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

Собрано 15 января 2016 г. в 01:46
Последняя актуальная версия:
`https://github.com/SPbSU-StatMod-Masters17/v.melas`

Содержание

1. Асимптотические свойства нелинейного метода наименьших квадратов

Изложение материала данного вопроса имеется в разделе 1.2 Учебного Пособия: «Локально Оптимлаьные 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* 1.** *Любой набор из (не обязательно различных) N элементов множества $\mathcal{X}$ будем называть точным планом эксперимента.*

***Определение* 2.** *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 $\xi = \{x_1, x_2, \ldots, x_n; \mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n\}$ 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 $g \in \mathrm{C}(\mathcal{X})$ 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 $\eta \in \mathrm{C}^2_{\Theta}(\mathcal{X} \times \Omega)$.

5. Истинное значение параметра Θ_u является внутренней точкой Ω[7].

6. Матрица[8]

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

---

[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* 1** (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* 3.** *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* 4.** *Под точным планом эксперимента будем понимать N точек $x_1, \ldots, x_N \in \mathbb{X}$*

***Определение* 5.** *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* 6.** *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* 7.** *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* 8.** *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:

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

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

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

Для данных обозначение будет верна следующая теорема:

Теорема 2 (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 9 (Конструктивное). *Пусть $u_0, \dots, u_n$ — заданные непрерывные вещественные функции на $[a,b]$. Система называется системой функций Чебышева, если определители*

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

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

Определение 11. *Многочлен называется нетривиальным, если $\sum\limits_{i=0}^{n} a_i^2 \neq 0$.* ***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 12 (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 3. *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 9.*

2. *Система* $\{u_i\}_{i=0}^n$ *образует систему Чебышева 12.*

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 9. 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 4. *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 временённый 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 13. *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 $a \leqslant t_0 < t_1 < \ldots < t_n \leqslant b$.

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 9 (и в 13) считаются в строго различных точках: $\{t_i\}_{i=0}^n$: $a \leqslant t_0 < t_1 < \ldots < t_n \leqslant b$, а в (7) определитель вычисляется в некоторой заданной точке $t \in [a, b]$. Таким образом, необходимо сконструировать такое обобщение стандартного определения 9, 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 $t_0 \leqslant t_1 \leqslant \ldots \leqslant t_n$. Пусть теперь $t = t_i = t_{i+1} = \ldots =$

$t_{i+q} \notin \{a, b\}$[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

$$U^\star \left(\begin{array}{cccc} 0 & 1 & \dots & n \\ t_0 & t_1 & \dots & t_n \end{array} \right) = \tag{8}$$

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

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

***Определение* 14.** *(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*

$$U^\star \left(\begin{array}{cccc} 0 & 1 & \dots & n \\ t_0 & t_1 & \dots & t_n \end{array} \right) > 0. \tag{9}$$

---

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

Определение 17. *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 18. *$\overline{Z(u)}$ — число нулей функции u, где неузловые нули засчитываются дважды.*

Теорема 5. *Если система функций $\left\{u_i\right\}_{i=0}^n$ - Чебышевская на $[a,b]$, то для любого нетривиального многочлена $\overline{Z}(u) \leq n$.*

Доказательство. Пусть $\bar{(Z)}(u) \geq n+1$ для некоторого нетривиального u. Обозначим различные нули u через $t_1, \dots, t_k$. 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 $m_1+2m_2+1 \geq n+2$ точек $(m_1+2m_2 \geq n+1)$. Переобозначим получившиеся точки за s_i и возьмем первые $n+2$ из них. Не умаляя общности, можем считать, что $u(s_i) \geq 0$ для четных i, $u(s_i) \leq 0$ для нечетных i[21]. Отсюда получаем, что следующий определитель равен 0 (т.к. первая стручка — линейная комбинация следующих):

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

---

[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(12) □

***Теорема** 6. Обратно, если для любого нетривиального многочлена $u(t)$ верно, что $\overline{Z}(u) \leq n$, то система является Чебышевской*

Доказательство. Следует из второго определения чебышевской системы[23] 12:

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

□

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** 7. Пусть $t_1, \ldots, t_k$ — различные и такие, что $\sum\limits_{i=1}^{k} \omega(t_i) \leq n$. 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 $\overline{Z} \leq n$. 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 (5)). Теперь, если $t > s_{2m+1}$, то из первого определения системы Чебышева (9) 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 (5)). 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 (9))

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

Определение 19. *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}

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

Для этого нам нужно еще несколько обозначений.

