Конспект по курсу В. Меласа «Дополнительные главы оптимального планирования эксперимента»

Собрано 8 января 2016 г. в 22:39

Содержание

1. Асимптотические свойства нелинейного метода наименьших квадратов

Изложение материала данного вопроса имеется в разделе 1.2 Учебного Пособия: «Локально Оптимлальные Планы Эксперимента». Для данного вопроса необходимо понимать, как устроена нелинейная регрессионная модель (вопрос 2).

Устройство нелинейной модели и основные понятия. Заданы $N \in \mathbb{N}$ (объем выборки), $m \in \mathbb{N}$, $\Theta \in \mathbb{R}^m$ (неизвестный многомерный параметр), $\mathcal{X}$ — некоторое множество[1]. Пусть происходит «эксперимент», в котором наблюдаются (одномерные) «результаты эксперимента» $y_1, y_2, \dots, y_N \in \mathbb{R}^1$. Рассмотрим отображение $\eta : \mathcal{X} \times \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}^1$. Аналитическое задание отображения η как функции двух аргументов нам известно.

Модель эксперимента задается следующим образом: для всех $j \in 1 : N$

$$y_j = \eta(x_j, \Theta) + \varepsilon_j, \tag{1}$$

где $x_1, x_2, \dots, x_N \in \mathcal{X}$ — «условия эксперимента», $\Theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^m$, а $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$ — некоррелированные, центрированные, гомоскедастичные случайные величины, т.е. $\mathbb{E}\varepsilon_j = 0$ и $\mathbb{D}\varepsilon_j = \sigma^2$ для всех $j \in 1 : N$.[2]

Задача: оценить параметр Θ. Ясно, что задача является регрессионной, причем функция η является регрессией.

Нужно формально объяснить, что значит «нелинейная модель», то есть чем эта модель отличается от «линейной». Будем говорить, что параметр θ_j, где $j \in 1 : m$, входит нелинейно в модель (1), если при фиксированном x

$$\frac{\partial \eta(x, \cdot)}{\partial \theta_j}(\theta_j)$$

существует и не является постоянной. Если же указанная функция является постоянной, то говорим, что параметр θ_j входит в модель линейно. Если есть хотя бы один параметр θ_j, который входит в модель нелинейно, то модель (1) называют нелинейной. Регрессию η в таком случае тоже называют нелинейной (по параметрам).

Для того, чтобы определить неизвестный многомерный параметр Θ, нужно выбрать эксперементальные условия $x_1, x_2, \dots, x_N$ и метод оценивания параметров. Определимся сначала с первым вопросом.

Определение. *Любой набор из (не обязательно различных) N элементов множества $\mathcal{X}$ будем называть точным планом эксперимента.*

Определение. *Пусть n — фиксированное натуральное число. Приближенным планом эксперимента называют дискретную вероятностную[3] меру, задаваемую таблицей*

$$\xi = \{x_1, x_2, \dots, x_n; \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n\}, \tag{2}$$

где x_j различные, $\mu_i > 0$ для всех i, а $\sum_{i=1}^n \mu_i = 1$[4].

Заметим, что все условия, наложенные на меру являются простыми (необременняющими) и естественными.

[1] В самом общем описании, никакие условия на это множество не накладываются.

[2] Естественно ε_j играют роль ошибок измерения, шума.

[3] *то есть нормированную на единицу.*

[4] *Подразумевается, что $\xi(x_i) = \mu_i$ для всех i*

Выбор «наилучшего» плана является отдельной задачей. Пусть план фиксирован, тогда в качестве метода оценивания параметров рассмотрим (нелинейный) метод наименьших квадратов. Будем обозначать $\hat{\Theta}$ — решение экстремальной задачи МНК:

$$\sum_{j=1}^{N}(\eta(x_j,\Theta)-y_j)^2 \to \min_{\Theta\in\mathbb{R}^m}.$$

Оценки $\hat{\Theta}$ обладают хорошими асимптотическими свойствами.

Асимптотические свойства МНК-оценок. В данном разделе мы начинаем вводить ограничения на множества Ω и $\mathcal{X}$. Пусть Ω — ограниченное замкнутое множество в $\mathbb{R}^m$, $\mathcal{X}$ — ограниченное замкнутое множество в $\mathbb{R}^k$, где $k\in\mathbb{N}$.

Пусть функция регрессии $\eta_(x,\Theta)$ нелинейна по параметрм и определена при всех $x\in\mathcal{X}$, $\Theta\in\Omega$. Через Θ_u будем обозначать истинное значение вектора параметров, т.е. такое значение Θ, при котором верна модель (1).

Под планом в дальнейшем всегда подразумеваем приближенный. Для дискретных мер $\xi=\{x_1,x_2,\dots,x_n;\mu_1,\mu_2,\dots,\mu_n\}$ используем стандартную запись (интеграл по мере, 2 курс):

$$\int_{\mathcal{X}} g(x)\,d\xi(x)=\sum_{i=1}^{n} g(x_i)\mu_i,$$

где g — произвольная функция, определенная на $\mathcal{X}$[5].

Введем предположения:

1. регрессия $\eta(x,\Theta)$ непрерывна на множестве $\mathcal{X}\times\Omega$;
2. имеется слабая сходимость распределений $\mathcal{L}(\xi_N)\Rightarrow\mathcal{L}(\xi)$, где ξ — некоторый план, то есть для любой функции $g\in C(\mathcal{X})$ имеет место сходимость

$$\int_{\mathcal{X}} g(x)\,d\xi_N(x)=\int_{\mathcal{X}} g(x)\,d\xi(x);$$

3. для $\Theta,\overline{\Theta}\in\Omega$ величина

$$\int_{\mathcal{X}}\left(\eta(x,\Theta)-\eta(x,\overline{\Theta})\right)^2\,d\xi(x)$$

равна нулю только при $\Theta=\overline{\Theta}$[6];

4. Частные производные первого и второго порядка регрессии η по параметру существуют и непрерывны на $\mathcal{X}\times\Omega$, то есть $\eta\in C^2_\Theta(\mathcal{X}\times\Omega)$.
5. Истинное значение параметра Θ_u является внутренней точкой Ω[7].
6. Матрица[8]

$$M(\xi,\Theta)=\int_{\mathcal{X}} f(x,\Theta)f^{\mathrm{T}}(x,\Theta)\,d\xi(x), \tag{3}$$

[5]На самом деле тут должна быть измеримость по мере, почему мы ее не требуем?

[6]тогда и только тогда, правда?

[7]то есть не принадлежит frac(Ω). Это существенно, так как множество Ω является замкнутым.

[8]Убедитесь, что понимаете, что это, действительно, матрица.

где

$$f(x,\Theta) = \left(\frac{\partial\eta(x,\Theta)}{\partial\theta_1}, \frac{\partial\eta(x,\Theta)}{\partial\theta_2}, \dots, \frac{\partial\eta(x,\Theta)}{\partial\theta_m}\right)^{\mathrm{T}}$$

не вырождена при $\Theta = \Theta_u$.

Теперь пусть

$$\xi_N = \{x_1, x_2, \dots, x_N; 1/N, 1/N, \dots 1/N\},$$

где x_i — необязательно различные точки,

$$\hat{\Theta}_N = \arg\min_{\Theta\in\Omega} \sum_{i=1}^{N} (\eta(x_i,\Theta) - y_i)^2. \tag{4}$$

Теорема (без доказательства). *Если случайные ошибки $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^N$ некоррелированы, одинаково распределены и являются центрированными и гомоскедастичными, результаты экспериментов описываются уравнением (1) и выполнены предположения 1–3, то последовательность МНК-оценок сильно состоятельна, т. е. при $N \to \infty$*

$$\hat{\Theta}_N \to \Theta_u$$

с вероятностью 1, где $\hat{\Theta}_N$ определено формулой (4).

Если дополнительно выполняются предположения 4–6, то последовательность случайных векторов $\sqrt{N}(\hat{\Theta}_N - \Theta_u)$ имеет асимптотически нормальное распределение с нулевым вектором средних и ковариационной матрицей $\sigma^2 M^{-1}(\xi, \Theta_u)$. [9]

Матрицу $M(\xi,\Theta_u)$ называют информационной матрицей для нелинейных по параметрам регрессионных моделей.

2. Постановка задачи оптимального планирования для нелинейных моделей. Теорема эквивалентности для локально оптимальных планов.

Пусть $N \in \mathbb{N}$, $y_1, \dots, y_N \in \mathbb{R}$, $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{X}$, где $\mathbb{X}$ некоторое множество, обычно $\mathbb{R}^k$, а $y_1, \dots, y_N, x_1, \dots, x_N$ — наши «наблюдения», которые мы будем называть результатами эксперимента.

Введем множество параметров Θ и предположим, что наблюдения описываются следующей моделью:

$$y_i = \eta(x_j, \theta) + \varepsilon_j, \tag{5}$$

где $\theta \in \Theta$ — параметр, значения которого мы и будем пытаться в дальнейшем оценить, а ε_j — случайный шум, про который мы предположим, что

$$E\varepsilon = 0,\ E\varepsilon^2 = \sigma^2$$

Будем предполагать, что $\Theta \subset \mathbb{R}^m$.

[9] *Вспомните, откуда тут σ.*

Определение. *Будем говорить, что параметр θ_j входит в (5) нелинейным образом, если для фиксированного $x \in \mathbb{X}$ существует и не является постоянной функция*

$$\phi_{j,x}(\theta) = \frac{\partial \eta(x,\theta)}{\theta_j}$$

Если $\phi_{j,x}(\theta) = const$, то θ_j входит в модель линейным образом.

