

Оптимальные планы для оценивания производных в полиномиальной регрессионной модели без свободного члена

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели

Преддипломная практика

Санкт-Петербург, 2020

1/17

Оптимальные планы для оценивания производных

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

Оптимальные планы для оценивания
производных в полиномиальной регрессионной
модели без свободного члена

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели

Преддипломная практика
Санкт-Петербург, 2020

Тема работы — Оптимальные планы для оценивания производных в полиномиальной регрессионной модели без свободного члена. Работа выполнена на кафедре статистического моделирования. Научный руководитель д.ф.-м.н., профессор В. Б. Мелас.

$$y_j = \theta^\top f(x_j) + \varepsilon_j, \quad j = 1 \dots N, x_j \in \mathcal{X}$$

- N — количество экспериментов;
- $f(x)$ — вектор регрессионных функций;
- $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)^\top$ — неизвестные параметры;
- x_1, \dots, x_N — условия проведения эксперимента;
- \mathcal{X} — множество планирования;
- $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N$ — случайные величины, характеризующие ошибки наблюдений.
 - Несмещенные $\mathbb{E}\varepsilon_i = 0$
 - Некоррелированные $\mathbb{E}\varepsilon_i \varepsilon_j = 0$ для $i \neq j$
 - Равноточные $\mathbb{E}\varepsilon_i^2 = \sigma^2$ для всех i

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ Постановка задачи

└ Уравнение регрессии

Уравнение регрессии

$$y_j = \theta^\top f(x_j) + \varepsilon_j, \quad j = 1 \dots N, x_j \in \mathcal{X}$$

- N — количество экспериментов;
- $f(x)$ — вектор регрессионных функций;
- $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)^\top$ — неизвестные параметры;
- x_1, \dots, x_N — условия проведения эксперимента;
- \mathcal{X} — множество планирования;
- $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N$ — случайные величины, характеризующие ошибки наблюдений.
 - Несмещенные $\mathbb{E}\varepsilon_i = 0$
 - Некоррелированные $\mathbb{E}\varepsilon_i \varepsilon_j = 0$ для $i \neq j$
 - Равноточные $\mathbb{E}\varepsilon_i^2 = \sigma^2$ для всех i

Для того, чтобы сформулировать задачу введем несколько определений. Пусть задано уравнение регрессии, с количеством экспериментов N и количеством параметров n на некотором множестве планирования \mathcal{X} с несмещенными (средним ноль) некоррелированными равноточными (с одинаковой дисперсией) ошибками.

Определение

Планом эксперимента называется следующая дискретная вероятностная мера

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_m \\ \omega_1 & \dots & \omega_m \end{pmatrix}, \quad x_i \in \mathcal{X}.$$

Определение

Для плана эксперимента определим его информационную матрицу

$$M(\xi) = \int_{\mathcal{X}} f(x) f^{\top}(x) \xi(dx).$$

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

Постановка задачи

План эксперимента и информационная матрица

План эксперимента и информационная матрица

Определение

Планом эксперимента называется следующая дискретная вероятностная мера

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_m \\ \omega_1 & \dots & \omega_m \end{pmatrix}, \quad x_i \in \mathcal{X}.$$

Определение

Для плана эксперимента определим его информационную матрицу

$$M(\xi) = \int_{\mathcal{X}} f(x) f^{\top}(x) \xi(dx).$$

Для такого уравнения регрессии определим план эксперимента, то есть дискретную вероятностную меру носитель которой сосредоточен на множестве планирования. Далее носитель этой меры будет называться опорными точками плана, а соответствующие вероятности — весами этих опорных точек.

При практическом применении (когда возможно проводить только целое количество измерений) в точке x_i проводят приблизительно N/ω_i измерений так, чтобы всего было проведено N измерений.

Для планов эксперимента также определим информационную матрицу следующим образом.