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

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

$$\lambda_j \geq 0, a \leq t_j \leq b$$

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

Теорема 8 (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

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

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

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

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

Из последнего неравенства следует, что $d \geq 0$, 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 20. *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* 9.** *$\tilde{c} \in \mathcal{M}_{p+1}$ является граничной точкой тогда и только тогда, когда $I(\tilde{c}) < \frac{p+1}{2}$. Кроме того, граничная точка $\tilde{c}$ допускает единственное представление*

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

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* 10.** *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* 21.** *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* 11.** *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* 1.** *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 12. *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 $d(x, \xi) \leq 2$.

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

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

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

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 13. *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 $k \geq 3$ верна следующая теорема[34]:

Теорема 14. *При $k \geq 3$ 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 15. *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. $\det J \neq 0$, *где* $J = \frac{\partial q}{\partial z_i}|_{(\tau^0, z^0)}$

---

[34] Мы же вроде получили, что для чебышевских систем мы получили, что точек в предельном плане будет $\leq \frac{p+1}{2}$, 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-оптимальны 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* 16.** *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 $\theta = (p_0, \dots, p_{d_2}, q_0, \dots, q_{d_1-1} \subset \Theta$.
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* 1.**

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

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.*

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

$\sim$ 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* 2.** *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]*:*

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

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

$$\det \ldots = \frac{(x_2-x_1)x_1x_2}{(x_1+b)^2(x_2+b)^2} \tag{25}$$

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* 17.**

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

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* 18.** *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* 19.** *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 (19) 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* 20.** *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 $\prod\limits_{j=1}^{2k}(x_i + b_j)$.

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

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 21.

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

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 22. *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]:

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

Обозначим многочлен $\prod\limits_{i=2}^{2k}\psi(x - x_i)$ 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:

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

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:

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

***Теорема* 23.** *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 $a_{ij} = 0$. $\square$

***Теорема* 24.** *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 $\square$

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.

17. E-оптимальные планы

17.1. Определение и статистический смысл

Пусть $M(\xi)$ — информационная матрица плана.

***Определение* 22.** *Будем говорить, что план ξ является E-оптимальным, если*

$$\xi = \arg\min_{\lambda_{\min}(M(\xi))}, \text{ где}$$

$\lambda_{\min}(M(\xi))$ — минимальное собственное число $M(\xi)$.

Статистический смысл этого критерия состоит в минимизации дисперсии следующего выражения:

$$D(\langle p, \theta \rangle), \text{ где } p \in \mathbb{R}^m, ||p||_2 = 1$$

$$D(\langle p, \theta \rangle) = p^{\mathrm{T}} M^{-1}(\xi) p$$

Из последней формулы видно[49], что максимум этого выражения достигается на первом собственном векторе, а сам максимум равен первому собственному числу. Собственные числа $\frac{1}{\lambda_i}$ матрицы M^{-1} совпадают с обратными к λ_i — собственным числам матрицы M. Из такого представления следует, что E-оптимальность означает минимизацию максимальной длины оси доверительного эллипсоида для МНК-оценки[50].

что сюда еще надо?

---

[49] вспоминаем линейную алгебру и то, что M^{-1} является положительно-определенной матрицей

[50] Эта ось, как все помнят, совпадает с направлением первого собственного вектора матрицы $D(\theta)$.

