

Cvičenie 7: Výmenné algoritmy na hľadanie optimálnych návrhov

Výmenné algoritmy fungujú na princípe výmeny jedného alebo viac bodov pôvodného (štartovacieho) návrhu. Vo všeobecnosti ich môžeme rozdeliť na dva typy: tie, ktoré pridávajú/odoberajú body postupne po jednom a na tie, ktoré takto vymenia viac bodov naraz.

Štartovací návrh veľkosti N vygenerujeme sekvenčne postupným pridávaním bodov, ktoré maximalizujú determinant informačnej matice: dostaneme tak návrh s informačnou maticou M_0 .

Dalšou fázou je "vylepšenie" tohto návrhu výmenou niektorých pôvodných bodov návrhu za body zo zónu potenciálnych kandidátov. Vymeníme teda bod x_k za bod x_l podľa toho, ako dobre touto výmenou zväčšíme hodnotu determinantu informačnej matice.

Tvar variančnej funkcie pre kritérium D-optimality už poznáme z gradientných algoritmov:

$$d(x_n) = f'(x_n)M^{-1}f(x)$$

Pridanie bodu x_l sa na informačnej matici a jej determinante prejaví nasledovne:

$$M_{n+1} = M_n + f(x_l)f'(x_l)$$

$$\det(M_{n+1}) = \det(M_n)(1 + d(x_l))$$

Analogicky, odobratie bodu x_k má takýto vplyv:

$$M_{n+1} = M_n - f(x_k)f'(x_k)$$

$$\det(M_{n+1}) = \det(M_n)(1 - d(x_k))$$

Odobratie bodu x_k a súčasné pridanie bodu x_l :

$$M_{n+1} = M_n - f(x_k)f'(x_k) + f(x_l)f'(x_l)$$

$$\det(M_{n+1}) = \det(M_n)(1 + \Delta(x_k, x_l))$$

kde

$$\Delta(x_k, x_l) = d(x_l) - [d(x_k)d(x_l) - d^2(x_k, x_l)] - d(x_k)$$

a

$$d(x_k, x_l) = f'(x_k)M^{-1}f(x_l) = f'(x_l)M^{-1}f(x_k)$$

Základnou myšlienkou algoritmu je spočítať v každom kroku hodnoty Δ pre všetky možné dvojice (x_k, x_l) a vybrať najväčšiu. Vymenia sa potom medzi sebou body, pre ktoré je táto hodnota maximálna.

KL-výmenný algoritmus

Keby sme ale mali porovnávať všetky body návrhu so všetkými candidate points, počet porovnaní by bol veľmi veľký a algoritmus by bol pomalý. Zrýchlenie dosiahneme, ak si všimneme, že s najväčšou pravdepodobnosťou sa budú odoberať body s veľmi nízkou hodnotou variančnej funkcie a naopak, pridávame väčšinou body a vysokou hodnotou variančnej funkcie.

KL-algoritmus teda najskôr zmenší počet kandidátov na výmenu, a to tak, že uvažujeme K bodov s najmenšou hodnotou variančnej funkcie a L bodov s najväčšou hodnotou variančnej funkcie. Algoritmus zastavíme, ak už neexistuje žiadna výmena, ktorá by zväčšila determinant. Hodnoty K a L volíme tak, aby $1 \leq K \leq N$ a $1 \leq L \leq n - 1$

Ak položíme $K = N$ a $L = n - 1$, dostaneme pôvodný Fedorovov algoritmus.