# Stochastische Approximatie *)

*door J. Fabius*

UDC 519.27

S u m m a r y

*In this expository paper attention is drawn to the* R o b b i n s - M o n r o *approximation procedure for the root of a regression equation and to the modification of this method proposed by* H. K e s t e n.

*Both methods are used in a simulated experiment. An outline is given of several related methods.*

## 1. Inleiding

In vele situaties, o.a. bij sommige experimenten op biologisch terrein, smaakproeven, vermoeidheidsproeven, destructieve proeven etc. heeft men te maken met een stochastische grootheid, waarvan men geen numerieke waarnemingen kan verkrijgen. We kunnen dit toelichten aan de hand van een voorbeeld, dat betrekking heeft op de treksterkte van een bepaalde staalsoort. Gewoonlijk bepaalt men de treksterkte door een proefstaaf op trek te belasten, deze belasting geleidelijk op te voeren en waar te nemen hoe hoog de belasting is vlak voordat de staaf breekt. Men krijgt op deze wijze een numerieke waarneming van een stochastische grootheid: de treksterkte van staven van de gegeven afmetingen en gefabriceerd uit de te onderzoeken soort staal.

Nu hebben vele staalsoorten de eigenschap, dat de treksterkte bij plotselinge belasting een andere waarde heeft, dan die bij geleidelijk aangroeiende belasting, omdat in het laatste geval elastische en plastische deformatie kan optreden voordat een breuk ontstaat. Wenst men nu de treksterkte bij plotselinge belasting te bepalen, dan is de bovenomschreven methode daarom niet bruikbaar. Men zal een proefstaaf plotseling aan een bekende belasting moeten onderwerpen, zodat men slechts kan constateren of deze belasting te groot, dan wel te klein gekozen is. We hebben hier dus een voorbeeld van een stochastische grootheid $\underline{x}$ (de treksterkte bij plotselinge belasting van proefstaven van de te onderzoeken staalsoort) waarvan we geen numerieke waarnemingen kunnen verkrijgen. We kunnen alleen een bepaalde waarde $x$ proberen en constateren of deze waarde groter, dan wel kleiner is dan de onbekende waarde die $x$ heeft voor het getrokken monster (i.c. de proefstaaf).

In een dergelijke situatie heeft men behoefte aan een proefopzet, welke het mogelijk maakt toch iets te weten te komen over de verdeling van $\underline{x}$, die bijv. leidt tot een schatting voor het gemiddelde of de mediaan van $\underline{x}$. Een methode

*) Rapport S 253 van de Statistische Afdeling van het Mathematisch Centrum.

hiervoor is de zogenaamde "up and down" methode van W. J. Dixon en A. M. Mood (1948).

H. Robbins en S. Monro (1951) hebben een probleem bestudeerd, waarvan het hier besprokene een bijzonder geval is. In paragraaf 2 wordt nader op hun methode ingegaan, waarna in paragraaf 3 aan de hand van een gesimuleerd experiment de practische uitvoering gedemonstreerd wordt. Tenslotte wordt in paragraaf 4 op enige verwante methoden gewezen.

## 2. De methode van Robbins en Monro.

H. Robbins en S. Monro (1951) bestudeerden het volgende probleem: Zij $\underline{y}$ $(x)$ een stochastische grootheid met een onbekende verdeling, die van een parameter $x$ afhangt. De verwachting van $\underline{y}$ $(x)$ is in dat geval een functie $M$ $(x)$ van $x$, de zogenaamde regressiefunctie van $\underline{y}$ $(x)$ op $x$. Verondersteld wordt, dat het mogelijk is op elk gewenst niveau, d.w.z. voor elke gewenste waarde van $x$ waarnemingen van $\underline{y}$ $(x)$ te verrichten. Gevraagd wordt, die waarde $\theta$ van $x$ te schatten waarvoor $M$ $(x)$ een gegeven waarde $\alpha$ aanneemt. Men wenst derhalve een schatting voor de wortel $\theta$ van de regressievergelijking

$$M(x) = \alpha. \tag{2.1}$$

De procedure, die Robbins en Monro voorstelden, is de volgende: Kies een beginniveau $x_1$ en een oneindige rij positieve getallen $a_n$ $(n = 1,2,...)$, zodanig, dat

$$\sum_1^\infty a_n = \infty; \sum_1^\infty a_n^2 < \infty. \tag{2.2}$$

(We kunnen bijv. $a_n = 1/n$ nemen.)