Определение. *Под точным планом эксперимента будем понимать N точек $x_1, \ldots, x_N \in \mathbb{X}$*

Определение. *Под приближенным планом эксперимента будем понимать $n \in \mathbb{N}$ пар (x_i, μ_i), где*

$$x_i \in \mathbb{X}, x_i \neq x_j, i \neq j,$$

$$\mu_i > 0, \ \sum_{i=1}^{n} \mu_i = 1,$$

Пусть N — доступное число «ресурсов» (кол-во экспериментов, которое можно провести). Тогда при использование приближенного плана рекомендуется в точке x_j провести $\mu_j N$ экспериментов. В итоге получится точный план, как работать с которым уже ясно.

Определение. *При фиксированном плане для оценки θ будем использовать метод наименьших квадратов:*

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta \in \Theta} \sum_{j=1}^{N} \left(\eta(x_j, \theta) - y_j)^2 \right)$$

Наша задача — выбрать некоторым образом точки $x_1, \ldots, x_N$, чтобы МНК-оценка была в некотором смысле оптимальной.

Введем еще несколько обозначений:

Определение. *Пусть ξ — дискретная вероятностная мера с носителем $x_1, \ldots, x_n$. Тогда*

$$\int_{\mathbb{X}} g(x) d\xi(x) = \sum_{i=1}^{n} g(x_i) \xi_i$$

Определение. *Пусть $f(x,\theta)^{\mathrm{T}} = \left(\frac{\partial \eta(x,\theta)}{\partial \theta_1}, \ldots, \frac{\partial \eta(x,\theta)}{\partial \theta_1} \right)$. Пусть θ^u — истинной значение оцениваемого параметра. Тогда информационной матрицей будем называть*

$$M(\xi, \theta_u) = \int_{\mathbb{X}} f(x,\theta) f(x,\theta)^{\mathrm{T}} d\xi(x)$$

Заметим, что $M(\xi, \theta_u)$ в случае, когда все параметры входят линейно, не зависит от θ_u и т.к. обратная к информационной матрице — «нижняя оценка» на дисперсию оцениваемого параметра (в многомерном случае под дисперсией понимается ковариационная матрица), то можно естественным образом ввести различные понятия оптимальности, опираясь на собственные числа информационной матрицы. Например, D-критерий предлагает выбирать планы, максимизирующие определитель информационной матрицы.

В нелинейном случае все сложнее. Информационная матрица зависит от «истинного» значения параметра, которое неизвестно. Предположим, что у нас есть некоторое приближение θ^0 «истинного» параметра. Тогда будем называть план, максимизирующий определитель матрицы $M(\xi, \theta^0)$ локально D-оптимальным.

Разложим η в ряд Тейлора в окресности $\theta^0 \in \Theta \subset \mathbb{R}^m$:

$$\eta(x,\theta) = \eta(x,\theta^0) + (\theta - \theta^0)^{\mathrm{T}} f(x,\theta^0) + r(x,\theta)$$

Введем следующие обозначения:

$$f(x)^{\mathrm{T}} = f(x,\theta^0)^{\mathrm{T}} = \left(\frac{\partial\eta(x,\theta^0)}{\partial\theta_1},\ldots,\frac{\partial\eta(x,\theta^0)}{\partial\theta_m}\right)$$

$$M(\xi) = M(\xi,\theta^0) = \int\limits_{\mathbb{X}} f(x) f(x)^{\mathrm{T}} d\xi(x)$$

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

Для данных обозначение будет верна следующая теорема:

Теорема (Эквивалентности). *План ξ^* является локально D-оптимальным для модели (5) тогда и только тогда, когда*

$$m = \max_{x\in\mathbb{X}} d(x,\xi^*)$$

Кроме того,

$$\max_{x\in\mathbb{X}} d(x,\xi^*) = \inf_{\xi} \max_{x\in\mathbb{X}} d(x,\xi)$$

Функция $d(x,\xi^*)$ достигает максимального значение во всех точках любого локального D-оптимального плана. Информационные матрицы всех локально D-оптимального планов совпадают.

Доказательство. Без доказательства. Является переформулировкой теоремы Кифера-Вольфовица (которая видимо была раньше). □

3. Системы Чебышева. Два эквивалентных определения.

Определение (Конструктивное). *Пусть $u_0,\ldots,u_n$ — заданные непрерывные вещественные функции на $[a,b]$. Система называется системой функций Чебышева, если определители*

$$U\begin{pmatrix} 0 & 1 & \ldots & n \\ t_0 & t_1 & \ldots & t_n \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} u_0(t_0) & \ldots & u_0(t_n) \\ u_1(t_0) & \ldots & u_1(t_n) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ u_n(t_0) & \ldots & u_n(t_n) \end{pmatrix}$$

строго положительны для $\forall a \le t_0 < t_1 < \ldots < t_n \le b$.[10]

Здесь нужно рассказать о (по всей видимости) естественности такой штуки через определитель Вандермонда, но я пока сам не понимаю.

Определение. *Обобщенным многочленом называется функция $u(t) = \sum\limits_{i=0}^{n} a_i u_i(t),\ a_i \in \mathbb{R}$.* [11]

Определение. *Многочлен называется нетривиальным, если $\sum\limits_{i=0}^{n} a_i^2 \ne 0$.* ***Придирка****: Это условие глядится странновато. На u_i задана упорядоченность или нет? Если да, значит обобщенные многочлены не просто так названы многочленами. У любого нормального многочлена есть степень! Тут она тоже должна быть, иначе термин обобщенный многочлен слишком натянут. А если есть степень, то разумно требовать, чтобы коэффициент при старшем члене был не 0.*

[10] *На самом деле, ничего ведь страшного, если все определители будут строго отрицательны? Это используется в теореме этого билета, обратите на это внимание.*

[11] *Здесь не накладывается никаких дополнительных ограничений! Просто произвольная линейная комбинация.*

Количество нулей обобщенного многочлена u обозначим $Z(u)$.

Определение (Аксиоматическое). *Система вещественных, непрерывных функций $\{u_i\}_{i=0}^n$, определенных на отрезке $[a,b]$ называется системой Чебышева если $Z(u) \leqslant n$ для любого нетривиального обобщенного многочлена u, построенного по этой системе.*

Теорема. *Пусть $\{u_i\}_{i=0}^n$ — система вещественных непрерывных функций, определенных на отрезке $[a,b]$. СУР:*

1. *Система $\{u_i\}_{i=0}^n$ с точностью до знака некоторых из u_i*[12] *образует систему Чебышева 3.*
2. *Система $\{u_i\}_{i=0}^n$ образует систему Чебышева 3.*

Доказательство. Пусть $a = (a_0, \dots, a_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{n+1}$ такой, что $\sum_{i=1}^n a_i^2 \neq 0$.. Рассмотрим обобщенный многочлен $u(t) = \sum_{i=0}^n a_i u_i(t)$. Для произвольного набора точек $\{t_i\}_{i=0}^n \subset [a,b]$ введем матрицу

$$\mathbf{U}(t_0, t_1, \dots, t_n) = \begin{pmatrix} u_0(t_0) & \dots & u_0(t_n) \\ u_1(t_0) & \dots & u_1(t_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_0) & \dots & u_n(t_n) \end{pmatrix}.$$

$1 \to 2$. Пусть $Z(u) \geqslant n+1$ и $t_0, t_1, \dots, t_n$ — первые $n+1$ нулей многочлена u. Тогда $\mathbf{U}(t_0, t_1, \dots, t_n) a = \mathbf{0}$[13], что противоречит невырожденности $\mathbf{U}$.

$2 \to 1$. Пусть система $\{u_i\}_{i=0}^n$ — не чебышевская в смысле определения 3. Тогда найдется такой набор точек $t_0, t_1, \dots, t_n$, матрица $\mathbf{U} = \mathbf{U}(t_0, t_1, \dots, t_n)$ и вектор $a = (a_0, a_1 \dots, a_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{n+1}$, что $\mathbf{U}a = \mathbf{0}$. То есть существует обобщенный многочлен, имеющий не менее $n+1$ нуля. Противоречие. □

4. Системы Чебышева. Метод проверки, основанный на последовательном дифференцировании. Примеры применения (экспоненциальные модели.)

Пусть $u_0, u_2, \dots, u_k$ — некоторая система функций. Мы хотим проверить, что она является Чебышевской. Рассмотрим следующий набор функций:

$$F_{00}(t) = u_0(t), \dots, F_{0k}(t) = u_n(t)$$

$$F_{11}(t) = \left(\frac{F_{01}}{F_{00}}\right)', \dots, F_{1k}(t) = \left(\frac{F_{0k}}{F_{00}}\right)'$$

$$F_{22}(t) = \left(\frac{F_{12}}{F_{11}}\right)', \dots, F_{2k}(t) = \left(\frac{F_{1k}}{F_{11}}\right)'$$

$$\dots$$

$$F_{kk} = \left(\frac{F_{k-1,k}}{F_{k-1,k-1}}\right)'$$

Теорема. *Если существуют все функции F_{ij} и $F_{ii} > 0$, то система $u_0, \dots, u_k$ является системой Чебышева.*

---

[12] *Наверное это нужно написать формально, но мне не приходят в голову изящные способы*

[13] Здесь временнный шрифт.

