Максиминно эффективные планы дискриминации для полиномиальных регрессионных моделей

Галиаскарова Наталья Рамильевна, 522-я группа

Санкт-Петербургский Государственный Университет
Математико-механический факультет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель — д.ф.-м.н, проф. **В.Б. Мелас**
Рецензент — к.ф.-м.н. **П.В. Шпилев**

Санкт-Петербург
2012г.

Описание моделей

Пусть результаты эксперимента описываются уравнением регрессии:

$$y = \eta(x) + \varepsilon, \quad x \in [-1,1], \quad \varepsilon \sim N(0,\sigma^2),$$

$$\eta(x) = \begin{cases} \eta_1(x,\theta_1), & \theta_1 \in \mathbb{R}^{m_1} \\ \eta_2(x,\theta_2), & \theta_2 \in \mathbb{R}^{m_2} \end{cases}$$

В качестве планов эксперимента будем рассматривать дискретные вероятностные меры, задаваемые таблицей

$$\xi = \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & \dots & t_{n-1} & t_n \\ w_1 & w_2 & \dots & w_{n-1} & 1 - \sum_{k=1}^{n-1} w_k \end{pmatrix},$$

где $t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t_n \in [-1,1], \quad w_k > 0, \quad \sum_{k=1}^{m-1} w_k < 1.$

Рассматривается случай полиномиальных моделей:

- $\eta_1(x,\theta_1) = \sum_{i=0}^{m} \theta_{1,i} x^i$
- $\eta_2(x,\theta_2) = \sum_{i=0}^{m-2} \theta_{2,i} x^i$
- $\theta_1 = (\theta_{1,0}, \dots, \theta_{1,m-1}, \theta_{1,m}) \in \mathbb{R}^{m+1}$
- $\theta_2 = (\theta_{2,0}, \dots, \theta_{2,m-2}) \in \mathbb{R}^{m-1}$

Определение T-оптимального плана

Обозначим
$\bar{\eta}(x,\theta) := \eta_1(x,\theta_1) - \eta_2(x,\theta_2) = q_0 + q_1 x + \ldots + q_{m-2}x^{m-2} + \theta_{1,m}(bx^{m-1} + x^m)$,

- $b := \frac{\theta_{1,m-1}}{\theta_{1,m}}$
- $q_i = \theta_{1,i} - \theta_{2,i} \quad i = 0, \ldots, m-2,$
- $\theta = (q_0, \ldots, q_{m-2}, \theta_{1,m-1}, \theta_{1,m})$.

Замечание. Можно считать $\theta_{1,m} \equiv 1$.

Обозначим $\Delta(\xi) := \min_{q \in \mathbb{R}^{m-1}} \int \bar{\eta}(x,\theta)^2 \xi(dx)$.

Определение

T-критерий: $\max_\xi \Delta(\xi)$,

ξ^* - ***T-оптимальный план*** $\overset{def}{\Leftrightarrow}$

$$\xi^* = \arg\max_\xi \Delta(\xi).$$

Обозначим

$$R(b) := \max_{\zeta} \min_{q \in \mathbb{R}^{m-1}} \int \bar{\eta}(x,\theta)^2 \zeta(dx),$$

$$b_0 := m \tan^2\left(\frac{\pi}{2m}\right).$$

Основные результаты [Dette H., Melas V., Shpilev P. 2012][1]

- При $|b| \le b_0$ $\exists!$ Т-оптимальный план. Точки и веса плана найдены аналитически.

$$R(b) = \frac{1}{2^{2(m-1)}}\left(1 + \frac{|b|}{m}\right)^{2m}.$$

- При $|b| > b_0$ предложен метод аппроксимации функции $R(b)$.

Замечание. При $m = 2, 3$ функция $R(b)$ найдена аналитически для любого b.

Обозначим $\mathcal{R}(b,\xi) := \frac{\min_{q \in \mathbb{R}^{m-1}} \int \bar{\eta}(x,\theta)^2 \xi(dx)}{R(b)}$.

Определение

ξ^* - ***Максиминно эффективный Т-оптимальный план*** $\overset{def}{\Leftrightarrow}$

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \min_{b \in I} \mathcal{R}(b,\xi)$$

Доказано, что планы при $I = [-a, a]$ находятся в классе симметричных планов с $m+1$ опорной точкой. [Melas V.,Shpilev P. 2012][2]

Задача: Найти максиминно эффективные планы для $b \in (-\infty, +\infty)$.

