Построение L–оптимальных планов для моделей без свободного члена

Соколиков Евгений Алексеевич, гр. 19.М03-мм

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель: к. ф.-м. н., доцент П. В. Шпилёв
Рецензент: к. ф.-м. н. А. Н. Пепелышев

Санкт-Петербург
2021г.

- Регрессионная модель: $y_i = \eta(x_j, \theta) + \varepsilon_i,\ i = 1, \ldots, N$, где
  - $\eta(x, \theta)$ — регрессионная функция.
  - $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_m)^{\mathrm{T}}$ - множество неизвестных параметров
  - $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_N$ — независимые случайные величины с $\mathrm{E}(\varepsilon_i) = 0,\ \mathrm{D}(\varepsilon_i) = \sigma^2 > 0,\ i = 1, \ldots, N;$
  - $x_1, \ldots, x_N$ — условия проведения эксперимента, заданные на множестве планирования χ.
- Непрерывный (приближенный) план эксперимента — вероятностная мера

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & \ldots & x_n \\ \omega_1 & \ldots & \omega_n \end{pmatrix},\ x_i \in \chi,\ i = 1, \ldots, n,$$

  где $x_i \neq x_j$ при $i \neq j$, $w_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^{n} w_i = 1$.
- Информационная матрица непрерывного плана:

$$M(\xi, \theta) = \int_{\chi} f(x) f^{\mathrm{T}}(x) d\xi(x)$$

- Критерий L–оптимальности

$$\operatorname{tr} LD(\xi) \to \inf_{\xi \in \Xi_H},$$

где Ξ_H — множество невырожденных приближенных планов.

- Критерий D–оптимальности

$$\det M(\xi) \to \sup_{\xi \in \Xi}$$

- Если $L = \sum_{i=1}^{m} l_i l_i^{\mathrm{T}}$ с заданными векторами $l_i \in \mathbb{R}^m$, то Ξ_L — множество непрерывных планов, для которых линейная комбинация параметров оцениваема.
- Непрерывный план $\eta \in \Xi_L^*$, если $\eta \in \Xi_L$ и для любого непрерывного плана ξ существует предел:

$$\lim_{\alpha \to 0} f^{\mathrm{T}}(t) M^{+}(\xi_\alpha) L M^{+}(\xi_\alpha) f(t) = f^{\mathrm{T}}(t) M^{+}(\eta) L M^{+}(\eta) f(t),$$

где $\xi_\alpha = (1-\alpha)\eta + \alpha\xi,\ \alpha \in [0,1]$.
- Вырожденный план $\xi^* \in \Xi_L$ — L–оптимальный, если

$$\xi^* = \arg\min_{\xi \in \Xi_L} \operatorname{tr} L M^{+}(\xi),$$

где L — фиксированная неотрицательно определенная матрица.

Теорема

Пусть матрица $L \in \mathbb{R}^{(2m+1)\times(2m+1)}$ *— фиксированная неотрицательно определенная матрица. Пусть существует оптимальный план* $\xi^* \in \Xi_L^*$, *тогда:*

1. *план* ξ *принадлежит классу* Ξ_L, *если и только если для всех векторов* l_i *выполнено:* $l_i^{\mathrm{T}} M^{-}(\xi) M(\xi) = l_i^{\mathrm{T}}$, $i = 0, \ldots, 2m$.
2. *план* $\xi^* \in \Xi_L^*$ *является* L*–оптимальным, если и только если выполнено*
$$\max_{t \in \chi} \varphi(t_i, \xi^*) = \operatorname{tr} LM^{+}(\xi^*),$$
где $\varphi(t, \xi) = f^{\mathrm{T}}(t) M^{+}(\xi) L M^{+}(\xi) f(t)$. *Кроме того, равенство* $\varphi(t_i, \xi^*) = \operatorname{tr} LM^{+}(\xi^*)$ *достигается для любых* $t_i \in supp(\xi^*)$.
3. *Пусть* $\xi \in \Xi_L$, *но* $\xi \notin \Xi_L^*$ *и существует интервал* $[x_0, b)$ *и семейство планов* $\{\xi(x)\}$ *такое, что:* $\xi(x) \in \Xi_L^*$ *for* $x \in (x_0, b)$, $\lim_{x \longrightarrow x_0} \xi(x) = \xi$ *и*
$$\lim_{x \longrightarrow x_0} \max_{t \in \chi} \varphi(t, \xi(x)) = \operatorname{tr} LM^{+}(\xi).$$
Тогда план ξ *является* L*–оптимальным.*

Задачей данной работы является нахождение L–оптимальных планов для следующих моделей:

- Тригонометрическая модель без свободного члена:

$$\eta(x,\theta) = \sum_{j=1}^{m} \theta_{2j-1} \sin(jx) + \sum_{j=1}^{m} \theta_{2j} \cos(jx)$$