17.2. Теорема эквивалентности

Определение 23. *Обозначим класс неотрицательно-определенных симметричных матриц с единичным следом за* $\mathbb{A}$.

$$\mathbb{A} = \{A | A \ p.s.d., \operatorname{tr} A = 1\}$$

Теорема 25. *Пусть* $f(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x))^{\mathrm{T}}$, $x \in \mathbb{X}$ *является непрерывной функцией. Тогда:*

1. *План* ξ^* *является* E*-оптимальным тогда и только тогда, когда*

$$\exists A^* \in \mathbb{A} \max_{x \in \mathbb{X}} f(x)^{\mathrm{T}} A f(x) \le \lambda_{\min}(M(\xi^*)$$

2.

$$f(x_i^*)^{\mathrm{T}} A^* f(x_i^*) = \lambda_{\min}(M(\xi^*)), \text{ где}$$

для $i = 1 \dots n$ x_i^* *являются опорными точками* E*-оптимального плана.*

3.

$$\min_A \max_{x \in \mathbb{X}} f(x)^{\mathrm{T}} A f(x) = \max_{\xi} \lambda_{\min} M(\xi)$$

Эта теорема является следствием общей теоремы о минимаксе.

Теорема 26 (фон-Неймана о минимаксе). *Пусть* $f(x,y)$, $x \in \Omega_1, y \in \Omega_2$. $f(x,y)$ *выпукла по* x, *вогнута по* y. Ω_1, Ω_2 *выпуклые и хотя бы одно компактно,* f *непрерывна. Тогда*

$$\min_{x \in \Omega_1} \max_{y \in \Omega_2} f(x,y) = \max_{y \in \Omega_2} \min_{x \in \Omega_1} f(x,y)$$

Далее перепишем задачу на поиск минимального собственного числа информационной матрицы плана:

$$\lambda_{\min}(M) = \min_{||p||=1} p^{\mathrm{T}} M p$$

Пусть p_i — ортонормированный базис. Тогда

$$p \sum \sqrt{\alpha_i} p_i$$

$$\sum \alpha_i = 1$$

Отсюда

$$\begin{gathered} \min_{||p||=1} p^{\mathrm{T}} M p = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i p_i^{\mathrm{T}} M p_i \\ \operatorname{tr}(M \sum \alpha_i p_i p_i^{\mathrm{T}}) = \operatorname{tr} MA \end{gathered} \tag{46}$$

где $A = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i p_i p_i^{\mathrm{T}}$. $\operatorname{tr} A = 1$. Таким образом в старых обозначениях:

$$\lambda_{\min}(M) = \min_{A \in \mathbb{A}} \operatorname{tr} MA$$

Теперь объединим предыдущее разложение и теорему об минимаксе:

$$\lambda_{\min} M(\xi) = \min_{||p||=1} p^{\mathrm{T}} M(\xi) p = \min_{A \in \mathbb{A}} \operatorname{tr} AM$$

Нам интересна E-оптимальность и поэтому промаксимизируем по всем планам. Пусть $\mathbb{M} = \{M(\xi)\}$ — множество информационных матриц планов (оно выпуклое и компактное). Таким образом[51]:

$$\begin{gathered}\max_{\xi}\min_{A} \operatorname{tr} AM = \max M \in \mathbb{M} \min_{A\in\mathbb{A}} = \\ \min_{A\in\mathbb{A}}\max_{M} \operatorname{tr} AM = \min_{A}\max_{\xi} \operatorname{tr} A \sum f(x_i)f(x_i)^{\mathrm{T}} w_i = \min_{A}\max_{x} f(x)^{\mathrm{T}} A f(x)\end{gathered} \tag{47}$$

Выкладка про то, что из минимакса следует эквивалетность:

$$\min_{A}\max_{X} \le f^{\mathrm{T}} A^* f \le \lambda_{\min} M(\xi) \le \max_{\xi} \lambda_{\min} M(\xi)$$

Последнее и первое по теореме о минимаксе равны.

$$\eta(x, \theta) = \alpha_0 + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \sin(x) + \beta_i \cos(x) + \varepsilon$$

Параметры входят линейно и $f(x) = (1, \sin x, \cos x, \dots, \sin kx, \cos kx)^{\mathrm{T}}$, где $x \in [0, 2\pi]$.