$m = 2$

$\xi^* = \arg\max_\xi \min_{b\in I} \mathcal{R}(b,\xi) = \arg\max_\xi \min_{b\in I} \frac{\min_c \int (x^2+bx+c)^2 \xi(dx)}{R(b)}$, где

$$R(b) = \begin{cases} \frac{1}{4}(1+\frac{|b|}{2})^4, & |b| \le 2 \\ b^2, & |b| > 2 \end{cases}$$

Ищем план в классе планов вида $\xi = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ w/2 & 1-w & w/2 \end{pmatrix}$.

Результаты:

Задача решена аналитически.

Оптимальный план

$$\xi^* \approx \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0.32 & 0.36 & 0.32 \end{pmatrix}.$$

Оптимальное значение $\mathcal{R}(b^*,\xi^*) \approx 0.6393$ достигается при

$b^* = \{\pm(2\sqrt{5}-4), \pm\infty\} \approx \{\pm 0.47, \pm\infty\}$.

$m = 3$

$\xi^* = \arg\max_\xi \min_{b \in I} \frac{\min_{c,d,e} \int (x^3+bx^2+cx+d)^2 \xi(dx)}{R(b)}$, где

$$R(b) = \begin{cases} \frac{1}{16}\left(1 + \frac{|b|}{3}\right)^6, & |b| \le 1 \\ \frac{1}{4}\left(\frac{1}{|b|+\sqrt{b^2+3}} + b\right)^2 \left(1 - \frac{1}{(|b|+\sqrt{b^2+3})^2}\right)^2, & |b| > 1 \end{cases}$$

Ищем план в классе планов вида $\xi = \begin{pmatrix} -1 & -t & t & 1 \\ w/2 & \frac{1-w}{2} & \frac{1-w}{2} & w/2 \end{pmatrix}$.

Результаты:

Задача решена численно.

Оптимальный план

$\xi^* \approx \begin{pmatrix} -1 & 0.417 & 0.417 & 1 \\ 0.197 & 0.303 & 0.303 & 0.197 \end{pmatrix}$.

Оптимальное значение $\mathcal{R}(b^*, \xi^*) \approx 0.61788$ достигается при $b \approx \pm 0.550$.

$m = 4$

$\xi^* = \arg\max_\xi \min_{b\in I} \frac{\min_{c,d,e\in\mathbb{R}} \int (x^4+bx^3+cx^2+dx+e)^2 \xi(dx)}{R(b)}$, где

$R(b) = \frac{1}{64}\left(1+\frac{|b|}{4}\right)^8, \quad |b| \le b_0 \approx 0.6863.$

Для случая $|b| > b_0$ получена аппроксимация $R(b)$ многочленами пятой степени.

Ищем план в классе планов вида $\xi = \begin{pmatrix} -1 & -t & 0 & t & 1 \\ \frac{w}{2} & \frac{v}{2} & 1-w-v & \frac{v}{2} & \frac{w}{2} \end{pmatrix}$.

Результаты:

Задача решена численно.

Оптимальный план

$\xi^* \approx \begin{pmatrix} -1 & -0.64 & 0 & 0.64 & 1 \\ 0.07 & 0.13 & 0.6 & 0.13 & 0.07 \end{pmatrix}$.

Оптимальное значение $\mathcal{R}(b^*, \xi^*) \approx 0.6043$ достигается при $b \approx \pm 0.58$.

[Melas V.,Shpilev P. 2012][2]

Пусть $I = [-a,\ a] \subset \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$ — компактное.
Обозначим
$$K(b,h) := \frac{(b^2+h)(1-h)}{R(b)}.$$

Точки и веса максиминно эффективного плана найдены как функции от h^*, где h^* — решение вспомогательной максиминной задачи

$$\max_{0\le h\le \frac{1}{2}} \min_{b\in I} K(b,h).$$

Задача принимает вид

$$\min_{\eta} \max_{0\le h\le 1/2} \int K(b,h)\eta(db), \text{ где}$$

$$\eta = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ a & 1-a \end{pmatrix}, \text{ либо } \eta = \begin{pmatrix} b \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Результаты применения эффективного подхода