- Полиномиальная модель без свободного члена:

$$\eta(x,\theta) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j x^j$$

Тригонометрическая модель без свободного члена:

$$\eta(x,\theta) = \sum_{j=1}^{m} \theta_{2j-1} \sin(jx) + \sum_{j=1}^{m} \theta_{2j} \cos(jx).$$

Теорема

Рассмотрим тригонометрическую модель с некоторым фиксированным m, пусть L имеет вид единичной матрицы, интервал планирования $\chi = [-\pi, \pi]$.
Определим план ξ_m следующим образом:

$$\xi_m = \begin{pmatrix} -\frac{(k-1)\pi}{k} & -\frac{(k-3)\pi}{k} & \dots & -\frac{\pi}{k} & \frac{\pi}{k} & \dots & \frac{(k-3)\pi}{k} & \frac{(k-1)\pi}{k} \\ \frac{1}{k} & \frac{1}{k} & \dots & \frac{1}{k} & \frac{1}{k} & \dots & \frac{1}{k} & \frac{1}{k} \end{pmatrix},$$

где $k = 2(m+1)$.
Тогда план ξ_m — L–оптимальный. Кроме того, он будет также и D–оптимальным планом. При этом $\operatorname{tr} LD(\xi_m) = 4m$.

- Модель:

$$\eta(x,\theta) = \theta_1 \sin x + \theta_2 \cos x + \theta_3 \sin 2x + \theta_4 \cos 2x + \theta_5 \sin(3x) + \theta_6 cos(3x)$$

- Матрица $L = I$ — единичная матрица, $\chi = [-\pi, \pi]$ — интервал планирования
- L–оптимальный план данной задачи:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -\frac{7\pi}{8} & -\frac{5\pi}{8} & -\frac{3\pi}{8} & -\frac{\pi}{8} & \frac{\pi}{8} & \frac{3\pi}{8} & \frac{5\pi}{8} & \frac{7\pi}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix}.$$

- Информационная матрица:

$$M(\xi^*) = \mathrm{diag}(0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 0.5)$$

- Дисперсионная матрица:

$$D(\xi^*) = \mathrm{diag}(2, 2, 2, 2, 2, 2)$$

- След:

$$\mathrm{tr}\, LD(\xi^*) = 12$$

- Тригонометрическая модель без свободного члена:

$$\eta(x,\theta) = \sum_{j=1}^{m} \theta_{2j-1} \sin(jx) + \sum_{j=1}^{m} \theta_{2j} \cos(jx), \ m = Nk$$

- Для симметричного приближенного плана ξ применяя соответствующее преобразование $P \in \mathbb{R}^{2m\times 2m}$ информационную матрицу приводим к блочно-диагональному виду:

$$\widetilde{M} = PM(\xi)P = \begin{pmatrix} M_c(\xi) & 0 \\ 0 & M_s(\xi) \end{pmatrix},$$

где

$$M_c(\xi) = \left(\int_{-\pi}^{\pi} \cos(it)\cos(jt) d\xi(t) \right)_{i,j=1}^{m}$$

$$M_s(\xi) = \left(\int_{-\pi}^{\pi} \sin(it)\sin(jt) d\xi(t) \right)_{i,j=1}^{m}$$

- Аналогично приводим матрицу L к блочно-диагональному виду:

$$\tilde{L}^{(k)} = PL^{(k)}P = \begin{pmatrix} L_{\cos}^{(k)} & 0 \\ 0 & L_{\sin}^{(k)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(2Nk)\times(2Nk)}$$

- Численно найдены L–оптимальные планы для тригонометрических моделей без свободного члена с $m = 2$ и $m = 3$ и матрицей $L = L^{(qp)}$, $q \neq p$, следующего вида:

$$L^{(qp)}_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = j = q \text{ или } i = j = p; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

- Доказана теорема о виде L–оптимальных планов для матриц L приводимых к блочно-диагональному виду $\tilde{L}^{(k)}$ с $L^{(k)}_{\cos} = 0$ или $L^{(k)}_{\sin} = 0$.