***Теорема* 27.** *E-оптимальным планом для тригонометрической модели является*

$$\xi^* = \left\{ \frac{2\pi(i-1)}{n}, i = 1 \dots n \right\}$$

с весами $\frac{1}{n}$, где $n \ge 2k + 1$. Матрица $M(\xi) = \mathrm{diag}(1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2})$

Доказательство. Рассмотрим $A^* = \mathrm{diag}(0, \frac{1}{2k}, \dots, \frac{1}{2k}$

$$f^{\mathrm{T}} A^* f = \sum_{j=1}^{k} \left(\frac{sin^2 jx + cos^2 jx}{2k} \right) = k\frac{1}{2k} = \frac{1}{2}$$

Следовательно $\max_{x} f(x)^{\mathrm{T}} A^* f(x) = \frac{1}{2}$. Отсюда по теорем эквивалентности $M(\xi) = \mathrm{diag}(1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2})$ является матрицей оптимального плана.

Оптимальный план будет в точках $\{\frac{2\pi(i-1)}{n}\}$. как это выводится не ясно, но то, что результат будет тем, что надо кажется достаточно известный факт.. Как, кажется, можно доказать: берем какую-то из сумм вида $\sum w_k \sin \frac{2\pi(i-1)s}{n} \cos \frac{2\pi(j-1)s}{n}$. Если все веса одинаковы, то после какой-то перегруппировки тут будет сумма a и $-a$. Для диагонали, наоборот, будет сумма $\sin^2(x) + \cos^2(x)$ которые будут давать 1. Но это надо аккуратно проверять. □

***Замечание* 2.** *E-оптимальный план не обязательно единственный.*

17.3. Теорема о структуре матрицы из условия эквивалентности.

***Теорема* 28.** *В условия теоремы эквивалентности:*

$$A^* = \sum_{i=1}^{s} \alpha_i p_i p_i^{\mathrm{T}}$$

где $p_1, \dots, p_s$ — ортонормированный базис, $\alpha_i > 0$, $\sum \alpha_i = 1$. s равно кратности минимального собственного числа.

---

[51] Мы воспользовались тем, что $\operatorname{tr} AB$ является линейной выпокло-вогнутой фукцией. Кроме того при переходе от $\max \operatorname{tr} A \sum f(x_i)f(x_i)^{\mathrm{T}} w_i$ использовалось то, что максимум выпуклой сумма положительных слагаемых не превосходит максимального из них

Доказательство. A^* — неотрицательно-определенная матрица. Следовательно существует ортонормированный базис из собственных векторов. Выберем его так, что первые s векторов соответствуют минимальному собственному числу M. Тогда для любого p:

$$
\begin{aligned}
&p = \sum \alpha_i p_i \\
&A^* = \sum \alpha_i p_i p_i^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{s} \alpha_i p_i p_i^{\mathrm{T}} + \sum_{i=s+1}^{m} \alpha_i p_i p_i^{\mathrm{T}} \\
&\max_x f(x)^{\mathrm{T}} A^* f(x) = \max_x \operatorname{tr} \sum_i \alpha_i p_i^{\mathrm{T}} f(x) f(x)^{\mathrm{T}} p_i \\
&= \max_\xi \operatorname{tr} AM(\xi) = \max_\xi \operatorname{tr} \sum \alpha_i p_i^{\mathrm{T}} M p_i
\end{aligned}
\tag{48}
$$

$$\operatorname{tr} \sum \alpha_i p_i^{\mathrm{T}} M p_i = \operatorname{tr} \sum \alpha_i \lambda_i$$

Смотрим на последние два равенство. В последнем мы воспользовались тем, что p_i собственные вектора M. Далее т.к. a_i задают выпуклую комбинацию, то минимум достигается, если не нулевые α_i будут только среди тех коэффициентов, которые стоят передем минимальным собственным числом, что нам и требовалось. □

***Замечание** 3. Рассмотрим частный случай $s = 1$. Тогда $A = pp^{\mathrm{T}}$.*

$$\max_x f(x) p p^{\mathrm{T}} f(x) \leq \lambda_{\min}$$

Что тоже самое, что

$$\max_x (p^{\mathrm{T}} f(x))^2 \leq \lambda_{\min}$$

17.4. Теорема о числе опорных точек в E-оптимальных планах для полиномиальных моделей.