$m = 3$

$b_0 = 1$
Задача решена аналитически.
Оптимальное значение
$h^* = -7 + 3\sqrt{6} \approx 0.35,$
достигается при $b = \pm\{-3 + \sqrt{6}\} \approx \pm 0.55.$

Оптимальный план

$$\xi^* \approx \begin{pmatrix} -1 & -0.417 & 0.417 & 1 \\ 0.197 & 0.303 & 0.303 & 0.197 \end{pmatrix}.$$

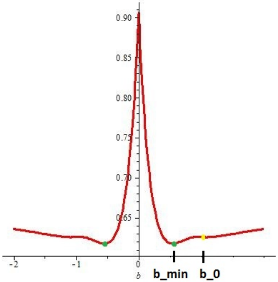


Рис. : $K(b, h^*)$

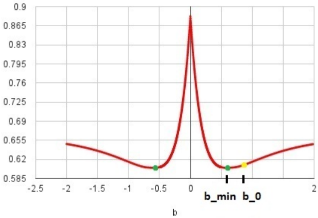
$m = 4$

$b_0 \approx 0.6863$

Задача решена аналитически.
Оптимальное значение
$h^* = -5/2 + 2\sqrt{2} \approx 0.3284,$
достигается при
$b = \pm\{2 - \sqrt{2}\} \approx \pm 0.5857.$

Оптимальный план

$$\xi^* \approx \begin{pmatrix} -1 & -0.643 & 0 & 0.643 & 1 \\ 0.072 & 0.136 & 0.584 & 0.136 & 0.072 \end{pmatrix}.$$



$m = 5$

$R(b) = \frac{1}{256}\left(1 + \frac{|b|}{5}\right)^{10}$, при $|b| \le b_0 \approx 0.5278$.

Для случая $|b| > b_0$ получена аппроксимация $R(b)$ многочленами третьей степени.

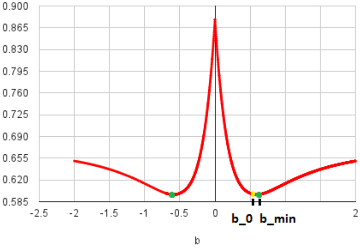


Рис. : $K(b, h^*)$

План ищем в классе планов вида

$$\xi = \begin{pmatrix} -1 & -t & -s & s & t & 1 \\ \frac{w}{2} & \frac{v}{2} & \frac{1}{2} - \frac{w}{2} - \frac{v}{2} & \frac{1}{2} - \frac{w}{2} - \frac{v}{2} & \frac{v}{2} & \frac{w}{2} \end{pmatrix}.$$

Задача решена численно.
Оптимальное значение $h^* \approx 0.3253$, достигается при $b^* \approx \pm 0.5910$.

Оптимальный план

$$\xi^* \approx \begin{pmatrix} -1 & -0.770 & -0.261 & 0.261 & 0.770 & 1 \\ 0.112 & 0.212 & 0.176 & 0.176 & 0.212 & 0.112 \end{pmatrix}.$$

$m = 2$. Несимметричный случай

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \min_{b\in[b_1,b_2]} \frac{\min_c \int (x^2+bx+c)\xi(dx)}{R(b)}.$$

Реализован численный метод для нахождения трехточечного оптимального плана вида $\xi = \begin{pmatrix} -1 & t & 1 \\ w_1 & 1-w_1-w_2 & w_2 \end{pmatrix}$.

Аналитически получено решение для случая $b_1 = 0,\ b_2 = d > 0$, в классе планов вида $\xi = \begin{pmatrix} y & 1 \\ w & 1-w \end{pmatrix}$:

$$y = \begin{cases} -\frac{d}{4+d}, & d \le 2 \\ \frac{1-d}{2d-1}, & d > 2 \end{cases},$$

$$w = 1/2.$$

Итоги

- Для случаев $m = 2, 3, 4$ максиминно эффективные планы найдены аналитически
- Реализован на Maple алгоритм аппроксимации $R(b)$ для любого m кусочно-полиномиальными функциями
- Реализованы численные методы на C++ и Matlab для нахождения оптимальных планов для любого m. Метод продемонстрирован на примере $m = 5$
- Рассмотрен несимметричный случай промежутка b для случая $m = 2$ и аналитически найдено решение в двуточечном классе планов.