

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

Собрано 14 января 2016 г. в 18:54

Содержание

1	Асимптотические свойства нелинейного метода наименьших квадратов	3
2	Постановка задачи оптимального планирования для нелинейных моделей. Теорема эквивалентности для локально оптимальных планов.	5
3	Системы Чебышева. Два эквивалентных определения.	7
4	Системы Чебышева. Метод проверки, основанный на последовательном дифференцировании. Примеры применения (экспоненциальные модели.)	8
4.1	Пример: Экспоненциальная регрессия	9
4.2	Пример: модель Михаэлиса-Менте	9
5	Расширенные системы Чебышева	9
6	Неотрицательные многочлены с заданными нулями	12
6.1	Теорема о числе нулей	12
6.2	Неотрицательные многочлены с заданными нулями	13
7	Теорема о числе опорных точек локально-оптимальных планов для Чебышевских систем	14
8	Экспоненциальные модели с двумя параметрами. Построение локально-оптимальных планов	16
9	Теорема о числе точек локально-оптимальном плане	18
10	Основное уравнение функционального подхода. Теорема о неявной функции	18
11	Теорема о единственности насыщенных локально D-оптимальных планов для экспоненциальных моделей	19
12	Дробно-рациональные модели	20
13	Простейшие дробно-рациональные модели	20
14	Вид определителя информационной матрицы	21
15	Алгебраический подход	22
16	Явное нахождение локально-оптимальных планов для дробно-рациональных моделей в виде суммы двух простейших моделей	22
16.1	Дифференцирование уравнения и его алгебраической формы	24
16.2	Явное нахождение локально-оптимальных планов...	26

17	Е-оптимальные планы	28
17.1	Определение и статистический смысл	28
17.2	Теорема эквивалентности	29
17.3	Теорема о структуре матрицы из условия эквивалентности.	30

1. Асимптотические свойства нелинейного метода наименьших квадратов

Изложение материала данного вопроса имеется в разделе 1.2 Учебного Пособия: «Локально Оптимизационные 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 множество¹. 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 $j \in 1 : N$

$$y_j = \eta(x_j, \Theta) + \varepsilon_j, \quad (1)$$

где $x_1, x_2, \dots, x_N \in \mathcal{X}$ — «условия эксперимента», $\Theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)^T \in \mathbb{R}^m$, 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 экспериментальные 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 вероятностную³ меру, задаваемую таблицей

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

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 (необременяющими) и естественными.

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

² Естественнo 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:

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

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 параметрам 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 $\Theta, \bar{\Theta} \in \Omega$ величина

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

равна нулю только при $\Theta = \bar{\Theta}$ ⁶;

4. Частные производные первого и второго порядка регрессии η по параметру существуют и непрерывны на $\mathcal{X} \times \Omega$, то есть $\eta \in C_{\Theta}^2(\mathcal{X} \times \Omega)$.
5. Истинное значение параметра Θ_u является внутренней точкой Ω ⁷.
6. Матрица⁸

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

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

⁶тогда и только тогда, правда?

⁷то есть не принадлежит $\text{гас}(\Omega)$. Это существенно, так как множество Ω является замкнутым.

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

где

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

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,

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

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 $N \rightarrow \infty$

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

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:

$$y_i = \eta(x_i, \theta) + \varepsilon_i, \quad (5)$$

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

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

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

⁹Вспомните, 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

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

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

Определение 4. Под точным планом эксперимента будем понимать N точек $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{X}$

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 использовании 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:

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

Наша задача — выбрать некоторым образом точки x_1, \dots, 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, \dots, x_n . Тогда

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

Определение 8. Пусть $f(x, \theta)^T = \left(\frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_1}, \dots, \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_l} \right)$. Пусть θ^u — истинное значение оцениваемого параметра. Тогда информационной матрицей будем называть

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

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 окрестности $\theta^0 \in \Theta \subset \mathbb{R}^m$:

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

Введем следующие обозначения:

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

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

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

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 значения во всех точках любого локального D -оптимального плана. Информационные матрицы всех локально D -оптимальных планов совпадают.

