Построение и исследование C–оптимальных планов для полиномиальных моделей с нулевым свободным членом

Кароль Петр Андреевич, гр. 14Б02-мм

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели
Научный руководитель: д.ф.-м.н. профессор Мелас В.Б.
Рецензент: к.ф.-м.н. доцент Шпилев П.В.

Санкт-Петербург
2018г.

Введение

1. В работе изучаются два типа C–оптимальных планов: оптимальные планы экстраполяции и оптимальные планы для оценивания производной.
2. Планы экстраполяции для обычных полиномиальных моделей известны с начала 1960х (Карлин, Стадден, 1976)
3. Планы для оценивания производных недавно изучены в работе (Dette, Melas, Pepelyshev,2010)
4. В моей работе эти планы изучаются для полиномиальных моделей без свободного члена
5. Проведено сравнение оптимального плана экстраполяции с D–оптимальным.

Уравнение регрессии:

$$y_j = \theta^T f(t_j) + \varepsilon_j,\ j = 1, \ldots, N.$$

- N — количество проведенных экспериментов;
- $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_n)^T$ — неизвестные параметры;
- $f(x) = (f_1(x), f_2(x), \ldots, f_n(x))^{\mathrm{T}}$ — вектор регрессионных функций;
- $t_1, \ldots, t_m$ — условия проведения эксперимента;
- $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_N$ — ошибки наблюдений;
- $\chi = [a, b]$ — область планирования.

План эксперимента, $C-$ оптимальный план

- Вид плана
$$\xi = \begin{pmatrix} t_1 & \cdots & t_m \\ \omega_1 & \cdots & \omega_m \end{pmatrix}, \ \sum_{i=1}^{m} \omega_i = 1.$$
где m - количество точек плана;
- под информационной матрицей плана ξ будем понимать матрицу:
$$M(\xi) = \int f(t) f^T(t) \xi(dt);$$
- План называется C-оптимальным, если он минимизирует величину $\Phi(\xi)$.

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} c^T M^-(\xi) c, & \text{если } \exists v : c = M(\xi) v, \ \text{(допустимый план)}; \\ \infty, & \text{иначе.} \end{cases}$$

$M^-(\xi)$ — обобщенно-обратная матрица.
Этот план минимизирует дисперсию оценки метода наименьших квадратов величины $\theta^{\mathrm{T}} c$. Он зависит от вектора c.

Теорема Элвинга

Теорема Элвинга (1952)(Dette, Melas, Pepelyshev 2010)

- Если функции $f_1(x), \dots, f_n(x)$ определены и непрерывны на компактном множестве планирования χ;
- ошибки удовлетворяют стандартным условиям;
- существует хотя бы один допустимый план.

тогда существует вектор p и план ξ, которые удовлетворяют условиям:

- $|p^T f(x)| \leq 1, \; x \in \chi$;
- $|p^T f(t_i)| = 1, \; i = 1, 2, \dots, m$ для некоторого $m \leq n$;
- $c = h \sum_{i \in 1:m} f(t_i) \omega_i p^T f(t_i)$.

Такой план является C-оптимальным. t_i, $i = 1, \dots, m$ — его точки. Многочлен $p^T f(x)$ назовем экстремальным многочленом.

Нахождение весов плана экстраполяции

Рассматриваемая регрессионная модель: $f(x) = (x, x^2, \ldots, x^n)^{\mathrm{T}}$.
Множество планирования $\chi = [a, b]$.
План экстраполяции — такой план, в котором
$c = (f_1(z), \ldots, f_n(z))^{\mathrm{T}}$, $z \notin \chi$.
Из теоремы Элвинга было получено, что веса для планов экстраполяции находятся следующим способом:

$$\omega_i = \frac{|L_i(z)|}{\sum_{i=1}^{m} |L_i(z)|}.$$

- $L_i(z) = \dfrac{z \cdot \prod_{i \neq j}(z - t_j)}{t_i \cdot \prod_{i \neq j}(t_i - t_j)}$,
- z — точка, характеризующая вектор c : $c = (z, z^2, \ldots, z^n)^{\mathrm{T}}$.