Рассмотрим полиномиальную модели:

$$\eta(x,\theta) = \theta^{\mathrm{T}} f(x), x \in [a,b] \tag{49}$$

где

$$
\begin{aligned}
\theta &= (\theta_0, \dots, \theta_{m-1})^{\mathrm{T}} \in \Theta \\
f(x) &= (1, x, \dots, x^{m-1})^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
$$

***Теорема** 29. Пусть $m > 2$. Тогда существует единственный E-оптимальный план с m-опорными точками, две из которых совпадают с граничными точками.*

Доказательство. Пусть $\xi^* = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_n \\ w_1 & \dots & w_n \end{pmatrix}$ — оптимальный план. Тогда по теореме эквивалентности $\exists A^*$ такое, что =

$$f(x)^{\mathrm{T}} A^* f(x) \leq \lambda_{\min} f(x_i)^{\mathrm{T}} A^* f(x_i) \leq \lambda_{\min} \tag{50}$$

$$
\begin{aligned}
g(x) = f(x)^{\mathrm{T}} A^* f(x) - \lambda_{\min} \\
g(x) \leq 0
\end{aligned}
\tag{51}
$$

$g(x)$ является полиномом степени $2n-2$. При этом у него имеется по крайне мере n корней на $[a,b]$. За счет того, что полином не может стать больше, внутренние корни должны иметь кратность 2. Далее на бесконечностях полином стремится к $+\infty$ или $g(x) = 0$. Пусть на бесконечности полином стремится к $+\infty$. Тогда у $g(x)$ будет по крайне мере $2(n-2)+2$ нуля в случае, когда будет по точке на краях. В противном случае степень полинома будет больше и такая ситуация не возможна. Существование нескольких решений возможно только в случае, когда $g(x) = const$[52] Пусть $g(x) = const$. Тогда $f^{\mathrm{T}} A^* f = \sum b_i x^i$, где все b_i, кроме b_0 равны нулю. Таким образом, получаем, что[53]

$$A^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$A^* = e_1 e_1^{\mathrm{T}}$$

Следовательно $Me_1 = \lambda e_1$ (пользуемся теоремой о структуре матрицы из условия эквивалентности). При этом матрицу M мы можем вычислить:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & \sum w_i x_i & \sum w_i x_i^2 & \dots \\ \sum w_i x_i & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Ситуация, когда $Me_1 = \lambda e_1$ возможна только для $m = 1{,}2$. Таким образом, для $m > 2$ решение единственно. ☐

17.5. Теорема о E-оптимальных планах для линейной модели на произвольном отрезке

Рассмотрим линейную модель[54] $\eta(x,\theta) = \theta_0 + \theta_1 x$, $x \in r_1{,}r_2]$.

***Теорема* 30.** *1. Если* $r_1 r_2 \geq -1$, *то* $\xi = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 \\ w_1 & w_2 \end{pmatrix}$, *где*

$$w_1 = \frac{2 + r_1^2 + r_1 r_2}{4 + (r_1 + r_2)^2}$$

$$w_2 = \frac{2 + r_1^2 + r_1 r_2}{4 + (r_1 + r_2)^2}$$

2. Если $r_1 r_2 < -1$

$$\xi_{a,b} = \begin{pmatrix} a & b \\ \frac{b}{b-a} & \frac{-a}{b-a} \end{pmatrix}$$

где $r_1 \leq a < 0$, $0 < b \leq r_2$, $|ab| > 1$

Доказательство.

$$M = \begin{pmatrix} 1 & w_0 x_0 + w_1 x_1 \\ w_0 x_0 + w_1 x_1 & w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 \end{pmatrix}$$

---

[52] Кажется при этом мы пользуемся тем, что матрица A^* задает единственное решение. На момент рассмотрения этой теоремы мы этого не доказывали. Однако в дальнейшем у нас будет теорема о простоте собственного числа для полиномиальных моделей, что автоматически дало бы единственность A^*. Но там был симметричный отрезок $[-1{,}1]$. Как доказать эту теорему, не ссылаясь на факт из следующего вопроса, не ясно.