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

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 $\forall a \leq t_0 < t_1 < \dots < t_n \leq b$.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 $u(t) = \sum_{i=0}^n a_i u_i(t)$, $a_i \in \mathbb{R}$.¹¹

Определение 11. Многочлен называется нетривиальным, если $\sum_{i=0}^n a_i^2 \neq 0$. **Придирка:** Это условие глядится странно. 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.

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

¹¹Здесь 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 $Z(u) \leq n$ 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 $a = (a_0, \dots, a_n)^T \in \mathbb{R}^{n+1}$ 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

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

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

2 \rightarrow 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 $U = U(t_0, t_1, \dots, t_n)$ и вектор $a = (a_0, a_1, \dots, a_n)^T \in \mathbb{R}^{n+1}$, что $Ua = \mathbf{0}$. То есть существует обобщенный многочлен, имеющий не менее $n + 1$ нулей. Противоречие. \square

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:

$$\begin{aligned} F_{00}(t) &= u_0(t), \dots, F_{0k}(t) = u_n(t) \\ F_{11}(t) &= \left(\frac{F_{01}}{F_{00}} \right)', \dots, F_{1k}(t) = \left(\frac{F_{0k}}{F_{00}} \right)' \\ F_{22}(t) &= \left(\frac{F_{12}}{F_{11}} \right)', \dots, F_{2k}(t) = \left(\frac{F_{1k}}{F_{11}} \right)' \\ &\dots \\ F_{kk} &= \left(\frac{F_{k-1,k}}{F_{k-1,k-1}} \right)' \end{aligned}$$

Теорема 4. Если существуют все функции F_{ij} и $F_{ii} > 0$, то система u_0, \dots, u_k является системой Чебышева.

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

¹³Здесь временный шрифт.

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

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

По условию, $u_0(t) > 0$, а значит вторая скобка обращается в 0 в $k+1$ точках. Вспоминаем теорему Ролля — между двумя корнями непрерывной функции есть корень ее производной. Отсюда следует, что функция $f_1(t) = \left(1 + \frac{a_1 u_1(t)}{a_0 u_0(t)} + \dots + \frac{a_k u_k(t)}{a_0 u_0(t)} \right)'$ — обращается 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 $F_{kk}(t) > 0$ \square

4.1. Пример: Экспоненциальная регрессия

Пусть $\eta(t, \theta) = \sum_{i=1}^k b_i e^{\lambda_i t}$, $b_i \in \mathbb{R}$, $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $\lambda_i \neq \lambda_j$ $i \neq j$. 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 $e^{\lambda t} > 0 \forall \lambda \in \mathbb{R}$.

4.2. Пример: модель Михаэлиса-Менте

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta}{\partial a} &= u_0(t) = \frac{t}{t+b} \\ \frac{\partial \eta}{\partial b} &= u_1(t) = \frac{-at}{(t+b)^2} \end{aligned}$$

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

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

Вспомним, что $a > 0$, а значит $t > 0$ и $\frac{at}{(t+b)^2} > 0$. Второе слагаемое — линейная функция, 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:

¹⁴я наверно не правильно распарсил имена, надо поправить

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

для $a \leq t_0 < t_1 \leq b$.

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 нестрогого возрастания:

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

для $a \leq t_1 < t_2 \leq b$.

Условие строгой монотонности производной записывается следующим образом:

$$\begin{vmatrix} 1 & u'_0(t) \\ u_1(t) & u'_1(t) \end{vmatrix} = u'_1(t) > 0, \quad (7)$$

для $a \leq t \leq b$.

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

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

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

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: $\{t_i\}_{i=0}^n: a \leq t_0 < t_1 < \dots < t_n \leq b$, 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 $t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n$. Пусть теперь $t = t_i = t_{i+1} = \dots =$

$t_{i+q} \notin \{a, b\}$ ¹⁵, где $0 \leq i < i + q \leq n$. Рассмотрим (в данный момент равный 0¹⁶) определитель:

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

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

Заменяем 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 $t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n \in [a, b]$ такой, что

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

где $0 \leq \ell \leq n$ ¹⁷ и $0 \leq k_0 < k_1 < \dots < k_{\ell} \leq n$ ¹⁸.