Определение

C-оптимальным планом эксперимента для данного вектора c называется план минимизирующий функцию Φ

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} c^T M(\xi)^- c, & \text{если } \exists v, \text{ такой, что } c = M(\xi)v \\ +\infty, & \text{иначе} \end{cases},$$

где $M(\xi)^-$ — псевдообратная матрица к информационной матрице плана

- C-оптимальный план минимизирует дисперсию МНК-оценки $\theta^T c$;
- В общем виде задача нахождения таких планов не решена

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

Постановка задачи

C-оптимальный план эксперимента

C-оптимальный план эксперимента

Определение

C-оптимальным планом эксперимента для данного вектора c называется план минимизирующий функцию Φ

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} c^T M(\xi)^- c, & \text{если } \exists v, \text{ такой, что } c = M(\xi)v \\ +\infty, & \text{иначе} \end{cases},$$

где $M(\xi)^-$ — псевдообратная матрица к информационной матрице плана

- C-оптимальный план минимизирует дисперсию МНК-оценки $\theta^T c$;
- В общем виде задача нахождения таких планов не решена

В этой работе изучены c -оптимальные планы, которые определены как минимум показанного здесь функционала для некоторого вектора c .

Важной особенностью таких планов, которая дает им практическую ценность, является то, что они минимизируют оценку по методу наименьших квадратов значения $\theta^T c$.

Явных решений в общем виде для произвольного c не существует, но изучаются некоторые важные частные случаи (например $c = f(z)$). Рассмотрение одного из таких случаев и является одной из целей этой работы.

Определение

Если $c = f'(z) = (f'_1(z), \dots, f'_m(z))^T$ то соответствующий план называется планом для оценки производной в точке z .

- Целью работы является описание оптимальных планов для оценки производной в модели $f(x) = (x, \dots, x^m)$ при носителе $\mathcal{X} = [0, d]$.
- Это имеет практический смысл, если существует априорное знание о значении функции в нулевой точке и эксперимент проводится на положительном отрезке.
- Решение задачи отличается от того, которое получается при носителе, границе которого не принадлежит ноль, которое описано в [Dette et al., 2019].
- Разработать алгоритм численно решающий задачу нахождения c -оптимальных планов для произвольного c .

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ Постановка задачи

└ Постановка задачи

Постановка задачи

Определение

Если $c = f'(z) = (f'_1(z), \dots, f'_m(z))^T$ то соответствующий план называется планом для оценки производной в точке z .

- Целью работы является описание оптимальных планов для оценки производной в модели $f(x) = (x, \dots, x^m)$ при носителе $\mathcal{X} = [0, d]$.
- Это имеет практический смысл, если существует априорное знание о значении функции в нулевой точке и эксперимент проводится на положительном отрезке.
- Решение задачи отличается от того, которое получается при носителе, границе которого не принадлежит ноль, которое описано в [Dette et al., 2019].
- Разработать алгоритм численно решающий задачу нахождения c -оптимальных планов для произвольного c .

Если вектор c составлен из значений производных компонент вектора f в некоторой точке z , то такой план называется планом для оценки производной в точке z .

В силу сказанного на предыдущем слайде свойства c -оптимальных планов такой план минимизирует дисперсию оценки производной функции $\theta^T f(x)$ в точке z .

В работе будет рассматриваться полиномиальная модель без нулевого члена, при этом множество планирования — положительный отрезок с началом в нуле.

Такая модель имеет смысл, когда рассматривается зависимость некоторого значения от параметра, определенного только на положительной полуоси. При этом с известным значением в точке 0. Простым примером такой зависимости может являться зависимость расстояния от времени.

Также целью работы является построение алгоритма для численного нахождения c -оптимальных планов в общем случае.

Теорема

Допустимый план ξ^* с носителем $x_1, \dots, x_m \in \mathcal{X}$ и весами $\omega_1, \dots, \omega_m$ является c -оптимальным тогда и только тогда, когда существует $p \in \mathbb{R}^k$ и константа h такие, что выполняются следующие условия:

$$\left| p^\top f(x_i) \right| = 1 \quad i = 1..m \leq n, \quad (1a)$$

$$\left| p^\top f(x) \right| \leq 1 \quad x \in \mathcal{X}, \quad (1b)$$

$$c = h \sum_{i=1}^m \omega_i f(x_i) p^\top f(x_i). \quad (1c)$$

Кроме того,

$$h^2 = c^\top M^-(\xi^*) c.$$

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ План для оценки производной на положительном отрезке

└ Теорема Элвинга [Dette et al., 2010]