Doe nu een waarneming $y$ $(x_1)$, van $\underline{y}$ $(x_1)$ en bereken een tweede niveau $x_2$ met behulp van de formule

$$x_{k+1} = x_k + a_k\,(\alpha - y\,(x_k)) \quad (k = 1, 2, \ldots). \tag{2.3}$$

Voer vervolgens een waarneming van $\underline{y}(x_2)$ uit en bereken een derde niveau, enz.

We krijgen op deze wijze een rij getallen, $x_1, x_2, \ldots$, die we willekeurig lang kunnen maken. Men heeft bewezen, dat deze rij met waarschijnlijkheid 1 convergeert naar het gezochte getal $\theta$, als voldaan is aan de volgende voorwaarden:

(2.4) $(x - \theta).\,(M(x) - \alpha) > 0$ als $x \neq \theta$, hetgeen inhoudt, dat (2.1) slechts één wortel heeft [1]).

[1]) Als de verdeling van $\underline{y}$ $(x)$ zodanig is, dat aan (2.5), (2.6) en (2.7), en aan

$$(x - \theta).\,(M(x) - \alpha) < 0 \quad \text{voor alle } x \neq \theta \tag{2.8}$$

voldaan is geeft de methode van Robbins en Monro, ook met waarschijnlijkheid 1, een naar $\theta$ convergerende rij getallen, mits we in (2.3) de term $a_k.\,(\alpha - y\,(x_k))$ vervangen door $a_k.\,(y\,(x_k) - \alpha)$.

(2.5) Er zijn positieve getallen, $c$ en $d$, zodanig, dat $|M(x)| \leqslant c + d \cdot |x|$
(2.6) $\inf |M(x) - \alpha| > 0$ voor alle $\delta_1$ en $\delta_2$ met $0 < \delta_1 < \delta_2$
$\delta_1 \leqslant |x - \theta| \leqslant \delta_2$.
(2.7) Er is een positief getal $\sigma^2$, zodanig, dat var $\underline{y}(x) =$
$\varepsilon(\underline{y}(x) - M(x))^2 \leqslant \sigma^2$ voor alle $x$.

(Zie bijv. J. Blum (1954a), D. L. Burkholder (1956) en A. Dvoretzky (1955).)

Ook heeft men onder iets sterkere voorwaarden bewezen dat $(\underline{x}_n - \theta)$ na normering asymptotisch normaal verdeeld is (K. L. Chung (1954), D. L. Burkholder (1956), J. Sacks (1958)). Helaas blijkt de asymptotische variantie van de onbekende regressiefunctie af te hangen, zodat men met behulp van deze variantie geen betrouwbaarheidsintervallen kan berekenen.

Verschillende auteurs, o.a. J. Blum (1954b), A. Dvoretzky (1955) en J. Sacks (1958), hebben de methode van Robbins en Monro gegeneraliseerd tot een methode die toegepast kan worden als $\underline{y}(x)$ en $x$ meerdimensionale vectoren, of zelfs elementen van genormeerde lineaire ruimten zijn.