Доказательство. Пусть это не так. Тогда $\exists u(t) = \sum\limits_{i=0}^{k} a_i u_i$, обращающийся в 0 в $k+1$ точках. Не умаляя общности будем считать, что все $a_i \neq 0$. Тогда

$$f_0(t) = a_0 u_0(t) \left(1 + \frac{a_1}{a_0}\frac{u_1(t)}{u_0(t)} + \dots \frac{a_k}{a_0}\frac{u_k(t)}{u_0(t)}\right)$$

По условию, $u_0(t) > 0$, а значит вторая скобка обращатся в 0 в $k+1$ точках. Вспоминаем теорему Ролля — между двумя корнями непрерывной функции есть корень ее производной. Отсюда следует, что функция $f_1(t) = \left(1 + \frac{a_1}{a_0}\frac{u_1(t)}{u_0(t)} + \dots \frac{a_k}{a_0}\frac{u_k(t)}{u_0(t)}\right)'$ — обращется в ноль в k точках. Заметим, что количество слагаемых уменьшилось на 1. Итерируя процесс, получим последовательность функций $f_0(t), f_1(t), \dots, f_k(t)$. В $f_i(t)$ будет $k-i+1$ ненулевых слагаемых и $k-i$ нулей. Таким образом, $f_k(t) = \alpha F_{kk}$, где α — некоторое ненулевое число, имеет хотя бы один ноль. Противоречие, т.к. по предположению $F_{kk}(t) > 0$ □

4.1. Пример: Экспоненциальная регрессия

Пусть $\eta(t,\theta) = \sum\limits_{i=1}^{k} b_i e^{\lambda_i t}$, $b_i \in \mathbb{R}$, $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $\lambda_i \neq \lambda_j$ $i \neq j$. В данной модели параметрами являются b_i и λ_i. Рассмотрим систему функций $\left\{\frac{\partial\eta(t,\theta)}{\partial\lambda_i}, \frac{\partial\eta(t,\theta)}{\partial b_i}\right\}_{i=1}^{k}$. Оказывается, данная система является системой Чебышева. Для доказательства достаточно повторить рассуждение, легшее в основу доказательства прошлой теоремы (4) и воспользоваться тем, что $e^{\lambda t} > 0 \forall \lambda \in R$.

4.2. Пример: модель Михаэлина-Менте

[14] $\eta(t,\theta) = \frac{at}{t+b}$ на $[a,b]$, $a > 0$. Производные $\left\{\frac{\partial\theta}{\theta_i}\right\}$ также образуют систему Чебышева. Действительно,

$$\frac{\partial\eta}{a} = u_0(t) = \frac{t}{t+b}$$

$$\frac{\partial\eta}{b} = u_1(t) = \frac{-at}{(t+b)^2}$$

Пусть имеется $u(t) = \alpha_0 u_0(t) - \alpha_1 u_1(t)$. Вынесем $-u_1(t)$ за скобку и получим

$$u(t) = \frac{at}{(t+b)^2}\left(\alpha_0(t+b) + \alpha_1\right)$$

Вспомним, что $a > 0$, а значит $t > 0$ и $\frac{at}{(t+b)^2} > 0$. Второе слагаемое — линейная функция, про которую мы и без дифференцирования знаем, что у нее имеется не более одного нуля.

5. Расширенные системы Чебышева

Основная цель данного вопроса — расширить определение систем Чебышева, таким образом, чтобы с помощью них можно было бы выразить некоторые простые условия, на входящие в эту систему функции.

Запишем на языке чебышевских систем простое условие строгого возрастания функции. Пусть задана система из двух функций: $u_0(t) = 1$, $u_1(t)$ для $t \in [a,b]$. Условием того, что эта система будет чебышевской является следующее условие на определитель:

[14] я наверно не правильно распарсил имена, надо поправить

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ u_1(t_0) & u_1(t_1) \end{vmatrix} > 0,$$

для $a \leqslant t_0 < t_1 \leqslant b$.

Условие строго возрастания естественно ослабляется до нестрогой монотонности. С другой стороны, условие строгого возрастания естественно усиливается существованием строго возрастающей производной. Запишем эти два условия с точки зрения определителей. Условие нестрого возрастания:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ u_1(t_0) & u_1(t_1) \end{vmatrix} \geqslant 0, \tag{6}$$

для $a \leqslant t_1 < t_2 \leqslant b$.

Условие строгой монотонности производной записывается следующим образом:

$$\begin{vmatrix} 1 & u_0'(t) \\ u_1(t) & u_1'(t) \end{vmatrix} = u_1'(t) > 0, \tag{7}$$

для $a \leqslant t \leqslant b$.

Перейдем к обобщению понятия системы Чебышева на произвольное количество функций так, чтобы оно описывало условие нестрогой монотонности функции и строгой монотонности производной.

Ясно, что (6) обобщается на произвольное количество функций:

Определение. *Система вещественных, непрерывных функций $\{u_i\}_{i=1}^n$, заданных на отрезке $[a, b]$, называется слабой системой Чебышева, если определители*

$$U\begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & n \\ t_0 & t_1 & \dots & t_n \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} u_0(t_0) & \dots & u_0(t_n) \\ u_1(t_0) & \dots & u_1(t_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_0) & \dots & u_n(t_n) \end{pmatrix} \geqslant 0$$

для $a \leqslant t_0 < t_1 < \dots < t_n \leqslant b$.

Посмотрим теперь на второе условие (7). Заметим, что это условие отличается от обычного определения системы Чебышева тем, что в нем допускается "совпадение точек" $t_i = t$. Точнее говоря, определители в 3 (и в 5) считаются в строго различных точках: $\{t_i\}_{i=0}^n$: $a \leqslant t_0 < t_1 < \dots < t_n \leqslant b$, а в (7) определитель вычисляется в некоторой заданной точке $t \in [a, b]$. Таким образом, необходимо сконструировать такое обобщение стандартного определения 3, которое бы допускало равенство точек $\{t_i\}_{i=0}^n$.

В книге Карлина и Штаддена на страницах 16-18 приводится более общее изложение данного материала, я постарался сделать более элементарное.

Начнем с некоторого интуитивного понимания идеи. Для начала будем считать, что функции $\{u_i\}_{i=0}^n$ достаточное число раз дифференцируемы на интервале (a, b). Рассмотрим некоторый набор точек $\{t_i\}_{i=0}^n$ таких, что $t_0 \leqslant t_1 \leqslant \dots \leqslant t_n$. Пусть теперь $t = t_i = t_{i+1} = \dots =$

$t_{i+q} \notin \{a, b\}$[15], где $0 \leqslant i < i + q \leqslant n$. Рассмотрим (в данный момент равный 0[16]) определитель:

$$\det \begin{pmatrix} u_0(t_0) & \dots & u_0(t_n) \\ u_1(t_0) & \dots & u_1(t_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_0) & \dots & u_n(t_n) \end{pmatrix} =$$

$$\det \begin{pmatrix} u_0(t_0) & \dots & u_0(t_i) & u_0(t_{i+1}) & \dots & u_0(t_{i+q}) & u_0(t_{i+q+1}) & \dots & u_0(t_n) \\ u_1(t_0) & \dots & u_1(t_i) & u_1(t_{i+1}) & \dots & u_1(t_{i+q}) & u_1(t_{i+q+1}) & \dots & u_1(t_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_0) & \dots & u_n(t_i) & u_n(t_{i+1}) & \dots & u_n(t_{i+q}) & u_n(t_{i+q+1}) & \dots & u_n(t_n) \end{pmatrix}$$

Заменим столбцы с $i + 1$ до $i + q$ следующим образом:

$$\det \begin{pmatrix} u_0(t_0) & \dots & u_0(t) & u_0'(t) & \dots & u_0^{(q)}(t) & u_0(t_{i+q+1}) & \dots & u_0(t_n) \\ u_1(t_0) & \dots & u_1(t) & u_1'(t) & \dots & u_1^{(q)}(t) & u_1(t_{i+q+1}) & \dots & u_1(t_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_0) & \dots & u_n(t) & u_n'(t) & \dots & u_n^{(q)}(t) & u_n(t_{i+q+1}) & \dots & u_n(t_n) \end{pmatrix}$$

Теперь должна быть понятна идея обобщения! Заменяем столбцы, с совпадающими точками на столбцы от соответствующих производных функций.

Перейдем теперь к строгому описанию. Пусть функции $\{u_i\}_{i=0}^n$, заданные на отрезке $[a, b]$, непрерывно дифференцируемы p раз на интервале (a, b). Рассмотрим набор точек $t_0 \leqslant t_1 \leqslant \ldots \leqslant t_n \in [a, b]$ такой, что

$$t_0 = \ldots = t_{k_0} < t_{k_0+1} = \ldots = t_{k_1} < t_{k_1+1} = \ldots = t_{k_2} < \ldots < t_{k_{\ell-1}+1} = \ldots = t_{k_\ell} = t_n,$$

где $0 \leqslant \ell \leqslant n$[17] и $0 \leqslant k_0 < k_1 < \ldots < k_\ell \leqslant n$[18].

При этом дополнительно[19]

1. $k_{i+1} - k_i \leqslant p - 1$ для всех i;
2. если $t_{k_0} = a$, то $k_0 = 0$;
3. если $t_{k_\ell} = b$, то $k_{\ell-1} = n - 1$.

Рассмотрим определитель

$$U^\star \begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & n \\ t_0 & t_1 & \dots & t_n \end{pmatrix} = \tag{8}$$

$$\det \begin{pmatrix} u_0(t_{k_0}) & u_0'(t_{k_0}) & \dots & u_0^{(k_0)}(t_{k_0}) & u_0(t_{k_1}) & u_0'(t_{k_1}) & \dots & u_0^{(k_1-k_0)}(t_{k_1}) & \dots & u_0(t_{k_\ell}) & \dots & u_0^{(k_\ell-k_{\ell-1})}(t_{k_\ell}) \\ u_1(t_{k_0}) & u_1'(t_{k_0}) & \dots & u_1^{(k_0)}(t_{k_0}) & u_1(t_{k_1}) & u_1'(t_{k_1}) & \dots & u_1^{(k_1-k_0)}(t_{k_1}) & \dots & u_1(t_{k_\ell}) & \dots & u_1^{(k_\ell-k_{\ell-1})}(t_{k_\ell}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_{k_0}) & u_n'(t_{k_0}) & \dots & u_n^{(k_0)}(t_{k_0}) & u_n(t_{k_1}) & u_n'(t_{k_1}) & \dots & u_n^{(k_1-k_0)}(t_{k_1}) & \dots & u_n(t_{k_\ell}) & \dots & u_n^{(k_\ell-k_{\ell-1})}(t_{k_\ell}) \end{pmatrix}$$

А что будет, если все точки $\{t_i\}_{i=0}^n$ равны и $n = p$? Как называется такой определитель?