Теорема Элвинга [Dette et al., 2010]

Теорема

Допустимый план ξ^* с носителем $x_1, \dots, x_m \in \mathcal{X}$ и весами $\omega_1, \dots, \omega_m$ является c -оптимальным тогда и только тогда, когда существует $p \in \mathbb{R}^k$ и константа h такие, что выполняются следующие условия:

$$\left| p^\top f(x_i) \right| = 1 \quad i = 1..m \leq n, \quad (1a)$$

$$\left| p^\top f(x) \right| \leq 1 \quad x \in \mathcal{X}, \quad (1b)$$

$$c = h \sum_{i=1}^m \omega_i f(x_i) p^\top f(x_i). \quad (1c)$$

Кроме того,

$$h^2 = c^\top M^-(\xi^*) c.$$

Существует критерий c -оптимальности — теорема Элвинга. Здесь представлена одна из её формулировок.

План является c -оптимальным тогда и только тогда, когда выполнены следующие три условия:

1. Существуют такие параметры p что значение функции $p^\top f(x)$ по модулю равно единице в опорных точках плана
2. При этом на всей области планирования это значение по модулю не превышает единицу
3. Выполнено следующее соотношение связывающее вектор c и веса.

Для набора точек x_1^*, \dots, x_k^* определим множество базисных многочленов

$$L_i(z) = \frac{z \prod_{l \neq i} (z - x_l^*)}{x_i^* \prod_{l \neq i} (x_i^* - x_l^*)}, \quad i = 1, \dots, k.$$

Теорема

Оптимальный план для оценивания производной полиномиальной модели без свободного члена с опорными точками x_1^*, \dots, x_m^* , где $m = n$ или $m = n - 1$ имеет веса вычисленные по следующей формуле:

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

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ План для оценки производной на положительном отрезке

└ Веса у плана для оценки производной [Dette et al., 2019]

Веса у плана для оценки производной [Dette et al., 2019]

Для набора точек x_1^*, \dots, x_k^* определим множество базисных многочленов

$$L_i(z) = \frac{z \prod_{l \neq i} (z - x_l^*)}{x_i^* \prod_{l \neq i} (x_i^* - x_l^*)}, \quad i = 1, \dots, k.$$

Теорема

Оптимальный план для оценивания производной полиномиальной модели без свободного члена с опорными точками x_1^*, \dots, x_m^* , где $m = n$ или $m = n - 1$ имеет веса вычисленные по следующей формуле:

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

Для рассматриваемых в данной работе оптимальных планов для оценки производной в полиномиальной модели без нулевого члена существует результат, описывающий значение весов такого плана.

Для набора точек определим базисные многочлены без нулевого члена на следующим образом. i -ый многочлен равен нулю во всех точках x_1, \dots, x_k кроме точки x_i , в которой равен 1.

С помощью таких многочленов можно явно выразить веса для оптимального плана для оценки производной в точке z с известными опорными точками следующим образом.

С помощью теоремы Элвинга было доказано, что если оптимальный план для оценивания производной с носителем $[0, 1]$ состоит из n точек, то носитель состоит из экстремальных точек следующего многочлена

$$S_n(x) = T_n \left(x \left(1 + \cos \frac{\pi}{2n} \right) - \cos \frac{\pi}{2n} \right),$$

где T_n — многочлен Чебышева первого рода степени n . Таким образом носитель плана находится в точках

$$x_i^* = \frac{\cos \frac{(n-i)\pi}{n} + \cos \frac{\pi}{2n}}{1 + \cos \frac{\pi}{2n}}, \quad i = 1, \dots, n.$$

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ План для оценки производной на положительном отрезке

└ Носитель плана

Носитель плана

С помощью теоремы Элвинга было доказано, что если оптимальный план для оценивания производной с носителем $[0, 1]$ состоит из n точек, то носитель состоит из экстремальных точек следующего многочлена

$$S_n(x) = T_n \left(x \left(1 + \cos \frac{\pi}{2n} \right) - \cos \frac{\pi}{2n} \right),$$

где T_n — многочлен Чебышева первого рода степени n . Таким образом носитель плана находится в точках

$$x_i^* = \frac{\cos \frac{(n-i)\pi}{n} + \cos \frac{\pi}{2n}}{1 + \cos \frac{\pi}{2n}}, \quad i = 1, \dots, n.$$

В работе доказано, что если оптимальный план для оценки производной с областью планирования $[0, 1]$ состоит из n точек (степень многочлена в модели), то его носитель состоит из экстремальных точек следующего многочлена, где T_n — многочлен Чебышёва.