При этом дополнительно¹⁹

1. $k_{i+1} - k_i \leq p - 1$ 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

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

$$\det \begin{pmatrix} u_0(t_{k_0}) & u'_0(t_{k_0}) & \dots & u_0^{(k_0)}(t_{k_0}) & u_0(t_{k_1}) & u'_0(t_{k_1}) & \dots & u_0^{(k_1-k_0)}(t_{k_1}) & \dots & u_0(t_{k_{\ell}}) & \dots & u_0^{(k_{\ell}-k_{\ell-1})}(t_{k_{\ell}}) \\ u_1(t_{k_0}) & u'_1(t_{k_0}) & \dots & u_1^{(k_0)}(t_{k_0}) & u_1(t_{k_1}) & u'_1(t_{k_1}) & \dots & u_1^{(k_1-k_0)}(t_{k_1}) & \dots & u_1(t_{k_{\ell}}) & \dots & u_1^{(k_{\ell}-k_{\ell-1})}(t_{k_{\ell}}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_n(t_{k_0}) & u'_n(t_{k_0}) & \dots & u_n^{(k_0)}(t_{k_0}) & u_n(t_{k_1}) & u'_n(t_{k_1}) & \dots & u_n^{(k_1-k_0)}(t_{k_1}) & \dots & u_n(t_{k_{\ell}}) & \dots & u_n^{(k_{\ell}-k_{\ell-1})}(t_{k_{\ell}}) \end{pmatrix}$$

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

Определение 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 условиям сформулированным выше

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

¹⁵Это чисто формальное условие. Зачем оно нужно?

¹⁶Почему?

¹⁷Чему соответствуют крайние случаи?

¹⁸Можно ли здесь допустить нестрогое неравенство?

¹⁹Все 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 p 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 $\{u_i\}_{i=0}^n$ — Чебышевская на $[a, b]$, то для любого нетривиального многочлена $\overline{Z}(u) \leq n$.

Доказательство. Пусть $\overline{Z}(u) \geq n + 1$ 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):

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

²⁰Поручить кому-то набрать это аккуратно.

²¹Проверьте 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 $t_0 < t_1 < \dots < t_n$. Поэтому, разложив определитель (10) по первой строчке, получим²², 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) \square

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 системы²³ 12:

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

\square

6.2. Неотрицательные многочлены с заданными нулями

Задача: построить неотрицательный многочлен, имеющий нули в точках $t_1 < t_2 < \dots < t_k$. 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, \dots, t_k — различные и такие, что $\sum_{i=1}^k \omega(t_i) \leq n$. 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 точкой²⁴

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

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

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

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

²³ $Z(u)$ ведь количество нулей многочлена

²⁴Исключение 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.

²⁵Остальные 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 $u_\varepsilon(t)$ обращается 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 $\bar{u}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_\varepsilon(t)$. 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 точки b вместо точки a и получим $\bar{y}(t)$. Тогда решением нашей задачи будет многочлен $u(t) = \bar{u}(t) + \bar{y}(t)$ \square

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 образом²⁷:

$$\Xi_k = \left\{ \begin{pmatrix} t_1 & \dots & t_k \\ v_1 & \dots & v_k \end{pmatrix} \right\} \quad (11)$$

$$\Xi = \bigcup \Xi_k \quad (12)$$

Вспоминаем, что информационная матрица плана выглядит следующим образом:

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

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 представить, 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.

²⁶Здесь написан определитель матрицы (смотри определение (9))

²⁷При 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}

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

Для этого нам нужно еще несколько обозначений.