Ook zijn wijzigingen in de procedure voorgesteld met het oogmerk de uitvoering van de experimenten te vereenvoudigen (H. D. Block (1957)) of de convergentie van het proces te versnellen (H. Kesten (1958)). Vooral deze laatste modificatie, die wij de versnelde methode van Kesten zullen noemen, lijkt zeer nuttig. Kesten eist naast (2.2) dat de getallen $a_n$ met toenemende $n$ monotoon dalend zijn. Voor de berekening van $x_2$ gebruikt hij, geheel als boven, $x_1$ en $a_1$. Voor de berekening van $x_3$ gebruikt hij echter $x_2$ en nogmaals $a_1$ als het teken van $(\alpha - y(x_2))$ gelijk is aan dat van $(\alpha - y(x_1))$, terwijl hij $x_2$ en $a_2$ gebruikt als dit niet het geval is. We kunnen dit als volgt beschrijven: We beginnen op niveau $x_1$, en na elke waarneming doen we een stapje naar boven of naar beneden. Zolang deze stapjes niet van richting veranderen werken we met $a_1$. Het eerste stapje, dat de andere kant opgaat, wordt berekend met $a_2$, waarna we $a_2$ blijven gebruiken totdat een tweede omkeerpunt bereikt wordt, waarna we met $a_3$ verder gaan, enz.

Het voordeel van deze methode ligt hierin, dat we bij ongunstige keuze van $x_1$, d.w.z. ver verwijderd van $\theta$, met grote stappen van $x_1$ tot in de nabijheid van $\theta$ gaan, waarna de grootte der stappen gaat afnemen, terwijl volgens het voorschrift van Robbins en Monro de grootte der stappen direct al gaat afnemen, zodat het veel langer kan duren voordat we een niveau, dat niet al te ver van $\theta$ verwijderd is, bereiken.

## 3. Een gesimuleerd experiment

Problemen van de in paragraaf 1 beschouwde soort kunnen we opvatten als bijzondere gevallen van het in paragraaf 2 behandelde: Zij $\underline{x}$ de stochastische grootheid die we bestuderen, en laat de onbekende verdelingsfunctie van $\underline{x}$ voorgesteld worden door $F(x)$. Volgens het in paragraaf 1 veronderstelde kunnen we geen numerieke waarnemingen van $\underline{x}$ verkrijgen doch slechts een experiment uitvoeren en nagaan of bij dat experiment $\underline{x}$ een waarde aanneemt die kleiner dan of hoogstens gelijk aan een van te voren gekozen getal $x$, dan wel groter dan datzelfde getal $x$ is.

Als we deze twee mogelijke uitkomsten van een experiment aangeven met 1 resp. 0, en als we de uitslag van een experiment na de keuze van het getal $x$ voortaan $\underline{y}(x)$ noemen, dan is $\underline{y}(x)$ een stochastische grootheid, die alleen de waarden 0 en 1 kan aannemen, en de verwachting $M(x)$ van $\underline{y}(x)$ is in dat geval:

$$M(x) = \mathcal{E}\underline{y}(x) = 1.P\{\underline{x} \leqslant x\} = F(x). \tag{3.1}$$