[53] квадратичная формула обнуляется на всех векторах, кроме первого орта. Отсюда следует, что все элементы матрицы, кроме (1,1) должны быть нулем. Это не очень сложное упражнение по линейной алгебре, которое скорее всего неоднократно доказывалось.

[54] Является исключением из предыдущего пункта $m = 2$

$$a\frac{b}{b-a}+b\frac{-a}{b-a}=0$$

$$a^2\frac{b}{b-a}+b^2\frac{-a}{b-a}=-ab$$

Следовательно:

$$M(\xi_{a,b})=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & -ab\end{pmatrix}$$

Собственные числа матрицы

$$\begin{pmatrix}1 & c\\ c & d\end{pmatrix}$$

равны

$$lambda_1=1/2(-sqrt(4c^2+d^2-2d+1)+d+1)$$

$$lambda_2=1/2(sqrt(4c^2+d^2-2d+1)+d+1)$$

Совпадают они только в случае, когда $c=0$ и $d=1$. Если d фиксировано, то максимальное $\lambda_{\min}(M)$ будет достигаться при $c=0$. При $c=0$ минимальным собственным числом будет 1, если $d>1$. Если $d<1$, то этим собственным числом будет d. Мы хотим максимизировать минимальное собственное число, а значит нам нравится вариант $d\geq 1$. При сформулированных в теореме условиях это будет выполнено. Отсюда получаем, что для $r_1r_2<-1$ у нас есть много оптимальных планов.

Теперь рассмотрим случай $r_1r_2\geq -1$. Предположим, что минимальное собственное число информационной матрицы оптимального плана имеет единичную кратность. Тогда

$$A^*=qq^{\mathrm{T}}$$

где q собственных вектор M, $||q||=1$. Матрица $M(\xi)=f(r_1)f(r_1)^{\mathrm{T}}w+f(r_2)f(r_2)^{\mathrm{T}}(1-w)$

Будем искать q в виде $(1,q_1)^{\mathrm{T}}$. Тогда, если r_1 и r_2 точки плана, то

$$1+q_1r_1=\pm\sqrt{\lambda_{\min}}$$

$$1+q_1r_2=\pm\sqrt{\lambda_{\min}}$$

Из уравнения видим, что в уравнения не могут давать один знак, поэтому сложим их и получим:

$$2+q_1(r_1+r_2)=0$$

$$q_1=\frac{-2}{r_1+r_2}=-\frac{1}{\mu}$$

Проверим, что такой q является собственным вектором:

$$\left(f(r_1)f(r_1)^{\mathrm{T}}w+f(r_2)f(r_2)^{\mathrm{T}}(1-w)\right)q=\lambda q \tag{52}$$

Пусть

$$1+r_1q_1=-h$$

$$1+r_2q_1=h=1-\frac{r_2}{\mu}$$

Тогда (52) можно записать в виде

$$f(r_1)hw+f(r_w)(-h)(1-w)=\lambda\begin{pmatrix}1\\ -\frac{1}{\mu}\end{pmatrix}$$

Подставляем и получаем[55]

$$\lambda = (2w - 1)h = \frac{r^2}{r^2 + \mu^2}$$

где $r = \frac{r_2 - r_1}{2}, \mu = \frac{r_2 + r_1}{2}$

Можно проверить[56], что найденное λ будет с.ч. кратности 1, что дает нам оптимальность (по теореме эквивалентности). ☐

17.6. Теорема о E-оптимальных планах для квадратичной модели на симметричном отрезке

Рассмотрим $\eta(x,\theta) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \varepsilon, x \in [-r, r]$.