Опорные точки плана экстраполяции

- В случае $n = 2k + 1$ многочлены Чебышева $T_n(x)$ не имеют свободного члена. Получено, что в оптимальном плане n точек из $n + 1$. Без какой-либо из точек a или b.
- В случае $n = 2k$ получена формула многочлена $P(x)$, удовлетворяющего условиям теоремы Элвинга:

$$P(x) = T_k\left(\left(\left(x - \frac{a+b}{2}\right) \cdot \frac{2}{b-a}\right)^2 \cdot \left(1 + \cos\frac{\pi}{2k}\right) - \cos\frac{\pi}{2k}\right).$$

- Точки плана экстраполяции:

$$t = \left\{ \pm\sqrt{\frac{\cos\frac{i\pi}{k} + \cos\frac{\pi}{2k}}{1 + \cos\frac{\pi}{2k}}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{a+b}{2} \right\}, \quad i = 0, \ldots, k-1.$$

Визуализация экстремального многочлена

Экстремальный многочлен в случае $n = 4$.

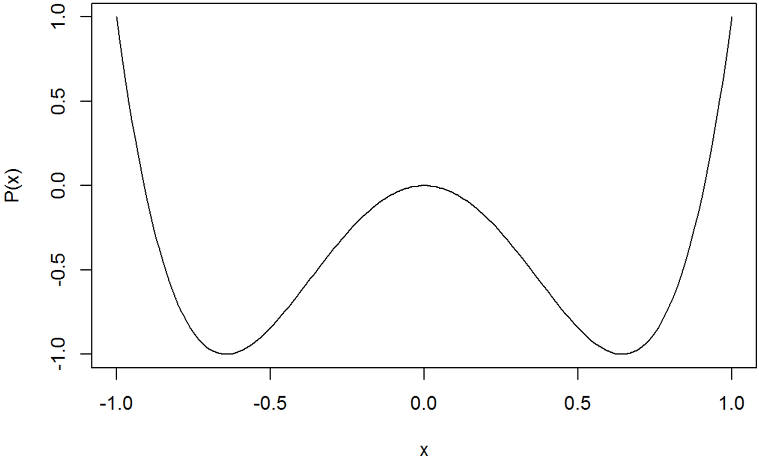


Рис.: Многочлен $P(x)$.

Полученные результаты

Из полученных формул найдем план экстраполяции для модели четвертой степени $f^{\mathrm{T}}(x) = (x, x^2, x^3, x^4)$ на отрезке $\chi = [-1, 1]$ при $z = 2$.

$$\xi = \begin{pmatrix} -1 & -0.6436 & 0.6436 & 1 \\ 0.083 & 0.227 & 0.442 & 0.248 \end{pmatrix}.$$

D-критерий оптимальности имеет вид:

$$\log \det M(\xi) \mapsto \max_{\xi}.$$

Известный результат D–оптимального плана для этой же модели [Wong, 1995]:

$$\xi = \begin{pmatrix} -1 & -0.654 & 0.654 & 1 \\ 0.25 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \end{pmatrix}.$$

Сравнение плана экстраполяции и D-оптимального

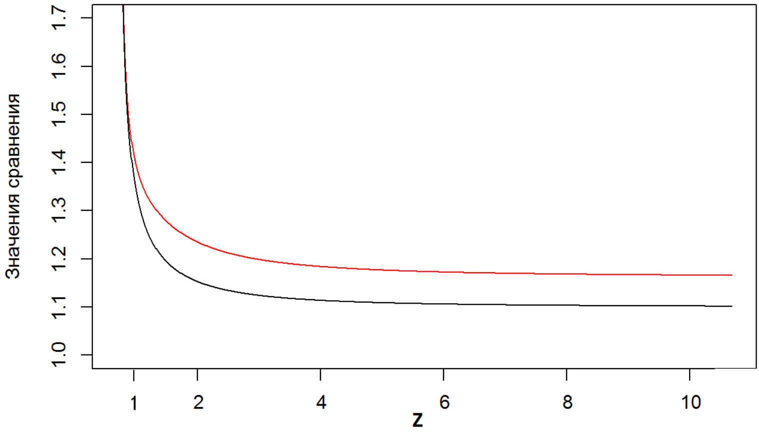
Сравнив найденный план экстраполяции с известным D–оптимальным по D–критерию модели $f(x) = (x, x^2, x^3, x^4)^{\mathrm{T}}$ на отрезке $\chi \in [-1, 1]$ получим:

$$\frac{\sqrt[4]{M(\xi_{dopt})}}{\sqrt[4]{M(\xi_{copt})}} = \sqrt[4]{\frac{5.24}{2.76}} = 1.17.$$