Из свойств многочлена Чебышёва следует, что эти точки могут быть описаны следующим выражением.

- $\{L_i(z)\}_{i=1}^n$ — базисные многочлены, построенные по точкам x_1^*, \dots, x_n^*
- u_1^i, \dots, u_{n-1}^i — корни производной i -го базисного многочлена, упорядоченные по возрастанию

Было доказано, что тогда корни производных базисных многочленов упорядочены следующим образом

$$u_1^n < u_1^{n-1} < \dots < u_1^1 < u_2^n < u_2^{n-1} < \dots < u_{n-1}^1.$$

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ План для оценки производной на положительном отрезке

└ Корни производных базисных многочленов

Корни производных базисных многочленов

- $\{L_i(z)\}_{i=1}^n$ — базисные многочлены, построенные по точкам x_1^*, \dots, x_n^*
 - u_1^i, \dots, u_{n-1}^i — корни производной i -го базисного многочлена, упорядоченные по возрастанию
- Было доказано, что тогда корни производных базисных многочленов упорядочены следующим образом

$$u_1^n < u_1^{n-1} < \dots < u_1^1 < u_2^n < u_2^{n-1} < \dots < u_{n-1}^1.$$

Также в работе показано, что корни производных описанных ранее базисных многочленов L_i упорядочены особым образом: наименьшим является наименьший корень многочлена L'_n , затем идет наименьший корень L'_{n-1} и так до 1. Затем идет вторые по возрастанию корни этих производных и так далее.

Здесь за u_k^i обозначен k -ый по возрастанию корень многочлена L'_i

Оптимальный план на отрезке с началом в нуле для оценки производной

Теорема

План с носителем $\{x_i^*\}_{i=1}^n$ является оптимальным планом для оценивания производной полиномиальной модели без свободного члена в точке z при $\mathcal{X} = [0, 1]$ тогда и только тогда, когда выполняется одно из следующих условий:

- $z \in (-\infty, u_1^n)$
- $z \in (u_i^1, u_{i+1}^n), i = 1, \dots, n-2$
- $z \in (u_{n-1}^1, +\infty)$

10/17

Оптимальные планы для оценивания производных

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ План для оценки производной на положительном отрезке

└ Оптимальный план на отрезке с началом в нуле для оценки производной

Оптимальный план на отрезке с началом в нуле для оценки производной

Теорема

План с носителем $\{x_i^*\}_{i=1}^n$ является оптимальным планом для оценивания производной полиномиальной модели без свободного члена в точке z при $\mathcal{X} = [0, 1]$ тогда и только тогда, когда выполняется одно из следующих условий:

- $z \in (-\infty, u_1^n)$
- $z \in (u_i^1, u_{i+1}^n), i = 1, \dots, n-2$
- $z \in (u_{n-1}^1, +\infty)$

Основным результатом работы является следующая теорема.

План с носителем в экстремальных точках многочлена S_n и весами определенными в ранее приведенной теореме является оптимальным планом для оценки производной полиномиальной модели без нулевого члена с областью планирования $[0, 1]$ тогда и только тогда, когда z находится в одном из следующих промежутков.

То есть оно либо больше любого корня производной базисных многочленов построенных по опорным точкам, либо меньше любого корня, либо находится между i -ым корнем многочлена L'_1 и $i+1$ корнем многочлена L'_n

С помощью этой теоремы найдем планы для оценки производной в случае $f(x) = (x, x^2, x^3)^\top$, $\mathcal{X} = [0, 1]$ и покажем их оптимальность. Опорные точки плана будут совпадать с экстремальными точками многочлена $S_3(x)$:

$$S_3(x) = 4 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right)^3 x^3 - 6\sqrt{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right)^2 x^2 + 6 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right) x,$$