- Для тригонометрической модели степени $m = Nk,\ k = 1,\ L^{(1)}_{\cos} = 0$, L–оптимальный план будет выглядеть следующим образом:

$$\xi_N^{\sin} = \begin{pmatrix} -t_N & -t_{N-1} & \dots & -t_1 & t_1 & \dots & t_N \\ \omega_N & \omega_{N-1} & \dots & \omega_1 & \omega_1 & \dots & \omega_N \end{pmatrix},$$

где

$$t_1 = x_1, \dots, t_{\frac{N}{2}} = x_{\frac{N}{2}},\ t_{\frac{N}{2}+1} = \pi - x_{\frac{N}{2}}, \dots,\ t_N = \pi - x_1$$

$$\omega_1 = z_1, \dots, \omega_{\frac{N}{2}-1} = z_{\frac{N}{2}-1},\ \omega_{\frac{N}{2}} = z_{\frac{N}{2}},\ \omega_{\frac{N}{2}+1} = z_{\frac{N}{2}}, \dots,\ \omega_N = z_1$$

$\sum\limits_{j=1}^{\frac{N}{2}} z_j = \dfrac{1}{4}$, если N четное, и

$$t_1 = x_1, \dots, t_{\frac{N-1}{2}} = x_{\frac{N-1}{2}},\ t_{\frac{N+1}{2}} = \frac{\pi}{2},\ t_{\frac{N+3}{2}} = \pi - x_{\frac{N-1}{2}}, \dots,$$

$$t_N = \pi - x_1,$$

$$\omega_1 = z_1, \dots, \omega_{\frac{N-1}{2}} = z_{\frac{N-1}{2}},\ \omega_{\frac{N+1}{2}} = \frac{1}{2} - 2\sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} z_j,\ \omega_{\frac{N+3}{2}} = z_{\frac{N-1}{2}}, \dots,$$

$\omega_N = z_1$, если N нечетное. Точки x_i и веса z_i находятся численно.

- Для тригонометрической модели степени $m = Nk,\ k = 1,\ L_{\sin}^{(1)} = 0$, L–оптимальный план будет выглядеть следующим образом:

$$\xi_n^{\cos} = \begin{pmatrix} -\pi & -t_{n-1} & \dots & -t_1 & 0 & t_1 & \dots & t_{n-1} & \pi \\ \omega_n - \alpha & \omega_{n-1} & \dots & \omega_1 & \omega_0 & \omega_1 & \dots & \omega_{n-1} & \alpha \end{pmatrix},$$

где $\alpha \in [0, \omega_n],\ n = N - 1$ и

$$t_0 = 0,\ t_1 = x_1, \dots, t_{\frac{N}{2}} = x_{\frac{N}{2}},\ t_{\frac{N}{2}+1} = \pi - x_{\frac{N}{2}}, \dots,\ t_N = \pi - x_1,$$

$$\omega_0 = \frac{1 - 4\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} z_i}{2}, \omega_1 = z_1, \dots, \omega_{\frac{N}{2}-1} = z_{\frac{N}{2}-1},\ \omega_{\frac{N}{2}} = z_{\frac{N}{2}},$$

$\omega_{\frac{N}{2}+1} = z_{\frac{N}{2}}, \dots,\ \omega_N = z_1,$ если N четное,

$$t_0 = 0,\ t_1 = x_1, \dots, t_{\frac{N-1}{2}} = x_{\frac{N-1}{2}},\ t_{\frac{N+1}{2}} = \frac{\pi}{2},$$

$$t_{\frac{N+3}{2}} = \pi - x_{\frac{N-1}{2}}, \dots,\ t_N = \pi - x_1,$$

$$\omega_0 = z_0,\ \omega_1 = z_1, \dots, \omega_{\frac{N-1}{2}} = z_{\frac{N-1}{2}},$$

$\omega_{\frac{N+1}{2}} = \frac{1}{2} - 2\sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} z_j,\ \omega_{\frac{N+3}{2}} = z_{\frac{N-1}{2}}, \dots,\ \omega_N = z_1,$ если N нечетное.

- Рассмотрим задачу построения L–оптимального плана для оценки коэффициентов $\sin(2x)$ и $\sin(x)$ в тригонометрической модели степени $m = 2$:

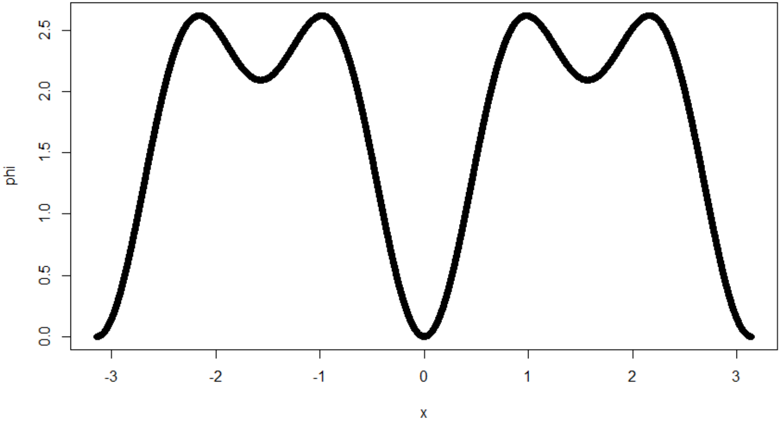
$$\eta(x, \theta) = \theta_1 \sin x + \theta_2 \cos x + \theta_3 \sin 2x + \theta_4 \cos 2x$$