Toepassing van de methode van Robbins en Monro met $\alpha = \frac{1}{2}$ geeft

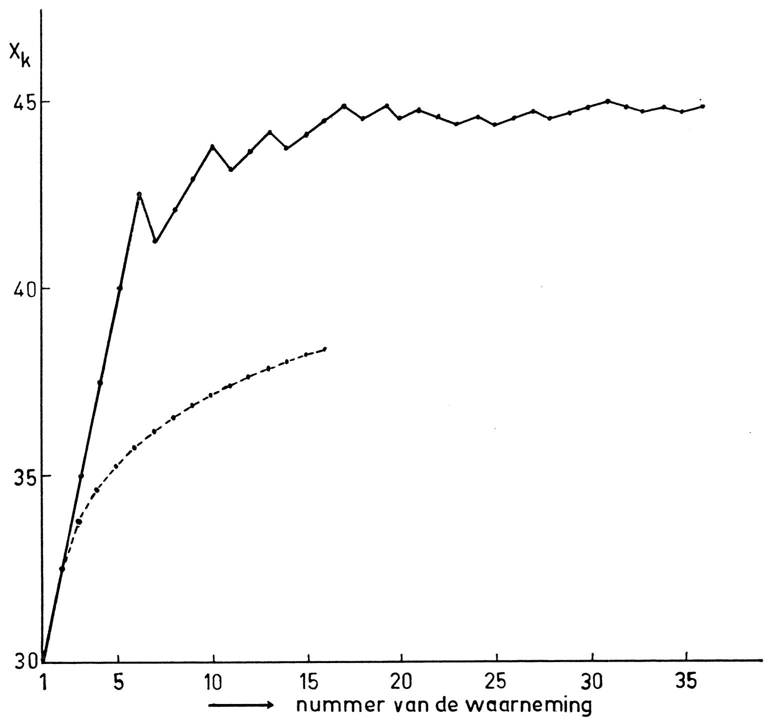


*Fig. 1. Stochastische approximatie van de mediaan van de streksterkte bij plotselinge belasting van proefstaven van bepaalde staalsoort.*

$x_1 = 30$ *kg/cm*$^2$, $a_n = 5/n$ *kg/cm*$^2$.

- - - *Methode van Robbins en Monro.* —— *Versnelde methode van Kesten.*

nu een benadering van de mediaan van $\underline{x}$, daar de wortel $\theta$ van de vergelijking $F(x) = \frac{1}{2}$ per definitie de mediaan van $\underline{x}$ is.

Ter illustratie hebben wij een experiment gesimuleerd, en wel de approximatie van de mediaan van de treksterkte bij plotselinge belasting, $\underline{x}$, van proefstaven van een bepaalde staalsoort. Hiertoe werd aangenomen dat $\underline{x}$ normaal verdeeld is met $\mu = 45$ kg/cm² en $\sigma = 2$ kg/cm². Een experiment, waarbij een proefstaaf plotseling zodanig wordt belast, dat een spanning van $x$ kg/cm² optreedt, werd nu gesimuleerd doordat een aselecte trekking $z$ uit een normale verdeling met $\mu = 45$ en $\sigma = 2$ vergeleken werd met $x$. Het resultaat $z \leqslant x$ werd „breuk" genoemd en aangeduid met $y(x) = 1$, het resultaat $z > x$ werd „geen breuk" genoemd en aangeduid met $y(x) = 0$. Als beginniveau werd gekozen $x_1 = 30$ kg/cm² en voorts werd $a_n = 5/n$ kg/cm² genomen.

De resultaten van 15 waarnemingen volgens de methode van Robbins en Monro zijn in tabel 1 samengevat en grafisch voorgesteld in fig. 1. Na deze 15 waarnemingen werd het experiment niet verder voortgezet, omdat toen wel duidelijk gebleken was, dat $x_1$ te laag gekozen was om na een niet te groot aantal waarnemingen een redelijke schatting te verkrijgen.

Het experiment werd vervolgens herhaald, weer met $x_1 = 30$ kg/cm² en $a_n = 5/n$ kg/cm², doch nu volgens de versnelde methode van Kesten. De resultaten van 35 waarnemingen zijn gegeven in tabel 2 en grafisch uitgezet in fig. 1.

De voordelen van de versnelde methode van Kesten komen — vooral in fig. 1 — duidelijk naar voren. Het is nu ook duidelijk dat er veel afhangt van de keuze van $x_1$ en de getallen $a_n$. Als $x_1$ ver van $\theta$ verwijderd ligt en de $a_n$ klein zijn, dan heeft men zeer veel waarnemingen nodig. Bij routine-onderzoekingen zal men echter vaak, op grond van de ervaring, van tevoren al een ruwe indruk hebben van de grootte van $\theta$. Men kan dan $x_1$ in de omgeving

TABEL 1

*Approximatie van de mediaan van de treksterkte bij plotselinge belasting van proefstaven van een bepaalde staalsoort volgens de methode van Robbins en Monro. $a_n = 5/n$ kg/cm².*

| $k$ | $x_k$ in kg/cm² | $y(x_k)$ | $k$ | $x_k$ in kg/cm² | $y(x_k)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 30,00 | 0 | 9 | 36,83 | 0 |
| 2 | 32,50 | 0 | 10 | 37,11 | 0 |
| 3 | 33,75 | 0 | 11 | 37,36 | 0 |
| 4 | 34,58 | 0 | 12 | 37,59 | 0 |
| 5 | 35,20 | 0 | 13 | 37,80 | 0 |
| 6 | 35,70 | 0 | 14 | 37,99 | 0 |
| 7 | 36,12 | 0 | 15 | 38,17 | 0 |
| 8 | 36,52 | 0 | 16 | 38,34 | |