Которыми являются

$$x_1^* = 3\sqrt{3} - 5, \quad x_2^* = \sqrt{3} - 1, \quad x_3^* = 1.$$

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ План для оценки производной на положительном отрезке

└ Пример $m = 3$

Пример $m = 3$

С помощью этой теоремы найдем планы для оценки производной в случае $f(x) = (x, x^2, x^3)^\top$, $\mathcal{X} = [0, 1]$ и покажем их оптимальность. Опорные точки плана будут совпадать с экстремальными точками многочлена $S_3(x)$:

$$S_3(x) = 4 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right)^3 x^3 - 6\sqrt{3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right)^2 x^2 + 6 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right) x,$$

Которыми являются

$$x_1^* = 3\sqrt{3} - 5, \quad x_2^* = \sqrt{3} - 1, \quad x_3^* = 1.$$

Рассмотрим пример применения этой теоремы. Пусть множество планирования – отрезок $[0, 1]$ и моделью является многочлен третьей степени без нулевого члена. Тогда многочлен, определяющие опорные точки выглядит следующим образом. Его максимумы на промежутке $[0, 1]$ показаны ниже, соответственно они и являются опорными точками плана для оценки производной в этой задаче при выполнении условий теоремы на точку z .

Производные базисных многочленов ($m = 3$)

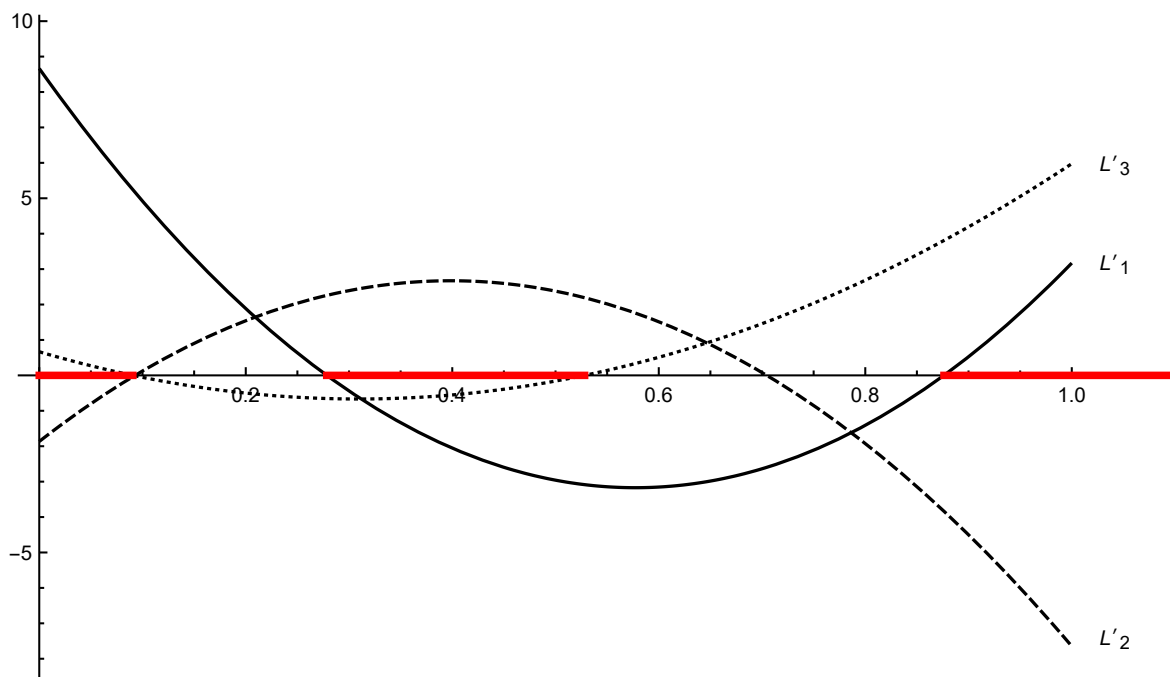


Рис.: Производные базисных многочленов. Красным выделены промежутки, на которых выполняется теорема.