Определение. *(Конструктивное) Система непрерывных функций $\{u_i\}_{i=0}^n$, заданных на отрезке $[a, b]$, называется расширенной системой функций Чебышева порядка p, если функции $\{u_i\}_{i=0}^n$ непрерывно дифференцируемы $p - 1$ раз и по всем наборам точек $\{t_i\}_{i=0}^n$, удовлетворяющим условиями сформулированным выше*

$$U^\star \begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & n \\ t_0 & t_1 & \dots & t_n \end{pmatrix} > 0. \tag{9}$$

[15]Это чисто формальное условие. Зачем оно нужно?

[16]Почему?

[17]Чему соответствуют крайние случаи?

[18]Можно ли здесь допустить нестрогое неравенство?

[19]Все три условия являются формальными. Тем не менее убедитесь, что понимаете, откуда они берутся.

Если в Определении 8 взять $p = n + 1$, то такую систему функций $\{u_i\}_{i=0}^n$ обычно называют расширенной системой Чебышева.

Как можно догадаться, есть и эквивалентное аксиоматическое определение расширенной Чебышевской системы.

Определение. *(Аксиоматическое) Система непрерывных функций $\{u_i\}_{i=0}^n$, заданных на отрезке $[a, b]$, называется расширенной системой функций Чебышева порядка p, если функции $\{u_i\}_{i=0}^n$ непрерывно дифференцируемы $p - 1$ раз и произвольный обобщенный многочлен, построенный по системе $\{u_i\}_{i=0}^n$, имеет не более n нулей с учетом кратности.*

Как и для обычных систем Чебышева нетрудно провести доказательство эквивалентности этих определений. Проводится это точно так же, как и в Вопросе 3. [20]

Тут еще идет кусок про теорему Элвинга, но я там ничего не понял. Видимо это и есть суть применения этого билета. Надо спросить В.Б. о том, что сюда еще нужно написать.

6. Неотрицательные многочлены с заданными нулями

6.1. Теорема о числе нулей

Определение. *Пусть u — некоторая функция (непрерывная) на $[a,b]$. Тогда $Z(u)$ — число нулей u на $[a,b]$.*

Определение. *Ноль называется узловым, если*

- *Он совпадает с граничной точкой (либо a, либо b)*
- *Функция меняет знак, проходя через этот ноль*

В противном случае ноль называется неузловым.

Определение. *$\overline{Z(u)}$ — число нулей функции u, где неузловые нули засчитываются дважды.*

Теорема. *Если система функций $\left\{u_i\right\}_{i=0}^n$ - Чебышевская на $[a,b]$, то для любого нетривиального многочлена $\overline{Z}(u) \le n$.*

Доказательство. Пусть $\bar{(Z)}(u) \ge n+1$ для некоторого нетривиального u. Обозначим различные нули u через $t_1, \ldots, t_k$. Добавим для первого неузлового нуля точки $t_i - \varepsilon, t_i + \varepsilon$, а для остальных неузловых нулей точки $t_i - \varepsilon$. Выбрав ε достаточно маленьким, можно получить, что все точки будут содержаться в $[a,b]$. Пусть у нас было m_1 узловых и m_2 неузловых нулей. Тогда после проделанной операции мы получили $m_1+2m_2+1 \ge n+2$ точек $(m_1+2m_2 \ge n+1)$. Переобозначим получившиеся точки за s_i и возьмем первые $n+2$ из них. Не умаляя общности, можем считать, что $u(s_i) \ge 0$ для четных i, $u(s_i) \le 0$ для нечетных i[21]. Отсюда получаем, что следующий определитель равен 0 (т.к. первая стручка — линейная комбинация следующих):

$$\begin{vmatrix} u(s_0) & u(s_1) & \ldots & u(s_{n+1}) \\ u_0(s_0) & u_0(s_1) & \ldots & u_0(s_{n+1}) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ u_n(s_0) & u_n(s_1) & \ldots & u_n(s_{n+1}) \end{vmatrix} = 0 \tag{10}$$

[20] Поручить кому-то набрать это аккуратно.

[21] Проверьте это. Достаточно нарисовать рисунок и все станет ясно.

Далее $\{u_i\}$ — система Чебышева, а значит

$$\begin{vmatrix} u_0(t_0) & u_0(s_1) & \dots & u_0(t_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_0) & u_n(t_1) & \dots & u_n(t_n) \end{vmatrix} > 0$$

для любых $t_0 < t_1 < \ldots < t_n$. Поэтому, разложив определитель (10) по первой сточке, получим[22], что

$$\sum_{i=0}^{n+1} \alpha_i u(s_i) = 0,$$

где α_i строго чередуются в знаке. Кроме того, $u(s_i)$ совпадают по знаку с α_i. Таким образом, суммируются неотрицательные слагаемые. Значит $\forall i\ u(s_i) = 0$. Получили противоречие с одним из определений системы Чебышева(3) □

Теорема. *Обратно, если для любого нетривиального многочлена $u(t)$ верно, что $\overline{Z}(u) \le n$, то система является Чебышевской*

Доказательство. Следует из второго определения чебышевской системы[23] 3:

$$Z(u) \le \overline{Z}(u) \le n$$

□

6.2. Неотрицательные многочлены с заданными нулями

Задача: построить неотрицательный многочлен, имеющий нули в точках $t_1 < t_2 < \ldots < t_k$. Многочлен неотрицательный, поэтому все внутренние нули должны быть неузловыми. Введем функцию ω:

$$\omega(t) = \begin{cases} \omega(a) = 1 \\ \omega(b) = 1 \\ \omega(t_i) = 2, i \in (a,b) \end{cases}$$

Теорема. *Пусть $t_1, \ldots, t_k$ — различные и такие, что $\sum\limits_{i=1}^{k} \omega(t_i) \le n$. Пусть $\{u_i\}_{i=0}^{n}$ — чебышевская. Тогда $\exists u(t)$, который обращается в ноль в этих и только этих точках, за исключением случая, когда $n = 2m$ и одна из точек совпадает с граничной точкой*[24]

В книжке было дополнительное условие, кажется без него док-во ломается...

Доказательство. Докажем для $n = 2m + 1$ и $a < t_1 < \ldots < t_k < b$[25]. Построим последовательность точек $\{s_i\}_{i=0}^{2m+1}$ следующим образом: добавим к $t_1, \ldots, t_k$ произвольные точки $t_{k+1}, \ldots, t_m$ такие, что $t_{k+1} < \ldots < t_m < b$, а затем добавим точки $t_1 + \varepsilon, t_2 + \varepsilon$ и точку a. Получим $2m + 1$ точки:

$$s_0 = a, s_1 = t_1 < s_2 = t_1 + \varepsilon < s_3 = t_2 < \ldots < s_{2m+1} = t_m + \varepsilon$$

---

[22] как мы все помним, при разложение определителя знаки перед минорами чередуются, а сами миноры у нас положительны

[23] $Z(u)$ ведь количество нулей многочлена

[24] *Исключение получается по следующей простой причине: до этого мы доказали теорему о том, что число нулей $\overline{Z} \le n$. Если $n = 2m$, и одна точка совпадает с граничной, то $k < m$ и $2k + 1 < 2m$, а значит возможна ситуация, что во второй граничной точке также будет ноль.*

[25] Остальные случаи получаются аналогично с небольшими модификациями.

Теперь рассмотрим многочлен

$$u_\varepsilon(t) = U\begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & 2m & 2m+1 \\ s_0 & s_1 & \dots & s_{2m} & t \end{pmatrix}$$ [26]

Заметим, что по свойству определителя $u_\varepsilon(t)$ обращется в ноль в точках $s_0, s_1, \dots, s_{2m}$. Кроме того, $\{u_i\}$ — система Чебышева, поэтому других нулей быть не может, а также каждый нуль является узловым (из теоремы (6.1)). Теперь, если $t > s_{2m+1}$, то из первого определения системы Чебышева (3) следует, что $u_\varepsilon(t) > 0$. Следовательно $U_\varepsilon(t)$ на промежутках $[t_i, t_i + \varepsilon]$ будет меньше нуля, а на оставшихся — больше. Раскроем определитель по последнему столбцу и получим:

$$u_\varepsilon(t) = \sum_{i=0}^{2m} a_i(\varepsilon) u_i(t)$$

Можно считать, что $\sum a_i^2 = 1$ (если не так – нормируем). Тогда определим предельный многочлен $\overline{u}(t) = \lim\limits_{\varepsilon\to 0} u_\varepsilon(t)$. Теперь, у предельного многочлена нули в точках $t_1, \dots, t_k$ стали узловыми, а значит данные точки являются всеми возможными нулями данного многочлена (опять же, по теореме (6.1)). Полученный многочлен имеет «лишний» ноль — в точке a. Чтобы от него избавиться, повторим построение, взяв вместо точку b вместо точки a и получим $\tilde{u}(t)$. Тогда решением нашей задачи будет многочлен $u(t) = \overline{u}(t) + \tilde{u}(t)$ □

7. Теорема о числе опорных точек локально-оптимальных планов для Чебышевских систем

Пусть у нас есть некоторая система Чебышева $\{u_i(t)\}_{i=0}^{p}$ на отрезке $[a,b]$. Рассмотрим множество всех возможных (непрерывных) планов Ξ, определенной следующим образом[27]:

$$\Xi_k = \left\{ \begin{pmatrix} t_1 & \dots & t_k \\ \nu_1 & \dots & \nu_k \end{pmatrix} \right\} \tag{11}$$

$$\Xi = \bigcup \Xi_k \tag{12}$$

Вспоминаем, что информационная матрица плана выглядит следующим образом:

$$M(\xi) = \int f(t) f(t)^{\mathrm{T}} d\xi(t), \text{ где } \xi \in \Xi.$$

При этом f — это частные производные функции $\eta(t, \theta)$ по θ. Достаточно часто эти производные образуют систему Чебышева, а это сильно упрощает жизнь и позволяет получать различные хорошие аналитические результаты. Собственно матрица $M(\xi)$ является вектором в $\mathbb{R}^{\frac{m(m+1)}{2}}$, а ее элементы имеют вид:

$$M_{ij} = \int u_{ij}(t) d\xi(t), \xi \in \Xi.$$

Существует такое n, что любую $M(\xi)$ можно представать, как

$$M(\xi) = \int u d\xi(t), \xi \in \bigcup_{i=1}^{n} \Xi_i, \text{ где } u = (u_0, \dots, u_p)$$

Докажем этот факт.