Эти же модели сравнив по C–критерию, при $z = 2,\ c = (2, 4, 8, 16)^{\mathrm{T}}$ получим:

$$\frac{c^T M^{-1}(\xi_{dopt})c}{c^T M^{-1}(\xi_{copt})c} = \frac{6879}{5467} = 1.26.$$

Представлено сравнение плана экстраполяции и D–оптимального плана в случае $n = 4$.
Красная линия — значение отношения величины, сравнивающей планы по C–критерию в зависимости от вектора c. Черная линия — сравнение по D–критерию.



Планы оценивания производной

План оценивания производной называется план:

$$D(\theta^{\mathrm{T}} f'(z)) \mapsto \min_{\xi},$$

То есть $c = (f_1'(z), \ldots, f_n'(z))^{\mathrm{T}}$.
В работе (Dette, Melas, Pepelyshev, 2010) предложена классификация оптимальных планов:

1. чебышевский;
2. получебышевский;
3. нечебышевский.

Для случая $n = 2$ существует только чебышевский тип плана.

$$\text{При } z \in [-0.5, 0.5] \quad \xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0.5 - z & 0.5 + z \end{pmatrix};$$

$$\text{при } z \in \mathbb{R}/[-0.5, 0.5] \quad \xi^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0.5 - \dfrac{1}{4z} & 0.5 + \dfrac{1}{4z} \end{pmatrix}.$$

Случай $n = 3$.

Многочлен удовлетворяющий условиям теоремы Элвинга:
$P(x) = 4x^3 - 3x$. Чебышевский тип плана возможен без одной какой-либо точки экстремума. Он реализован для промежутка:
$\mathbf{R} \backslash ((-0.577, -0.289) \cup (0.289, 0.577))$.
Для оставшихся промежутков был найден план, в котором точки плана: $\pm\frac{1}{2a}$, которые соответствуют многочлену:
$P(x) = 4(ax)^3 - 3(ax)$. План для $z \in (0.289, 0.577)$:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2a} & \frac{1}{2a} \\ \frac{1 - 3/(2\sqrt{3})}{2} & \frac{1 + 3/(2\sqrt{3})}{2} \end{pmatrix}, \; a = \frac{1}{2\sqrt{3}z}.$$

Планы оценивания производной, $n = 4$

Случай $n = 4$.

Многочлены удовлетворяющие условиям теоремы Элвинга:
$P_1(x) = 4x^3 - 3x$. $P_2(x) = (3 + 2\sqrt{2})x^4 - (2 + 2\sqrt{2})x^2$.
Было получено, что чебышевские планы с опорными 4 точками существуют на $z \in (0, 0.235) \cup (0.3023,\ 0.4027) \cup$
$\cup [0.663,\ 0.804] \cup (0.8503, \infty)$.
На остальном промежутке вещественных чисел был численно построен нечебышевский вариант. Пример при $z = 0.5$:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -1 & -0.6113 & 0.8169 \\ 0.0055 & 0.1952 & 0.7993 \end{pmatrix}.$$

В работе.

- Изучены два специальных случая $C-$ оптимальных планов: оптимальные планы экстраполяции и оптимальные планы оценивания производных;
- получены планы экстраполяции для полиномиальной модели без свободного члена для всех n;
- проведено сравнение плана экстраполяции с D–оптимальным планом в случае $n = 4$;
- получены планы оценивания производной на отрезке $[-1, 1]$ в случае малых n.

Список литературы

1. Dette H., Pepelyshev A. Melas V.B. Optimal designs for estimating the slope of a regression // Annals of Statistics. — 2010. — Vol. 44. — P.617-628.

2. Карлин С., Стадден В. Чебышевские системы и их применение в анализе и статистике. — М. : Наука, 1976. — Т.10. — С. 348-362.

3. Wong W., Chang C., Huang M. D-optimal designs for polynomial regression. // Statistica Sinica. — 1995. — no.5. — P.441–458