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

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

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

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

Теорема 8 (Каратеодори). Пусть $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^k$ — 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 замкнутым²⁸ 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

$$\sum a_i \tilde{c}_i + d < 0 \quad (13)$$

$$\sum a_i \gamma_i + d \geq 0 \forall \gamma \in C \quad (14)$$

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

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

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 имела 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 C_{p+1} :

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

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

²⁸Это 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

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

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

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

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

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

Заметим, что в локально-оптимальном плане должно быть по крайней 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 $\lceil \frac{2k(2k+1)+1}{2} \rceil$, 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 функцией²⁹, поэтому максимум у него на границе (вспомним 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 эквивалентности³⁰:

Теорема 10. Пусть M — информационная матрица для параметра $\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^m$. Пусть $d(x, \theta) = f(x)^T M^{-1} f(x) = D(f(x)^T \hat{\theta})$ ³¹

Эквивалентно:

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

²⁹там всякие попарные произведения, они после оператора лапласа умрут

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

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

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

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.

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

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

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. \square

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):

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

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

Этот факт мы доказывали в 4 вопросе.

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

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

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

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

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

³³Но 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 теореме эквивалентности $d(x, \xi) \leq 2$.

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

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

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

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 теорема³⁴:

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 $q(\tau, z) : \mathbb{R}^{s+k} \rightarrow \mathbb{R}$ 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 $J = \frac{\partial q}{\partial z_i} |_{(\tau^0, z^0)}$

³⁴Мы 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-аналитическая³⁵, то и $\tau(z)$ также будет вещественно-аналитической функцией³⁶.

Эта теорема нам интересна 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:

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

Не умаляя общности будем считать, что все параметры у нас входят нелинейно³⁷. Кроме того, введем еще несколько упрощений:

1. Пусть мы ищем насыщенный план (т.е. количество точек 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 решения задачи (17) при фиксированном θ можно взять производные и приравнять их к нулю³⁸

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

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 Лагранжа³⁹

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

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

Теорема 16. Оптимальная план-функция⁴⁰ существует и определена единственным образом. Первая точка плана x_1 находится в нуле, поэтому ее можно рассматривать как функцию $\tau\lambda : S \rightarrow [0, \infty)^{2k-1}$. Кроме того, координатные функции являются аналитическими и строго убывают по каждому λ_j . План $\tau(\lambda)$ является насыщенным D -оптимальным при любом фиксированном $\lambda : \lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_k$.

³⁵т.е. в окрестности любой точки раскладывается в ряд Тейлора (сходящийся)

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

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

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

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

⁴⁰смотри вопрос про основное функциональное уравнение

12. Дробно-рациональные модели

TODO: Разбить на вопросы и дописать

13. Простейшие дробно-рациональные модели

Рассмотрим дробно-рациональные модели:

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

Параметр $\theta = (p_0, \dots, p_{d_2}, q_0, \dots, q_{d_1-1}) \in \Theta$.

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.

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

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.

$$\begin{aligned} \det \begin{pmatrix} \frac{1}{x_1+b} & \frac{1}{(x_1+b)^2} \\ \frac{1}{x_2+b} & \frac{1}{(x_2+b)^2} \end{pmatrix} &= \frac{1}{(x_1+b)^2} \frac{1}{(x_2+b)^2} \begin{vmatrix} x_1+b & 1 \\ x_2+b & 1 \end{vmatrix} \\ \det \dots &\sim \frac{x_2 - x_1}{(x_1+b)^2(x_2+b)^2} \quad (x_1 > x_2) \end{aligned} \quad (21)$$

\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 максимизации⁴¹ и получить, что $x_2 = b$. Отлично, оптимальный план найден.

⁴¹надеюсь 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 определителя⁴²:

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

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

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

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

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

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

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

Теорема 17.

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

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 Вандермонда⁴³ \square

Дальше есть более подробный факт для частного случая.