---

[26]Здесь написан определитель матрицы (смотри определение (3))

[27]При изучении Чебышевских систем мы предполагаем, что регрессия зависит только от одного признака, поэтому вместо x мы будем обозначать его за t

Определение. *Моментным пространством $\mathcal{M}_{p+1}$ по отношению к $\{u_i\}_{i=0}^p$ называется множество*

$$\mathcal{M}_{p+1} = \{\lambda c, c = (c_0, \dots, c_p) \in \mathbb{R}^{p+1}, \lambda \in \mathbb{R}_+ \mid c_i = \int u_i(t) d\xi(t), \xi \in \Xi\}$$

Сечение этого конуса $\lambda = 1$ — это в точности всевозможные информационные матрицы планов.

Докажем, что любой элемент $\mathcal{M}$ представим как выпуклая комбинация из $p + 2$ точек кривой C_{p+1}

$$_{p+1} = \{\gamma_t = (u_0(t), \dots, u_p(t)) \mid a \le t \le b\}.$$

Для этого нам нужно еще несколько обозначений.

Пусть C — наименьший выпуклый конус, содержащий кривую C_{p+1}. Рассмотрим множество Γ:

$$\Gamma = \{\gamma = (\gamma_0, \dots, \gamma_p), \gamma_i = \sum_{j=0}^{p+2} \lambda_j u_i(t_j)\}, \text{ где}$$

$$\lambda_j \ge 0, a \le t_j \le b$$

Это множество совпадает с C. То, что $\Gamma \subset C$ очевидно. Обратное утверждение следует из следующей теоремы:

Теорема (Каратеодори). *Пусть $\mathcal{V} \subset R^k$ — ограниченное замкнутое множество. Тогда любой элемент его выпуклой оболочки может быть представлен в виде линейной комбинации не более, чем $k + 1$ элементов этого множества.*

Докажем теперь, что $C = \mathcal{M}_{p+1}$. По построению ясно, что $C \subset \mathcal{M}_{p+1}$. Пусть теперь некоторый $\tilde{c} \in \mathcal{M}_{p+1}$, но $\tilde{c} \notin C$. C является выпуклым замкнутым[28] конусом, поэтому по теоремам отделимости существует гиперплоскость, строго отделяющая $\tilde{c}$ от C, т.е. существует такой вектор a и $d \in \mathbb{R}$, что

$$\sum a_i \tilde{c}_i + d < 0 \tag{13}$$

$$\sum a_i \gamma_i + d \ge 0 \forall j \in C \tag{14}$$

Из того, что γ_i можно брать любым будет верно, что

$$\sum a_i \lambda u_i(t) + d \ge 0 \forall t \in [a,b] \tag{15}$$

Из последнего неравенства следует, что $d \ge 0$, иначе при $\lambda = 0$ неравенство будет неверным. Теперь рассмотрим σ, задающий $\tilde{c}$ (т.е. $\tilde{c} = \int u(t) d\sigma(t)$). Пусть $\lambda = \int d\sigma(t) > 0$. Тогда с одной стороны

$$\sum a_i \tilde{c}_i + d = \int \sum a_i u_i d\sigma(t) + d < 0$$

С другой, проинтегрировав (15) и поделив на λ мы получим противоречие.

Теперь докажем теорему, которая, видимо, и имелась в виду в билете.

Определение. *Индексом точки $c \in \mathcal{M}_{p+1}$ называется такое минимальное k, что c представима в виде выпуклой комбинации элементов $_{p+1}$:*

$$c = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i u(t_i) \tag{16}$$

При этом точки a и b считаются за половину, а точки из (a,b) за единицу.

[28]Это вообще-то как-то не очевидно, а мы не доказывали. В книге Карлина используются неизвестные мне теоремы для док-ва...

Теорема. *$\tilde{c} \in \mathcal{M}_{p+1}$ является граничной точкой тогда и только тогда, когда $I(\tilde{c}) < \frac{p+1}{2}$. Кроме того, граничная точка $\tilde{c}$ допускает единственное представление*

$$\tilde{c} = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i u(t_i), \text{ где } k \le \frac{p+2}{2}, \lambda_i > 0$$

Я так и не понял, зачем мы рассматриваем конус (разве что из-за того, что так написано в книжке про чебышевские системы.) Теоремы отделимости работают и для выпуклых множеств, теорема Каратеодори сформулирована для выпуклой оболочки. Информационные матрицы для планов экспериментов также используют вероятностную меру. И вообще не уверен, что написанный текст соответствует вопросу...

8. Экспоненциальные модели с двумя параметрами. Построение локально-оптимальных планов

Кусок про экспоненциальные модели есть в сборнике (Пененко и т.д.), но несколько с тем форматом, что был у нас на лекциях

На протяжении нескольких следующих вопросов мы будем изучать экспоненциальную модель с двумя параметрами. Пусть $y = \eta(x, \theta) + \varepsilon$, где

$$\eta(x,\theta) = \sum_{i=1}^{k} a_i e^{0\lambda_i x}, x \in \mathbb{R}_+, k \in \mathbb{N}$$

$$M(\xi) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) f(x_i)^{\mathrm{T}}$$

$$\xi_{opt} = \arg\max_{\xi} \det M(\xi)$$

Заметим, что в локально-оптимальном плане должно быть по крайнем мере $2k$ точек (иначе ранг матрицы будет меньше $2k$ и определитель будет нулем).

Как мы покажем позже, функции f образуют систему Чебышева, поэтому есть и верхняя граница на количество точек в оптимальном плане — $\frac{2k(2k+1)}{2} + 1$ (Кажется, для систем Чебышева верхняя граница на самом деле $[\frac{2k(2k+1)/2+1}{2}]$, но мы это внятно не доказали. Мы получили теорему про $I(c)$, которая дает верхнюю границу для граничных точек (по модулю того, что у нас был конус, а нужно его сечение, но с этим можно бороться). Определитель матрицы будет гармонической функцией[29], поэтому максимум у него на границе (вспоминаем матфизику), так что для D-оптимальных планов нам доказывать что-то про внутренность действительно не надо)

Для поиска локальных D-оптимальных планов мы будем пользоваться теоремой эквивалентности[30]:

Теорема. *Пусть M — информационная матрица для параметра $\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^m$. Пусть $d(x,\theta) = f(x)^{\mathrm{T}} M^{-1} f(x) = D(f(x)^{\mathrm{T}}\hat{\theta})$*[31]

Эквивалентно:

- *ξ^* — D-оптимальный план (у нас локально)*

---

[29]там всякие попарные произведения, они после оператора лапласса умрут

[30]Мы ее формулировали до этого, но пусть будет еще раз

[31]$D(f(x)^{\mathrm{T}}\hat{\theta}) = E(f^{\mathrm{T}}\hat{\theta} - f^{\mathrm{T}}\theta)^2 = f^{\mathrm{T}} E(\hat{\theta} - \theta)(\hat{\theta} - \theta)^{\mathrm{T}} f = f^{\mathrm{T}} D_{\hat{\theta}} f = c f^{\mathrm{T}} M^{-1} f,\ D_{\hat{\theta}} = \frac{\sigma^2}{n} M^{-1}$

- ξ^* — *G-оптимальный план* $\xi^* = \arg\min_\xi \max x d(x,\theta,\xi)$ *(минимизирует максимальную дисперсию предсказаний)*

- $\max\limits_x d(x,\xi^*) = m$

В опорных точках D-оптимального плана $d(x,\xi^*$ принимает свое максимальное значение

Нам будут интересны специальные типы планов:

Определение. *План, число точек в котором совпадает с числом параметров, называется насыщенным*

Для экспоненциальных моделей в большинстве случаев оптимальные планы являются насыщенными. Для дробно-рациональной модели, которую мы будем рассматривать в дальнейшем, все локально D-оптимальные планы будут насыщенными. Отметим важный факт о насыщенных планах:

Теорема. *Для насыщенных D-оптимальных планов все весовые коэффициенты одинаковы.*

Доказательство.

$$M(\xi) = \sum_{i=1}^{m} w_i f(x_i) f(x_i)^{\mathrm{T}} = FWF^{\mathrm{T}}$$

$$\det M(\xi) = \prod_{i=1}^{m} w_i \det FF^{\mathrm{T}}$$

Видно, что w_i и F можно максимизировать по отдельности. Берем логарифм, вспоминаем правило множителей Лагранжа и получаем, что $w_i = \frac{1}{m}$[32]. □

Замечание. *Утверждается, что такой план еще и единственный, но откуда это берется не ясно.*

Теперь отметим еще один полезный факт, связанный с экспоненциальной регрессией:

$$\det(M(\xi, a, \lambda)) = C(a) \det \widetilde{M(\xi, \lambda)}$$

Таким образом, оптимальный план не зависит от вектора a и можно при поиске плана считать, что $a_i = 1$[33]

Для экспоненциальных систем производные будут образовывать систему Чебышева. Производные (с точностью до знака):

$$f_i(x) = e^{-\lambda_i x}, f_{2i} = xe^{-\lambda_i x}$$

Из них получаем множество функций $\{e^{-2\lambda_i x}, e^{-(\lambda_i+\lambda_j)x}, xe^{-(\lambda_i+\lambda_j)x}, x^2 e^{-2\lambda_i x}\}$

Этот факт мы доказывали в 4 вопросе.