12/17

Оптимальные планы для оценивания производных

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ План для оценки производной на положительном отрезке

└ Производные базисных многочленов ($m = 3$)

Производные базисных многочленов ($m = 3$)

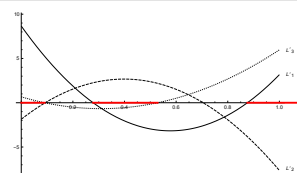


Рис.: Производные базисных многочленов. Красным выделены промежутки, на которых выполняется теорема.

Так как опорные точки уже известны, построим соответствующие базисные многочлены. На представленном графике показаны графики их производных, а красным выделены участки оси, при нахождении z в которых выполняется условие теоремы. На графике видно свойство, определяющее эти промежутки: на них знаки производных базисных чередуются. То есть полученный план является оптимальным планом для оценки производной в точке z , если z меньше 0.1, больше 0.9 или находится на $[0.3, 0.5]$ (все значения приближенные)

- С-оптимальность плана определяется как решение задачи оптимизации
- Теорема Элвинга дает критерий С-оптимальности
- Поэтому численный алгоритм может быть устроен следующим образом:
 - 1 Численно оптимизируем функцию $\Phi(\xi)$ из определения со случайным начальным планом
 - 2 Проверяем выполнение условий теоремы Элвинга
 - Если они выполнены — у нас есть результат
 - Если нет — возвращаемся к п. 1

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ Численное нахождение оптимальных планов

└ Численное нахождение оптимальных планов

Численное нахождение оптимальных планов

- С-оптимальность плана определяется как решение задачи оптимизации
- Теорема Элвинга дает критерий С-оптимальности
- Поэтому численный алгоритм может быть устроен следующим образом:
 - 1 Численно оптимизируем функцию $\Phi(\xi)$ из определения со случайным начальным планом
 - 2 Проверяем выполнение условий теоремы Элвинга
 - Если они выполнены — у нас есть результат
 - Если нет — возвращаемся к п. 1

Далее рассмотрен алгоритм численного нахождения с-оптимальных планов в общем случае для произвольного c . Само определение с-оптимальных планов содержит задачу минимизации, а теорема Элвинга дает критерий того, является ли данный план с-оптимальным. Поэтому очевидным алгоритмом нахождения ответа для данного c будет следующий: найти минимум функции Φ из определения с-оптимальности с помощью подходящего алгоритма оптимизации со случайной начальной точкой, проверить результат с помощью теоремы Элвинга, и, если критерий выполнен, вывести результат, иначе повторить процедуру. Остаются технические вопросы: как оптимизировать функцию $\Phi(\xi)$ и как проверять теорему Элвинга численно.

- У любой матрицы $A^-(x)$ при условии постоянного ранга существует непрерывная вторая производная выражающаяся через производные $A(x)$
- Так как $\Phi(\xi) = c^T M^-(\xi) c$, а ранг $M(\xi)$ зависит только от количества опорных точек, то существуют вторые производные у Φ по опорным точкам и весам
- Поэтому был использован квазиньютоновский алгоритм оптимизации с ограничениями L-BFGS-B

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ Численное нахождение оптимальных планов

└ Оптимизация $\Phi(\xi)$

Оптимизация $\Phi(\xi)$

- У любой матрицы $A^-(x)$ при условии постоянного ранга существует непрерывная вторая производная выражающаяся через производные $A(x)$
- Так как $\Phi(\xi) = c^T M^-(\xi) c$, а ранг $M(\xi)$ зависит только от количества опорных точек, то существуют вторые производные у Φ по опорным точкам и весам
- Поэтому был использован квазиньютоновский алгоритм оптимизации с ограничениями L-BFGS-B

Для оптимизации необходим алгоритм поддерживающий ограничения на область значений (хотя бы типа “коробка”) и который бы сходил-ся с приемлемой скоростью на нашей задаче (потому что возможно, что алгоритм будет множество раз попадать в локальный минимум перед тем, как попадет в глобальный). Существует формула, которая выражает в явном виде производную к псевдообращению матрицы $A(x)$, если её ранг не зависит от x (и далее можно перейти ко второй производной). А функция Φ выражается через псевдообращение информационной матрицы. Поэтому при фиксированном размере плана можно эффективно использовать квазиньютоновские методы оптимизации с ограничениями (здесь использован L-BFGS-B).