***Теорема* 31.** *Для квадратичной регрессии на симметричном промежутке существует единственный E-оптимальный план*

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -r & 0 & r \\ w & 1 - 2w & w \end{pmatrix}$$

где при $r \leq \sqrt{2}$

$$w = \frac{1}{1 + r^4}, \lambda^* = \frac{r^4}{4 + r^4}$$

при $r \geq \sqrt{2}$

$$w = \frac{r^2 - 1}{2r^4}, \lambda^* = \frac{r^2 - 1}{r^2}$$

Доказательство. Из теоремы о числе точек получаем, что у нас 2 точки на концах. Из симметрии и единственности получаем, что третья точка должна быть нулем: Пусть ξ — план с точкой $x \neq 0$. Тогда $\tilde{x}$ план с $x \to -x$. Рассмотрим $\xi^* = \frac{\xi + \widetilde{xi}}{2}$.

$$\lambda_{\min} M(\frac{\xi + \tilde{\xi}}{2}) < \frac{\lambda_{\min} M(\xi) + \lambda_{\min} M(\tilde{\xi})}{2}$$

$$\begin{pmatrix} m_1 & c \\ c & m_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_1 & -c \\ -c & m_2 \end{pmatrix}$$

И для суммы в последней строчки мы в прошлой теореме уже выясняли, что максимум когда матрица диагональная. Следовательно план симметричный[57]. Получаем, что матрица $M(\xi)$ имеет вид:

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2r^2 w \\ 0 & 2r^2 w & 0 \\ 2r^2 w & 0 & 2wr^4 \end{pmatrix}$$

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

$$\det(M - \lambda I) = \left(2r^2 w - \lambda\right)\left(\lambda^2 - \lambda(1 + 2r^4 w) + 2r^4 w - 4r^4 w^2\right)$$

$$\lambda = 2r^2 w$$

$$\lambda(w) = \frac{1 + 2r^4 w \pm \sqrt{(1 + 2r^2 w)^2 - 8r^4 w + 16r^r w^2}}{2}$$

---

[55] Мы можем считать, что w у нас есть в условии доказываемой теоремы, но он также получается и просто из системы. После того, как w найден, поиск λ сводится к подстановке и алгебраическим манипуляциям

[56] вычислив собственные числа матрицы

[57] В том числе веса на концах совпадают.

Нам интересно минимальное собственное число и считаем, что в последнем слагаемом минус. Тогда минимум получившегося выражения можно найти с помощью дифференцирования и приравнивания производной к нулю. После этого будет найдено оптимальное w[58] Найдя экстремумы относительно w получим[59]:

$$w((r^4 + 4)w - 1) = 0$$

$$w = \frac{1}{r^4 + 4}$$

Решение $w = 0$ дает собственное число $\frac{1}{2}$, которое больше, чем $2r^2 w$. В итоге $\lambda = \frac{r^4}{4+r^4}$ Нас интересует минимальное собственное число. Первое собственное число — линейная по w функция. Вторая, как мы видим, сначала возврастает по w, а затем убывает. В нуле график прямой лежит ниже, чем график второго собственного числа. Таким образом, если точка $w = \frac{1}{r^4+4}$ лежит после пересечения графика $2r^2 w$ и $\frac{1}{2}\left(2r^4 w - \sqrt{4r^8 w^2 + 16r^4 w^2 - 4r^4 w + 1} + 1\right)$, то именно она будет точкой плана, в противном случае точкой плана будет пересечение этих графиков. Точкой пересечения графиков является

$$w = \frac{r^2 - 1}{2r^4}, r > 1$$

Откуда можно получить, что для $0 \leq r \leq \sqrt{2}$ решением будет

$$w = \frac{1}{r^4 + 4}$$

□

17.7. Теорема о кратности собственных чисел информационных матриц для полиномиальных моделей

Теорема 32. *Пусть* ξ *— любой невырожденный план.* $\lambda_{\min}(M) > 0$. *Тогда кратность любого собственного числа информационной матрицы не превосходит двух.*

написать док-во

17.8. Теорема о простоте минимального собственного числа для полиномиальных моделей

Теорема 33. *Рассмотрим полиномиальную модель на* $[-1,1]$, $m > 2$. *Пусть* ξ *оптимальный план. Тогда кратность* $\lambda_{\min}$ *равна 1.*

выяснить, было-ли док-во и найти его.

---

[58] Надо помнить о том, что w является коэффициентом из выпуклой комбинации и лежит в [0,1]. Тем не менее, точки локальных минимумов/максимумов данной функции оказываются хорошими

[59] В репозитории лежит файл для Mathematica, в котором все это считается. На бумажке это считать как-то сложновато