Перейдем к построению локально-оптимальных планов. Начнем с $k = 1$. Тогда

$$\eta(x,\theta) = e^{-\lambda_1 x}$$

$$f_1 = e^{-\lambda_1 x}$$

$$f_2 = -xe^{-\lambda_1 x}$$

---

[32]можно и через неравенства между средним геометрическим и средним арифметическим доказать

[33]Но нельзя считать, что у нас k параметров, у нас их все равно $2k$, просто при максимизации мы можем считать $a_i = 1$, т.к. они на выбор точек плана не влияют.

Теорема. *При $k = 1$ существует единственный D-оптимальный план*

$$\xi = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\lambda_1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Доказательство. По теорем эквивалентности $d(x, \xi) \le 2$.

$$F^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_1(x_2) \\ f_2(x_1) & f_2(x_2) \end{pmatrix}$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\xi = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\lambda_1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

тут надо дописать n простых строчек по обращению матрицы и вычислению d. У d получим, что при $x = 0$ достигается 2, значит 0 — точка плана по теореме эквивалентности. Вторую точку можно будет найти, продифференцировав определитель.

□

Теорема. *При $k = 2$ существует единственный D-оптимальный план. Кроме того, этот план будет насыщенным.*

Доказательство. TODO: Тут еще больше вычислений и начинают использоваться системы Чебышева □

9. Теорема о числе точек локально-оптимальном плане

Для $k = 1{,}2$ мы явно построили локально-оптимальные планы. Для $k \ge 3$ верна следующая теорема[34]:

Теорема. *При $k \ge 3$ с число точек в оптимальном плане не превосходит $\frac{k(k+1)}{2} + 1$.*

Доказательство. Кажется это следствие теоремы Каратеодори и не отличается от 7 вопроса.

□

10. Основное уравнение функционального подхода. Теорема о неявной функции

Начнем с теоремы о неявной функции.

Теорема. *Пусть задана функция $q(\tau, z) : \mathbb{R}^{s+k} \to \mathbb{R}$ и пусть q — непрерывно-дифференцируема в окрестности $U \subset \mathbb{R}^{s+k}$. Пусть в точке (τ^0, z^0) выполнено:*

1. $q(\tau^0, z^0) = 0$
2. $\det J \ne 0$, *где* $J = \frac{\partial q}{\partial z_i}\Big|_{(\tau^0, z^0)}$

[34] Мы же вроде получили, что для чебышевских систем мы получили, что точек в предельном плане будет $\le \frac{p+1}{2}$, где p — количество функций в чебышевской системе. Почему тут такой слабый результат.

Тогда в некоторой окрестности $W \subset U$ q задает неявную функцию, т.е. существует и единственна такая $\tau = \tau(z)$, что $q(\tau, z) = 0 \Leftrightarrow \tau = \tau(z)$.

Более того, если q — вещественно-аналитическая[35]*, то и $\tau(z)$ также будет вещественно-аналитической функцией*[36]*.*

Эти теорема нам интересно для решения следующей задачи. Как обычно, хочется найти такой план ξ, что $M(\xi, \theta)$ будет в некотором смысле большой матрицей. Мы под «большой» в данном разделе будем понимать D-оптимальной:

$$\xi = \arg\max_{\xi} \det M(\xi, \theta) \tag{17}$$

Не умаляя общности будем считать, что все параметры у нас входят нелинейно[37]. Кроме того, введем еще несколько упрощений:

1. Пусть мы ищем насыщенные план (т.е. количество точке в нем совпадает с кол-вом параметров, а значит у них у всех веса одинаковы). Тогда план задается с помощью m элементов $x_1, \dots, x_m$ множества $\mathbb{X}$.

2. Будем считать, что $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^k$ и любой оптимальный план является внутренней точкой $\mathbb{X}$ (хотим написать достаточное условие минимума).

Тогда для решение задачи (17) при фиксированом θ можно взять производные и приравнять их к нулю[38]

$$g_i(\xi, \theta) = \frac{\partial}{\partial \xi_i} \det M(\xi, \theta) = 0 \tag{18}$$

Получаем уравнение:

$$g(\xi, \theta) = 0$$

решениями которого являются $\xi = \xi(\theta)$ — локально D-оптимальные планы. Это уравнение будем называть основным уравнением функционального подхода. Если же сделанные нами предположения не верны, то для получения основного уравнения требуется Если не делать предположений о том, что решения — внутренние точки и планы насыщенные, то для получения основного уравнения требуется использовать множители Лагранжа[39]

11. Теорем о единственности насыщенных локально D-оптимальных планов для экспоненциальных моделей

Будем, как и раньше, считать, что $\lambda_1 > \lambda_2 > \ldots > \lambda_k$, $x_1 < x_2 < \ldots < x_{2k}$.

Теорема. *Оптимальная план-функция*[40] *существует и определена единственным образом. Первая точка плана x_1 находится в нуле, поэтому ее можно рассматривать как функцию $\tau\lambda : S \to [0, \infty)^{2k-1}$. Кроме того, координатные функции являются аналитическими и строго убывают по каждому λ_j. План $\tau(\lambda)$ является насыщенным D-оптимальным при любом фиксированном $\lambda : \lambda_1 > \lambda_2 \ldots > \lambda_k$.*

---

[35] *т.е. в окрестности любой точки расскладывается в ряд Тейлора (сходящийся)*

[36] *Если быть более точным, то гладкость $\tau(z)$ совпадает с гладкостью q*

[37] Можно показать, что определитель не зависит от линейно-входящих параметров (смотри пособие)

[38] Получим необходимое условие максимума. Хорошо бы еще проверить, что якобиан будет отрицательно-определен, да и производные мы можем брать, но кого это волнует...

[39] а если быть еще более точным, то теорему Куна-Такера https://en.wikipedia.org/wiki/Karush-Kuhn-Tucker_conditions

[40] *смотри вопрос про основное функциональное уравнение*

12. Дробно-рациональные модели

TODO: Разбить на вопросы и дописать

13. Простейшие дробно-рациональные модели

Рассмотрим дробно-рациональные модели:

$$\eta(x,\theta) = \frac{P(x)}{Q(x)} = \frac{\sum\limits_{i=0}^{d_2} p_i x^i}{\sum\limits_{i=0}^{d_1-1} q_i x^i + x^{d_1}} \tag{19}$$

Параметр $\theta = (p_0, \ldots, p_{d_2}, q_0, \ldots, q_{d_1-1} \subset \Theta$.
Для корректности этой модели нам требуется ввести несколько ограничений:

1. При всех $\theta \in \Theta$ дробь (19) не сократима.
2. Знаменатель дроби не обращается в ноль на множестве значений x. Будем считать, что $x \in [0,d]$.
3. $d_2 \geq d_1 - 1$

Приведем несколько примеров:

Пример.

$$\begin{aligned} \eta(x,\theta) &= \frac{\theta_1}{x+\theta_2} = \frac{a}{x+b} \\ f_1(x) &= \frac{\partial}{\partial a}\eta(x,\theta) = \frac{1}{x+b} \\ f_2(x) &= \frac{\partial}{\partial b}\eta(x,\theta) = -\frac{a}{(x+b)^2} \sim \frac{1}{(x+b)^2} \end{aligned} \tag{20}$$

Предположим, что число точек в плане совпадает с числом параметров ($n = m$). Значит все веса одинаковы и нам достаточно искать точки x_1 и x_2 такие, что $\det M(\xi)^2$ *будет максимален.*

$$\det\begin{pmatrix} \frac{1}{x_1+b} & \frac{1}{(x_1+b)^2} \\ \frac{1}{x_2+b} & \frac{1}{(x_2+b)^2} \end{pmatrix} = \frac{1}{(x_1+b)^2}\frac{1}{(x_2+b)^2}\begin{pmatrix} x_1+b & 1 \\ x_2+b & 1 \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$\det \ldots \sim \frac{x_2 - x_1}{(x_1+b)^2(x_2+b)^2}\ (x_1 > x_2)$$

$\sim$ в последнем равенстве означает, что нам достаточно максимизировать данное выражение (мы предполагаем, что $x_1 < x_2$). Пусть $x_1 \neq 0$. Тогда сдвинув на x_1 x_2 и x_1 числитель не поменяется, а знаменатель уменьшится. Значит $x_1 = 0$. Остается решить тривиальную задачу одномерной максимизации[41] и получить, что $x_2 = b$. Отлично, оптимальный план найден.

[41] *надеюсь все с этим могут справиться. Можно чуть упростить жизнь, взяв логарифмы.*

Пример. *Приведем еще один пример — модель Михаэлиса-Ментена. Правда эта модель не входит в класс дробно-рациональных.*

$$\begin{aligned} \eta(x) &= \frac{\theta_1 x}{x+\theta_2} = \frac{ax}{x+b} \\ f_1(x) &= \frac{\partial}{\partial a}\eta = \frac{x}{x+b} \\ f_2(x) &= \frac{\partial}{\partial b}\eta \sim \frac{x}{(x+b)^2} \end{aligned} \tag{22}$$

Опять интересуемся максимизацией определителя[42]*:*

$$\det F = \begin{pmatrix} \frac{x_1}{x_1+b} & \frac{x_1}{(x_1+b)^2} \\ \frac{x_2}{x_2+b} & \frac{x_2}{(x_2+b)^2} \end{pmatrix} \tag{23}$$

$$\det \ldots = \frac{x_1 x_2}{(x_1+b)^2(x_2+b)^2} \begin{pmatrix} x_1+b & 1 \\ x_2+b & 1 \end{pmatrix} \tag{24}$$

$$\det \ldots = \frac{(x_2-x_1)x_1 x_2}{(x_1+b)^2(x_2+b)^2} \tag{25}$$

Берем производную по x_2, получаем, что $x_2 = d$ (по x_2 функция будет возрастать). Теперь ищем максимум:

$$\frac{(d-x_1)x_1 d}{(x_1+b)^2(d+b)^2} \tag{26}$$

Решение:

$$x = \frac{bd}{2b+d}$$

14. Вид определителя информационной матрицы

$$f_i(x) = \frac{x^{i-1}}{Q(x)}, i = 1 \ldots d_2 \tag{27}$$

$$f_j(x) = \frac{x^{i-1}}{Q(x)^2} P(x), j = 1 \ldots (d_1 - 1) \tag{28}$$

Пусть $F = (f_1, \ldots, f_{2k})^{\mathrm{T}}$. Тогда

Теорема.

$$\det F = \frac{\prod\limits_{i,j}(x_j - x_i)}{\prod\limits_i Q^2(x_i)} \tag{29}$$

Доказательство. Умножаем i-ую строчку на $Q^2(x_i)$. После этого медитируем над матрицей и видим, что через второй блок столбцов можно будет убрать $Q(x_i)$ в первом блоке и получить определитель Вандермонда[43] □

Дальше есть более подробный факт для частного случая.