⁴²возможно с точностью до знака

⁴³может 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:

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

При этом выполнено $c < \theta_{2i}, i = 1 \dots k$. Не умаляя общности, после перепараметризации 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:

$$\begin{aligned} f_{2i-1}(x) &= \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_{2i-1}} = \frac{1}{x + \theta_{2i-1}}, i = 1 \dots k \\ f_{2i}(x) &= \frac{\partial \eta(x, \theta)}{\partial \theta_{2i}} = \frac{1}{(x + \theta_{2i})^2}, i = 1 \dots k \end{aligned}$$

В введенных обозначениях 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 $\theta_1 \dots \theta_{2k}$ 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:

$$\begin{aligned} x_1 &= 0, x_{2,4} = \frac{\sqrt{\theta_2 \theta_4}}{2} \left(-\lambda/2 - 1 \pm \sqrt{(\lambda/2 + 1)^2 - 4} \right) \\ x_3 &= \sqrt{\theta_2 \theta_4} \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

Ясно⁴⁴, что $g(x)$ является многочленом степени $4k$. В точках $x_i, i = 2, \dots, 2k-1$ 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, $n \geq 2k$, иначе $\det M(\xi) = 0$. Пусть $n \geq 2k + 1$. В таком случае у $g(x)$ с учетом кратности по крайней 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). \square

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 $G = \left\{ \frac{1}{x_i + b_j} \right\}_{i,j=1}^{2k}$.

Теорема 20. Для любых вещественных $x_1, \dots, x_{2k}, b_1, \dots, b_{2k}$

$$\det G = \frac{\prod_{j>i} (x_j - x_i) \prod_{j>i} (b_j - b_i)}{\prod_i \prod_j (x_i + b_j)}$$

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

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

Вычтем первый столбце из остальных и получим

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

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

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

⁴⁴проверяется 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:

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

Получаем определитель Вандермонда, что и требовалось. \square

Теперь получим формулу для определителя F .

Теорема 21.

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

Доказательство.

$$\begin{aligned} \frac{1}{(x + \theta_{2i})^2} &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} \left(\frac{1}{x + \theta_{2i} + \delta} - \frac{1}{x + \theta_{2i}} \right) \\ \det F &= \det \left(\frac{1}{x_i + \theta_2}, \frac{1}{(x_i + \theta_2)^2}, \dots, \frac{1}{x_i + \theta_{2k}}, \frac{1}{(x_i + \theta_{2k})^2} \right)_{i=1}^{2k} \\ \det F &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta^k} \det \left(\frac{1}{x_i + \theta_2}, \frac{1}{x + \theta_{2i} + \delta} - \frac{1}{x + \theta_{2i}}, \dots \right)_{i=1}^{2k} \\ \det F &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta^k} \det \left(\frac{1}{x_i + b_j} \right)_{i,j=1}^{2k} \end{aligned}$$

Складываем соседние столбцы, применяем прошлую теорему и получаем требуемое. \square

16.1. Дифференцирование уравнения и его алгебраической формы

Теорема 22. Пусть $0 \leq x_1 < \dots < x_k$ — 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. \square

Итого, задачу поиска оптимального плана мы свели к поиску максимума следующей функции⁴⁵:

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

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

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

⁴⁵здесь 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:

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

где $Q(x) = \prod (x + \theta_{2i})$

Воспользуемся следующим равенством⁴⁷:

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

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

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

Многочлен $h(x)$ обращается в ноль в точках $x_2 \dots x_{2k}$. 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:

$$\psi''(x)xQ(x) + 2\psi'(x)(Q(x) - xQ'(x)) = \lambda(x)\psi(x) \quad (35)$$

Теорема 23. Пусть $\phi(x) = (x^n, x^{n-1}, \dots, 1)^T$. Существует матрица A_1 такая, что

$$\phi(x)^T A_1 = (\phi'(x))^T \quad (36)$$

Доказательство.