TABEL 2

*Approximatie van de mediaan van de treksterkte bij plotselinge belasting van proefstaven van een bepaalde staalsoort volgens de versnelde methode van* K e s t e n. $a_n = 5/n$ *kg/cm²*.

| $k$ | $x_k$ in kg/cm² | $y\ (x_k)$ | $k$ | $x_k$ in kg/cm² | $y\ (x_k)$ | $k$ | $x_k$ in kg/cm² | $y\ (x_k)$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 30,00 | 0 | 13 | 44,12 | 1 | 25 | 44,32 | 0 |
| 2 | 32,50 | 0 | 14 | 43,70 | 0 | 26 | 44,49 | 0 |
| 3 | 35,00 | 0 | 15 | 44,06 | 0 | 27 | 44,66 | 1 |
| 4 | 37,50 | 0 | 16 | 44,42 | 0 | 28 | 44,50 | 0 |
| 5 | 40,00 | 0 | 17 | 44,78 | 1 | 29 | 44,65 | 0 |
| 6 | 42,50 | 1 | 18 | 44,47 | 0 | 30 | 44,80 | 0 |
| 7 | 41,25 | 0 | 19 | 44,75 | 1 | 31 | 44,95 | 1 |
| 8 | 42,08 | 0 | 20 | 44,50 | 0 | 32 | 44,81 | 1 |
| 9 | 42,91 | 0 | 21 | 44,73 | 1 | 33 | 44,67 | 0 |
| 10 | 43,74 | 1 | 22 | 44,52 | 1 | 34 | 44,80 | 1 |
| 11 | 43,12 | 0 | 23 | 44,31 | 0 | 35 | 44,68 | 0 |
| 12 | 43,62 | 0 | 24 | 44,50 | 1 | 36 | 44,80 | |

van $\theta$ kiezen en de getallen $a_n$ klein nemen. Ook in dit geval biedt de versnelde methode echter voordelen, althans geen nadelen.

Een vraag is nog, wanneer het experiment het beste beëindigd kan worden, en wat we dan als schatting voor $\theta$ kunnen gebruiken. Als men $n$ waarnemingen heeft uitgevoerd, dan is $x_{n+1}$ — dus die waarde van $x$, waarbij men een volgende waarneming zou uitvoeren — een schatting voor $\theta$. Een bevredigender antwoord is op de vraag naar de beste schatting voor $\theta$ nog niet gegeven. Uiteraard is dit een ernstig bezwaar tegen deze methoden, doch, in die gevallen waarvoor geen andere methoden bruikbaar zijn, zal men zich er gaarne mee willen behelpen.

## 4. Enige verwante methoden

Keren we nu weer terug naar het algemene geval van paragraaf 2. Het kan voorkomen, dat men geïnteresseerd is in die waarde $\theta$ van $x$, waarvoor $M(x)$ zijn maximum bereikt — aangenomen dat $M(x)$ een eenduidig bepaald maximum heeft. J. K i e f e r en J. W o l f o w i t z (1952) hebben een stochastisch approximatieproces gegeven, dat onder zekere voorwaarden met waarschijnlijkheid 1 naar $\theta$ convergeert. (J. B l u m (1954a), D. L. B u r k h o l d e r (1956), A. D v o r e t z k y (1955).) De te volgen handelwijze lijkt veel op die van R o b b i n s en M o n r o: Men kiest wederom een beginniveau $x_1$ en vervolgens twee oneindige rijen positieve getallen, $a_n$ en $c_n$ $(n = 1, 2, \ldots)$, zodanig dat

$$\sum_{1}^{\infty} a_n = \infty; \sum_{1}^{\infty} \left(\frac{a_n}{c_n}\right)^2 < \infty; \lim_{n\to\infty} c_n = 0. \tag{4.1}$$