[42] *возможно с точностью до знака*

[43] может быть придется долго медитировать :)

15. Алгебраический подход

16. Явное нахождение локально-оптимальных планов для дробно-рациональных моделей в виде суммы двух простейших моделей

Разбить на 2 билета, если получится

Теперь мы несколько упростим себе задачу. Пусть $\eta(x,\theta)$ имеет специальный вид:

$$\eta(x,\theta) = \sum_{i=1}^{k} \frac{\theta_{2i-1}}{x+\theta_{2i}}, \, x \in [c,d] \tag{30}$$

При этом выполнено $c < \theta_{2i}, i = 1 \ldots k$. Не умаляя общности, после перепарамметризации можем считать, что $c = 0$. Для этой модели мы хотим построить локально D-оптимальные планы.

Как мы уже выясняли, D-оптимальные планы не зависят от линейно-входящих параметров, поэтому их можно после линеаризации брать какими угодно. Мы выберем их равными -1 (чтобы дроби были положительны). Теперь как и до этого положим:

$$f_{2i-1}(x) = \frac{\partial \eta(x,\theta)}{\partial \theta_{2i-1}} = \frac{1}{x+\theta_{2i-1}}, i = 1 \ldots k$$
$$f_{2i}(x) = \frac{\partial \eta(x,\theta)}{\partial \theta_{2i}} = \frac{1}{(x+\theta_{2i})^2}, i = 1 \ldots k$$

В введенных обозначения справедлива следующая теорема:

Теорема. *Для модели (30) при $k = 2$ на интервале $[0,d]$ любой локально D-оптимальный план имеет четыре опорные точки и одинаковые весовые коэффициенты. Для любых фиксированных $\theta_1 \ldots \theta_{2k}$ такой план определяется единственным образом. Кроме того, для достаточно больших интервалов, а именно при*

$$d \geq \frac{\sqrt{\theta_2\theta_4}}{2}\left(-\frac{\lambda}{2} - 1 + \sqrt{(\lambda/2+1)^2 - 4}\right),$$

где $\lambda = -(\theta_2+\theta_4+3) - \sqrt{(\theta_2+\theta_4+3)^2+24}$ опорные точки плана равны:

$$x_1 = 0, x_{2,4} = \frac{\sqrt{\theta_2\theta_4}}{2}\left(-\lambda/2 - 1 \pm \sqrt{(\lambda/2+1)^2-4}\right)$$

$$x_3 = \sqrt{\theta_2\theta_4}$$

Для доказательства данной теоремы нам потребуются промежуточные результаты. Часть из этих результатов — куски предыдущих вопросов.

Теорема. *Для дробно-рациональной модели вида (30) для любого k число опорных точек локально D-оптимального плана равно числу оцениваемых параметров модели ($2k$).*

Доказательство. Пусть

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & \ldots & x_n \\ w_1 & \ldots & w_n \end{pmatrix}$$

является локально D-оптимальным планом для модели (30). Как обычно считаем, что точки пронумерованы в порядке возрастания. Тогда по теореме эквивалентности:

$$\begin{aligned} f(x)^{\mathrm{T}} M^{-1}(\xi) f(x) \le 2k, x \in [0,d] \\ f(x_i)^{\mathrm{T}} M^{-1}(\xi) f(x_i) = 2k \end{aligned} \tag{31}$$

Обозначим $g(x) = f(x)^{\mathrm{T}} M^{-1}(\xi) f(x) Q^4(x) - 2kQ^4(x)$, где

$$Q(x) = \prod (x + \theta_{2i})$$

Ясно[44], что $g(x)$ является многочленом степени $4k$. В точках x_i, $i = 2, \ldots, 2k-1$ у этого многочлена нули второй кратности (т.к. $g(x)$ всегда одного знака по построению), а в x_1 и x_n нули хотя бы первой кратности. Далее, как не раз замечали, $n \ge 2k$, иначе $\det M(\xi) = 0$. Пусть $n \ge 2k+1$. В таком случае у $g(x)$ с учетом кратности по крайне мере $2(2k-1)+2 = 4k$ нуля. Далее если $x_n = d$ и d — нуль кратности один, то $g(d+\varepsilon) > 0$ в некоторой окрестности точки d, а при $x \Rightarrow \infty$ $g(x) \sim -2kx^{4k}$, а значит существует x_{n+1} $g(x_{n+1}) = 0$. Значит у $g(x)$ с учетом кратности не менее $4k+1$ нулей. Следовательно g тождественный ноль. Противоречие (по теореме эквивалентности Крамера-Вольда максимум достигается только на точках плана). □

Следствием теоремы (16) является то, что у оптимального плана все веса одинаковы (мы это уже выясняли) и задачи максимизации сводится к поиску максимума $(\det F)^2$.

Тут будет примерно тоже самое, что было в небольшом куске про определитель до этого. Рассмотрим матрицу $G = \{\frac{1}{x_i+b_j}\}_{i,j=1}^{2k}$.

Теорема. *Для любых вещественных* $x_1, \ldots, x_{2k}, b_1, \ldots, b_{2k}$

$$\det G = \frac{\prod\limits_{j>i}(x_j - x_i)\prod\limits_{j>i}(b_j - b_i)}{\prod\limits_{i}\prod\limits_{j}(x_i + b_j)}$$

Доказательство. Умножим i-ую строчку на $\prod\limits_{j=1}^{2k}(x_i + b_j)$.

$$\begin{aligned} G_1 = \left(\prod_{i=1}^{2k}\prod_{j=1}^{2k}(x_i + b_j)\right)\det G \\ G_1 = \det\left(\prod_{j\ne 1}(x_i - b_j), \ldots, \prod_{j\ne 2k}(x_i - b_j)\right)_{i=1}^{2k} \end{aligned} \tag{32}$$

Вычтем первый столбце из остальных и получим

$$G_1 = \det\left(\prod_{j\ne 1}(x_i - b_j), \prod_{j\ne 1,2}(x_i - b_j)(b_2 - b_1)\ldots, \prod_{j\ne 1,2k}(x_i - b_j)(b_{2k} - b_1)\right)_{i=1}^{2k}$$

вынесем $(b_j - b_1)$ из всех столбцов столбцов и повторим операцию, вычитая второй столбец из третьего и т.д. Получим:

$$G_1 = \prod_{j>i}(b_j - b_i)\det\left(\prod(j \ne 1)(x_i - b_j), \prod_{j\ne 1,2}(x_i - b_j), \ldots, 1\right)$$

[44]проверяется прямым вычислением — $f_i(x)$ является дробью вида $\frac{1}{(x+\theta)^{1 \text{ or } 2}}$

Далее у нас каждый столбец — почти x^j, но с некоторыми плохими коэффициентами. Приводим его линейными преобразованиями к стандартному:

$$G_1 - \prod_{j>i}(b_j - b_i)\det(x_i^{2k-1}, x_i^{2k-2}, \ldots, x_i, 1)$$

Получаем определитель Вандермонда, что и требовалось. □

Теперь получим формулу для определителя F.

Теорема.

$$\det F = \frac{\prod_{j>i}(\theta_{2i} - \theta_{2j})\prod_{j>i}(x_j - x_i)}{\prod_i\prod_j (x_i + \theta_{2j})^2} \tag{33}$$

Доказательство.

$$\frac{1}{(x+\theta_{2i})^2} = \lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\delta}\left(\frac{1}{x+\theta_{2i}+\delta} - \frac{1}{x+\theta_{2i}}\right)$$

$$\det F = \det\left(\frac{1}{x_i+\theta_2}, \frac{1}{(x_i\theta_2)^2}, \ldots, \frac{1}{x_i+\theta_{2k}}, \frac{1}{(x_i+\theta_{2k})^2}\right)_{i=1}^{2k}$$

$$\det F = \lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\delta^k}\det\left(\frac{1}{x_i+\theta_2}, \frac{1}{x+\theta_{2i}+\delta} - \frac{1}{x+\theta_{2i}}, \ldots\right)_{i=1}^{2k}$$

$$\det F = \lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\delta^k}\det\left(\frac{1}{x_i+b_j}\right)_{i,j=1}^{2k}$$

Складываем соседние столбцы, применяем прошлую теорему и получаем требуемое. □

16.1. Дифференцирование уравнения и его алгебраической формы

Теорема. *Пусть* $0 \le x_1 < \ldots < x_k$ *— опорные точки локально* D*-оптимального плана для модели* (30)*. Тогда* $x_1 = 0$.

