_{\bar{\lambda}_1, c} \{ -\log[\Gamma(\alpha)] - \log c + (\alpha - c) \frac{\Gamma'(\alpha)}{\Gamma(\alpha)} - \alpha \\ & + \int_X \frac{\Gamma(\alpha+c)}{\Gamma(\alpha)} \exp[c\bar{\lambda}_1 x] - c\bar{\lambda}_1 x \xi(dx) \}, \end{aligned}$$

که در آن $\bar{\lambda}_1 = \gamma_1 - \lambda_1$. پس درحقیقت $I_{21}(\xi, \gamma_1, \alpha) = I_{21}(\xi, \alpha)$ به γ_1 وابسته نیست. به طریق مشابه، با فرض درستی توزیع وایبل، $I_{12}(\xi, \lambda_1, c) = I_{12}(\xi, c)$ مستقل از λ_1 است، زیرا با استفاده از (۱۳) داریم

$$I_{12}(\xi, \lambda_1, c) =$$

جدول ۱. احتمال‌های پیشین برای درستی مدل و توزیع‌های پیشین برای پارامترهای θ_1 و θ_2 در مثال ۱

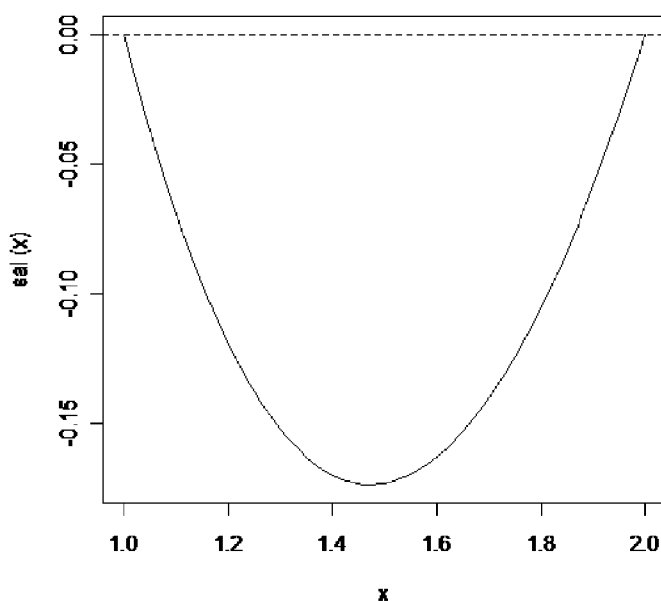
$\pi_1 = 0.6$				$\pi_2 = 0.4$			
θ_{10}	θ_{11}	θ_{12}	$p_1(\theta_1)$	θ_{20}	θ_{21}	θ_{22}	$p_2(\theta_2)$
۴.۵	-۱.۵	-۲.۰	۰.۲۵	۱.۰	۰.۵	-۲.۰	۰.۲۳
۴.۰	-۱.۰	-۲.۰	۰.۱۴	۰.۸	۰.۴	-۲.۰	۰.۳۳
۴.۵	-۲.۰	-۱.۵	۰.۱۱	۱.۰	۰.۶	-۱.۵	۰.۱۷
۵.۰	-۱.۵	-۱.۵	۰.۰۶	۱.۲	۰.۵	-۱.۵	۰.۱۵
۴.۰	-۲.۰	-۱.۰	۰.۰۵	۰.۸	۰.۶	-۱.۵	۰.۱۲
۴.۵	-۱.۵	-۱.۵	۰.۰۸				
۴.۰	-۱.۵	-۲.۰	۰.۰۵				
۴.۰	-۲.۰	-۲.۰	۰.۱۲				
۴.۵	-۲.۰	-۲.۰	۰.۰۷				
۵.۰	-۱.۵	-۲.۰	۰.۰۷				



شکل ۲. تابع $\psi^B(x, \xi_{BT}^*)$ در مثال ۱.

جدول ۲. توزیع‌های احتمالی پیشین برای پارامترهای $\theta_1 = (\alpha, \gamma_1)$ و $\theta_2 = (c, \lambda_1)$ در مثال ۲

p_2	حالت ب						حالت الف					
	λ_1	c	p_1	γ_1	α		p_1	γ_1	α			
۰.۲۵	۱	۳	۰.۲۵	۱	۳	۰.۱۲۵	۱	۳	۰.۱۲۵	۱	۳	
۰.۲۵	۴	۳	۰.۲۵	۴	۳	۰.۱۲۵	۲	۳	۰.۱۲۵	۲	۳	
۰.۲۵	۱	۶	۰.۲۵	۱	۶	۰.۱۲۵	۳	۳	۰.۱۲۵	۳	۳	
۰.۲۵	۴	۶	۰.۲۵	۴	۶	۰.۱۲۵	۴	۳	۰.۱۲۵	۴	۳	
						۰.۱۲۵	۱	۶	۰.۱۲۵	۱	۶	
						۰.۱۲۵	۲	۶	۰.۱۲۵	۲	۶	
						۰.۱۲۵	۳	۶	۰.۱۲۵	۳	۶	
												۶

شکل ۲. تابع $\psi^B(x, \xi_{BKL}^*)$ در مثال ۲.

مراجع

- [1] Atkinson, A.C. and Fedorov, V.V. (1975a). The design of experiments for discriminating between two rival models. *Biometrika* 62, 57-70.

- [2] Atkinson, A.C. and Fedorov, V.V. (1975b). Optimal design: experiments for discriminating between several models. *Biometrika* 62, 289-303.
- [3] Chernoff, H. (1953). Locally optimal design for estimating parameters. *Ann. Math. Statist.* 24, 586-602.
- [4] Kiefer, J. (1958). On the nonrandomized optimality and randomized non-optimality of symmetrical design. *Ann. Statist.* 2, 849-879.
- [5] Kiefer, J. (1959). Optimum experimental designs. *J. R. Statist. Soc. B* 21, 272-319.
- [6] Lopez-Fidalgo, J., Tommasi, C., Trandafir, P.C. (2007). An optimal experimental design criterion for discriminating between non-normal models. *J. R. Statist. Soc. B* 69, 231-242.
- [7] Ponce de Leon, A.C. and Atkinson, A.C. (1991a). Optimal experimental design for discriminating between two rival models in the presence of prior information. *Biometrika* 78, 601-608.
- [8] Smith, K. (1918). On the standard deviations of adjusted and interpolated values of an observed polynomial function and its constants and guidance they give towards a proper choice of the distribution of observations. *Biometrika* 12, 1-58.
- [9] Tommasi, C. and Lopez-Fidalgo, J. (2010). Bayesian optimum designs for discriminating between models with any distribution. *Computational Statistics and Data Analysis* 54, 143-150.