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

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

Теорема 24. Пусть $\phi(x) = (x^n, x^{n-1}, \dots, 1)^T$. Существует матрица A_1 такая, что

$$\phi(x)^T A_2 = (\phi''(x))^T \quad (37)$$

Доказательство. Аналогично предыдущему □

Теперь пусть $\lambda(x) = \sum_{i=0}^s \lambda_i x^{s-i}$, $\tilde{\phi}(x) = (x^{s+n}, \dots, 1)^T$. Тогда существует такая C_λ , что

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

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

Доказывается аналогично леммам и получается, что:

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

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

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

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

После введенных обозначений (35) можно записать в форме:

$$\phi(x)^T A \psi = \phi^T C_\lambda \psi \quad (38)$$

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

В случае $k = 2$ и достаточно больших d это уравнение удастся 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

$$\frac{\prod_{2 \leq i < j \leq 4} (x_j - x_i) \prod_{i=2}^4 x_i}{\prod_{i=2}^{2k} Q^2(x_i)} \quad (39)$$

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

$$(6x + 2\psi_1)x(x^2 + ax + 1) + 2(3x^2 + 2\psi_1x + \psi_2)(-3x^2 - ax + 1) = (\lambda_0x + \lambda_1)(x^2 + \psi_1x^2 + \psi_2x + \psi_3) \quad (40)$$

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

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

В правой части:

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

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

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 уравнение 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 равен⁴⁸:

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

Получили уравнение и возможные решения:

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

Далее вектор ψ является решением

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

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

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

$$\psi_2 = x_2x_3 + x_3x_4x_2x_4$$

$$\psi_3 = -x_2x_3x_4$$

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

$$\lambda_1 < 0$$

⁴⁸интересно, 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:

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

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

Из последней формулы видно⁴⁹, 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-оценки⁵⁰.

что сюда еще надо?

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

⁵⁰Эта 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} .

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

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

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

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

2.

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

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

3.

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

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:

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

Пусть p_i — ортонормированный базис. Тогда

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

$$\sum \alpha_i = 1$$

Отсюда

$$\min_{\|p\|=1} p^T M p = \sum_{i=1}^m \alpha_i p_i^T M p_i \tag{46}$$

$$\text{tr}(M \sum \alpha_i p_i p_i^T) = \text{tr } M A$$

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

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

Теперь объединим предыдущее разложение и теорему об минимаксе:

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

Нам интересна E -оптимальность и поэтому промаксимизируем по всем планам. Пусть $\mathbb{M} = \{M(\xi)\}$ — множество информационных матриц планов (оно выпуклое и компактное). Таким образом⁵¹:

$$\begin{aligned} \max_{\xi} \min_A \operatorname{tr} AM &= \max_{M \in \mathbb{M}} \min_{A \in \mathbb{A}} \operatorname{tr} AM = \\ \min_{A \in \mathbb{A}} \max_M \operatorname{tr} AM &= \min_A \max_{\xi} \operatorname{tr} A \sum f(x_i) f(x_i)^T w_i = \min_A \max_x f(x)^T A f(x) \end{aligned} \quad (47)$$

Выкладка про то, что из минимакса следует эквивалентность:

$$\min_A \max_x f^T A^* f \leq \lambda_{\min} M(\xi) \leq \max_{\xi} \lambda_{\min} M(\xi)$$

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 $f(x) = (1, \sin x, \cos x, \dots, \sin kx, \cos kx)^T$, 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 $n \geq 2k + 1$. Матрица $M(\xi) = \operatorname{diag}(1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2})$

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

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

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

Оптимальный план будет в точках $\left\{ \frac{2\pi(i-1)}{n} \right\}$. 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. \square

Замечание 2. E -оптимальный план не обязательно единственный.

17.3. Теорема о структуре матрицы из условия эквивалентности.

Теорема 28. В условия теоремы эквивалентности:

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

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

⁵¹Мы воспользовались тем, что $\operatorname{tr} AB$ является линейной выпукло-вогнутой функцией. Кроме того при переходе от $\max \operatorname{tr} A \sum f(x_i) f(x_i)^T w_i$ 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 :

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

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

Замечание 3. Рассмотрим частный случай $s = 1$. Тогда $A = pp^T$.

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

Что тоже самое, что

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