Доказательство. Рассмотрим формулу (33). Если из всех x_i вычесть некоторое $\delta \in (0, x_1)$, то числитель не изменится, а знаменатель уменьшится. Значит $x_1 = 0$, т.к. мы ищем оптимальный план, а если $x_1 > 0$, то определитель можно увеличить. □

Итого, задачу поиска оптимального плана мы свели к поиску максимума следующей функции[45]:

$$\frac{\prod_{j>i}(x_j - x_i)\prod x_i}{\prod_i\prod_j (x_i + \theta_{2j})^2} \tag{34}$$

Обозначим многочлен $\prod_{i=2}^{2k}\psi(x - x_i)$ за $\psi(x)$, а коэффициенты многочлена будем обозначать за $\psi_0, \ldots, \psi_{2k-1}$:

$$\psi(x) = \sum_{i=0}^{2k-2}\psi_i x^{2k-i-1}, \psi_0 = 1$$

[45]здесь на один x_i меньше

Пусть в оптимальном плане $x_{2k} < d$[46]. По необходимому условию экстремума частные производные функции (34) обращаются в ноль на оптимальном плане:

$$\frac{1}{x_i} + \sum_{i \neq j} \frac{1}{x_j - x_i} - 2\frac{Q'(x_i)}{Q(x_i)} = 0$$

где $Q(x) = \prod(x + \theta_{2i}$

Воспользуемся следующим равенством[47]:

$$\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \frac{1}{x_i - x_j} = \frac{\psi''(x)}{\psi'(x)}|_{x=x_i}$$

Умножим предпоследнее неравенство на $\Psi'(x)xQ(x)$ и получим:

$$h(x) = \Psi''(x)xQ(x) + 2\Psi'(x)\left(Q(x) - 2xQ'(x)\right)$$

Многочлен $h(x)$ обращатся в ноль в точках $x_2 \ldots x_{2k}$. Следовательно, этот многочлен имеет вид $\psi(x)\lambda(x)$. Его нули содержат нули $\psi(x)$, а т.к. это многочлен, то оставшиеся нули содержатся в многочлене $\lambda(x)$, имеющем вид:

$$\lambda(x) = \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i x^i$$

Степень $h(x)$ легко считается: $(2k-4)+k+1 = 3k-3$, $3k-3-(2k-2) = k-1$. В итоге получили уравнение:

$$\psi''(x)xQ(x) + 2\psi'(x)\left(Q(x) - xQ'(x)\right) = \lambda(x)\psi(x) \tag{35}$$

Теорема. *Пусть* $\phi(x) = (x^n, x^{n-1}, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$. *Существует матрица* A_1 *такая, что*

$$\phi(x)^{\mathrm{T}} A_1 = (\phi'(x))^{\mathrm{T}} \tag{36}$$

Доказательство.

$$\sum a_{ij} x^{n+1-i} = (n+1-j)x^{n-j}, j = 1 \ldots n$$

Значит $a_{i,i-1} = n+2-i$ для $i = 2 \ldots n+1$, а остальные $a_{ij} = 0$. □

Теорема. *Пусть* $\phi(x) = (x^n, x^{n-1}, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$. *Существует матрица* A_1 *такая, что*

$$\phi(x)^{\mathrm{T}} A_2 = (\phi''(x))^{\mathrm{T}} \tag{37}$$

Доказательство. Аналогично предыдущему □

Теперь пусть $\lambda(x) = \sum\limits_{i=0}^{s} \lambda_i x^{s-i}$, $\widetilde{\phi}(x) = (x^{s+n}, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$. Тогда существует такая C_λ, что

$$\widetilde{\phi}(x)^{\mathrm{T}} C_\lambda = \lambda(x)\phi(x)^{\mathrm{T}}, \text{ где}$$

$$\phi(x) = (x^n, x^{n-1}, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$$

Доказывается аналогично леммам и получается, что:

$$C_\lambda = \sum_{i=0}^{s} \lambda_i E_i, \text{ где}$$

[46] случай $x_{2k} = d$ рассматривается аналогично

[47] интересно, получается ли оно каким-нибудь естественным образом...

$$E_0^{\mathrm{T}} = (I_{n+1} O_s),\, E_s^{\mathrm{T}} = (0_1 I_{n+1})_{s-1}),\, \ldots, E_s^{\mathrm{T}} = (0_s I_{n+1})$$

После введенных обозначений (35) можно записать в форме:

$$\phi(x)^{\mathrm{T}} A\psi = \phi^{\mathrm{T}} C_\lambda \psi \tag{38}$$

где $\phi(x)^{\mathrm{T}} = (x^{n+k-1}, \ldots, 1)$, а $\lambda(x) = \sum\limits_{i=0}^{k-1} \lambda_i x^{k-i-1}$.

В случае $k = 2$ и достаточно больших d это уравнение удается решить в явном виде. Этим мы и займемся в следующем разделе.

16.2. Явное нахождение локально-оптимальных планов...

Рассмотрим модель (30) при $k = 2$. Мы свели задачу к нахождению максимума функции

$$\frac{\prod\limits_{2\le i<j\le 4} (x_j - x_i) \prod\limits_{i=2}^{4} x_i}{\prod\limits_{i=2}^{2k} Q^2(x_i)} \tag{39}$$

где

$$Q(x) = (x + \theta_2)(x + \theta_4) = x^2 + ax + b$$

$$a = \theta_2 + \theta_4, b = \theta_2\theta_4$$

Обозначим $\tilde{x} = \frac{x}{\sqrt{b}}$, $\tilde{a} = \frac{a}{\sqrt{b}}$. Тогда

$$Q(\tilde{x}) = b(\tilde{x} + \tilde{a}\tilde{x} + 1)$$

Заметим, что после замены $x \to \tilde{x}$ b сокращается. Следовательно можно считать, что $b = 1$ и опускать знак волны. В таком случае уравнение (35) принимает вид:

$$(6x+2\psi_1)x(x^2+ax+1)+2(3x^2+2\psi_1 x+\psi_2)(-3x^2-ax+1) = (\lambda_0 x+\lambda_1)(x^2+\psi_1 x^2+\psi_2 x+\psi_3) \tag{40}$$

После приведения членов в левой части получаем следующую (матричную запись):

$$(x^4\ x^3\ x^2\ x\ 1)\begin{pmatrix} -12 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -10 & 0 & 0 \\ 12 & -2a & -6 & 0 \\ 0 & 6 & -2a & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} \tag{41}$$

В правой части:

$$\lambda(x)\psi(x) = (x^4\ x^3\ x^2\ x\ 1)C_\lambda\psi, \text{ где}$$

$$C_\lambda = \lambda_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{42}$$

Приравняв коэффициенты при x^4 получаем, что $\lambda_0 = -12$ Остается уравнение на λ_1. Перенеся (в матричном виде) все слагаемые в одну часть получаем уравнение

$$(A - \lambda_0 E_0 - \lambda_1 E_1)\psi = 0$$

В матрице первая строчка равна нулю, поэтому вычеркнув ее уравенение сводится к

$$\det(B - \lambda I) = 0$$

$$B - \lambda I = \begin{pmatrix} -\lambda & -2 & 0 & 0 \\ 12 & -2a - \lambda & 6 & 0 \\ 0 & 6 & -2a - \lambda & 12 \\ 0 & 0 & 2 & -\lambda \end{pmatrix}$$

Определитель равен[48]:

$$\begin{gathered} \det(B - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & -2 \\ 12 & -2a - \lambda \end{pmatrix} \det \begin{pmatrix} -2a - \lambda & 12 \\ 2 & -\lambda \end{pmatrix} - \\ \det \begin{pmatrix} -\lambda & 0 \\ 12 & 6 \end{pmatrix} \det \begin{pmatrix} 6 & 12 \\ 0 & -\lambda \end{pmatrix} = \\ (\lambda(2a + \lambda) - 24)^2 - 36\lambda^2 \end{gathered} \tag{43}$$

Получили уравнение и возможные решения:

$$\begin{aligned} &(\lambda^2 - (2a - 6)\lambda - 24)(\lambda^2 + (2a + 6) - 24) = 0 \\ &\lambda = -(a + 3) \pm \sqrt{(a + 3)^2 + 24} \\ &\lambda = -(a - 3) \pm \sqrt{(a - 3)^2 + 23} \end{aligned} \tag{44}$$

Далее вектор ψ является решением

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 \\ 12 & -2a & 6 & 0 \\ 0 & 6 & -2a & 12 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} \tag{45}$$

При этом ψ задает многочлен с положительными корнями, за счет чего получаем, что $\psi_1 < 0$ $\psi_2 > 0$, $\psi_3 < 0$.

$$\psi_1 = -x_2 - x_3 - x_4$$

$$\psi_2 = x_2 x_3 + x_3 x_4 x_2 x_4$$

$$\psi_3 = -x_2 x_3 x_4$$

Смотрим на уравнение (45) и получаем:

$$2\psi_1 = \lambda_1 \Rightarrow \psi_1 = \frac{\lambda_1}{2}$$

$$12 - 2a\psi_1 + 6\psi_2 = \lambda_1 \psi_1 \Rightarrow$$

$$12 - a\lambda_1 + 6\psi_2 = \frac{\lambda_1^2}{2}$$

$$\lambda_1^2 + 2a\lambda_1 - 12\psi_2 - 24 = 0$$

Далее

$$\lambda_1^2 - (2a \pm 6)\lambda_1 - 24 = 0$$

Вычитаем из из предыдущего, пользуемся тем, что $\psi_2 < 0$ и получаем:

$$\lambda_1 < 0$$

[48]интересно, что это за способ вычисления определителя…

$$\psi_2 = -\frac{\lambda_1}{2}$$

Далее последнее уравнение дает

$$2\psi_2 = \lambda_1 \psi_3$$

$$\psi_3 = -1$$

Теперь пользуемся тем, что $\lambda_1 < 0$ и $\sqrt{(a+3)^2 + 21} > |a+3|$ получаем, что единственное возможно решение для λ_1:

$$\lambda_1 = -(a+3) - \sqrt{(a+3)^2 + 24}$$

Следовательно:

$$\psi(x) = x^3 + \frac{\lambda_1}{2}x^2 - \frac{\lambda_1}{2} - 1 = (x-1)\left(x^2 + x(1 + \frac{\lambda_1}{2}) + 1\right)$$

Корни последнего уравнения — точки оптимального плана. Решив его получаем, что

$$x_3 = 1$$

$$x_{4,2} = \frac{1}{2}\left(-\left(1 + \frac{\lambda_1}{2}\right) \pm \sqrt{\left(1 + \frac{\lambda_1}{2}\right)^2 - 4}\right)$$

Теорема доказана.