Нужно найти такой вектор p , что $|p^\top f(x)| \leq 1$, при этом равенство достигается в опорных точках. Такие p будут решением уравнения

$$\begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ f_1(x_2) & \dots & f_n(x_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & \dots & f_n(x_n) \\ f'_1(x_{i_1}) & \dots & f'_n(x_{i_1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f'_1(x_{i_m}) & \dots & f'_n(x_{i_m}) \end{pmatrix} p = \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

где x_{i_j} — опорные точки не на границе области планирования, а $s_i = \pm 1$.

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ Численное нахождение оптимальных планов

└ Проверка условий теоремы Элвинга

Проверка условий теоремы Элвинга

Нужно найти такой вектор p , что $|p^\top f(x)| \leq 1$, при этом равенство достигается в опорных точках. Такие p будут решением уравнения

$$\begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ f_1(x_2) & \dots & f_n(x_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & \dots & f_n(x_n) \\ f'_1(x_{i_1}) & \dots & f'_n(x_{i_1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f'_1(x_{i_m}) & \dots & f'_n(x_{i_m}) \end{pmatrix} p = \begin{pmatrix} 1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

где x_{i_j} — опорные точки не на границе области планирования, а $s_i = \pm 1$.

Встает вопрос: как проверять существующий критерий оптимальности? По теореме Элвинга должен существовать такой вектор коэффициентов p , что его скалярное произведение с регрессионными функциями по модулю не превосходит единицу, а при этом строгое равенство достигается в точках плана. Такой вектор p будет удовлетворять одной из таких систем уравнений: $p^\top f(x)$ равен плюс или минус единице в данных точках плана (будут перебираться все варианты), а во всех точках плана, лежащих не на границах отрезка, производная функции $p^\top f(x)$ равна нулю, так как в этих точках по определению должен быть локальный экстремум.

Для всех p с нулевой невязкой для предыдущего уравнения и данного плана ξ , проверяем третье условие теоремы Элвинга:

$$c = h \sum_{i=1}^m \omega_i f(x_i) p^\top f(x_i)$$

- Для того, чтобы не вычислять h достаточно проверять коллинеарность векторов
- Все сравнения с точностью до машинного нуля
- Если равенство выполняется, то ξ — c -оптимальный план

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ Численное нахождение оптимальных планов

└ Проверка условий теоремы Элвинга

Проверка условий теоремы Элвинга

Для всех p с нулевой невязкой для предыдущего уравнения и данного плана ξ , проверяем третье условие теоремы Элвинга:

$$c = h \sum_{i=1}^m \omega_i f(x_i) p^\top f(x_i)$$

- Для того, чтобы не вычислять h достаточно проверить коллинеарность векторов
- Все сравнения с точностью до машинного нуля
- Если равенство выполняется, то ξ — c -оптимальный план

Взяв все такие p , невязка которых с предыдущим уравнением равна нулю, можно проверять третье условие теоремы Элвинга, которое выглядит как следующее равенство, в котором известно всё, кроме константы h , нахождение которой можно опустить, так как ясно, что она существует, если вектора в левой и правой части коллинеарны. Произведя все сравнения с точностью до машинного нуля, выполнение этого равенства для уже найденного вектора p и данного плана ξ равносильно тому, что план ξ является c -оптимальным, а иначе — не является. Таким образом процедура нахождения c -оптимальных планов в общем случае построена.

- Описаны оптимальные планы размера n для нахождения производной в полиномиальной модели без свободного члена с $\mathcal{X} = [0, 1]$
- Приведен пример применения этого результата
- Разработан алгоритм численного нахождения s -оптимальных планов в общем случае

2020-05-16

Оптимальные планы для оценивания производных

└ Численное нахождение оптимальных планов

└ Результаты

Результаты

- Описаны оптимальные планы размера n для нахождения производной в полиномиальной модели без свободного члена с $\mathcal{X} = [0, 1]$
- Приведен пример применения этого результата
- Разработан алгоритм численного нахождения s -оптимальных планов в общем случае

В работе на текущий момент были описаны некоторые явные решения для нахождения планов для оценки производной в модели без нулевого члена, рассмотрен пример применения полученных результатов и построен алгоритм нахождения s -оптимальных планов в общем случае.