(We kunnen bijv. $a_n = 1/n$ en $c_n = n^{-\delta}$ kiezen, met $0 < \delta < \frac{1}{2}$).
Men voert nu voor elke stap twee waarnemingen uit, ter weerszijden van het laatst berekende niveau, waarna men een volgend niveau vindt met behulp van de formule

$$(4.2) \qquad x_{k+1} = x_k + \frac{a_k}{c_k} \cdot (y\,(x_k + c_k) - y\,(x_k - c_k)) \quad (k = 1, 2, \ldots).$$

Een derde soortgelijke methode is ontwikkeld door D. L. Burkholder (1956), ter approximatie van die waarde $\theta$ van $x$ waarvoor $m\,(x)$ een buigpunt heeft. Toepassing van deze methode op de problemen, die in de paragrafen 1 en 3 besproken werden, geeft een benadering van de modus van $\underline{x}$. Men gaat weer uit van een beginniveau $x_1$ en twee rijen positieve getallen die aan (4.1) voldoen, waarna men voor elk stapje drie waarnemingen uitvoert. Het proces wordt verder beschreven door

$$(4.3) \qquad x_{k+1} = x_k + \frac{a_k}{c^2_k} \left( \frac{y\,(x_k + c_k) + y\,(x_k - c_k)}{2} - y\,(x_k) \right) \quad (k = 1, 2, \ldots).$$

Ook dit proces convergeert met waarschijnlijkheid 1 naar $\theta$ als aan bepaalde eisen voldaan is.

Bij de beide methoden die in deze paragraaf ter sprake zijn gekomen is $\underline{x}_n - \theta$ na passende normering onder zekere voorwaarden asymptotisch normaal verdeeld met verwachting 0. (C. Derman (1956a), D. L. Burkholder (1956), J. Sacks (1958)).

## Literatuur


W. J. Dixon en A. M. Mood (1948), A method for obtaining and analyzing sensitivity data, J. Amer. Stat. Assoc. **43** (1948), pp. 109—126.

H. Robbins en S. Monro (1951), A stochastic approximation procedure, Ann. Math. Stat. **22** (1951), pp. 400—407.

J. Wolfowitz (1952), On the stochastic approximation method of Robbins and Monro, Ann. Math. Stat. **23** (1952) pp. 457—461.

J. Kiefer en J. Wolfowitz (1952), Stochastic estimation of the maximum of a regression function, Ann. Math. Stat. **23** (1952), pp. 462—466.

J. Blum (1954a), Approximation methods which converge with probability one, Ann. Math. Stat. **25** (1954), pp. 382—385.

J. Blum (1954b), Multidimensional stochastic approximation methods, Ann. Math. Stat. **25** (1954), pp. 737—744.

K. L. Chung (1954). On a stochastic approximation procedure, Ann. Math. Stat. **25** (1954), pp. 463—483.

A. Dvoretzky (1955), On stochastic approximation, Proceedings of the third Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, University of California Press 1956, pp. 39—55.

D. L. Burkholder (1956), On a class of stochastic approximation processes, Ann. Math. Stat. **27** (1956), pp. 1044—1060.

C. Derman (1956a), An application of Chung's lemma to the Kiefer-Wolfowitz stochastic approximation procedure, Ann. Math. Stat. **27** (1956), pp. 532—536.

C. Derman (1956b), Stochastic approximation, Ann. Math. Stat. **27** (1956), pp. 879—886.

J. Wolfowitz (1956), On stochastic approximation methods, Ann. Math. Stat. **27** (1956), pp. 1151—1156.

H. D. Block (1957), Estimates of error for two modifications of the Robbins-Monro stochastic approximation process, Ann. Math. Stat. **28** (1957), pp. 1003—1010.

H. Kesten (1958), Accelerated stochastic approximation, Ann. Math. Stat. **29** (1958), pp. 41—59.

J. Sacks (1958), Asymptotical distributions of stochastic approximation procedures, Ann. Math. Stat. **29** (1958), pp. 373—405.