- $L = \mathrm{diag}(1, 0, 1, 0)$
- L–оптимальный план:

$$\xi_2^{\sin} = \begin{pmatrix} -x_2 & -x_1 & x_1 & x_2 \\ z_1 & z_1 & z_1 & z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{11\pi}{16} & -\frac{5\pi}{16} & \frac{5\pi}{16} & \frac{11\pi}{16} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

- След:

$$\mathrm{tr}\, LM^{+}(\xi_2^{\sin}) = 2.618$$



Поведение экстремального полинома $\varphi(x, \xi_2^{\sin})$ для случая $m = 2$ и $L = \operatorname{diag}(1, 0, 1, 0)$

- Рассмотрим теперь задачу построения L–оптимального плана для оценки коэффициентов $\sin(4x)$ и $\sin(2x)$ в тригонометрической модели степени $m = 4$.

$$\eta(x,\theta) = \sum_{j=1}^{4} \theta_{2j-1} \sin(jx) + \sum_{j=1}^{4} \theta_{2j} \cos(jx)$$

- L–оптимальный план:

$$\xi_4^{\sin} = \begin{pmatrix} -t_4 & -t_3 & -t_2 & -t_1 & t_1 & t_2 & t_3 & t_4 \\ \omega_1 & \omega_1 & \omega_1 & \omega_1 & \omega_1 & \omega_1 & \omega_1 & \omega_1 \end{pmatrix},$$

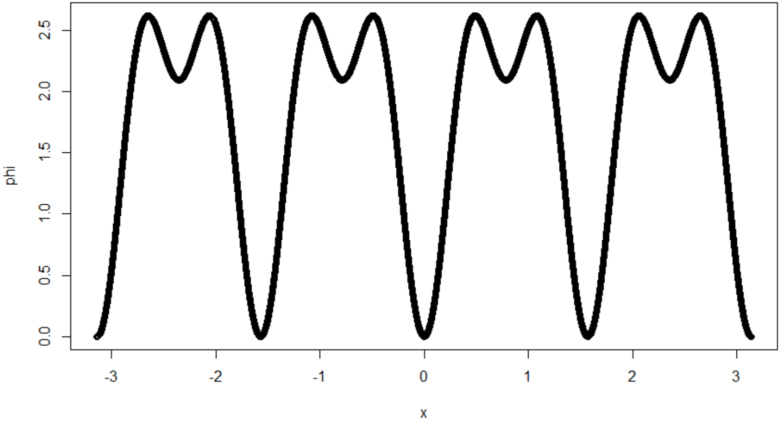
где $t_1 = \frac{x_1}{k} = \frac{5\pi}{32}$, $t_2 = \frac{x_2}{k} = \frac{11\pi}{32}$, $t_3 = t_1 + \frac{\pi}{k} = \frac{21\pi}{32}$, $t_4 = t_2 + \frac{\pi}{k} = \frac{27\pi}{32}$ и $\omega_1 = \frac{z_1}{k} = \frac{1}{8}$.

- То есть

$$\xi_4^{\sin} = \begin{pmatrix} -\frac{27\pi}{32} & -\frac{21\pi}{32} & -\frac{11\pi}{32} & -\frac{5\pi}{32} & \frac{5\pi}{32} & \frac{11\pi}{32} & \frac{21\pi}{32} & \frac{27\pi}{32} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

- След:

$$\operatorname{tr} LM^{+}(\xi_4^{\sin}) = \operatorname{tr} LM^{+}(\xi_2^{\sin}) = 2.618$$



Поведение экстремального полинома $\varphi(x, \xi_4^{\sin})$ для случая $m = 4$ и $L = \mathrm{diag}(0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0)$

- Пусть $k = 3$, тогда $m = Nk = 6$:

$$\xi_6^{\sin} = \begin{pmatrix} -t_6 & -t_5 & \dots & -t_1 & t_1 & \dots & t_6 \\ \omega_1 & \omega_1 & \dots & \omega_1 & \omega_1 & \dots & \omega_1 \end{pmatrix},$$

где

$$t_1 = \frac{5\pi}{48},\ t_2 = \frac{11\pi}{48},\ t_3 = \frac{21\pi}{48},$$
$$t_4 = \frac{27\pi}{48},\ t_5 = \frac{37\pi}{48},\ t_6 = \frac{43\pi}{48},\ \omega_1 = \frac{1}{12}$$

- Пусть $k = 4$, тогда $m = Nk = 8$:

$$\xi_6^{\sin} = \begin{pmatrix} -t_8 & -t_7 & \dots & -t_1 & t_1 & \dots & t_8 \\ \omega_1 & \omega_1 & \dots & \omega_1 & \omega_1 & \dots & \omega_1 \end{pmatrix},$$

где

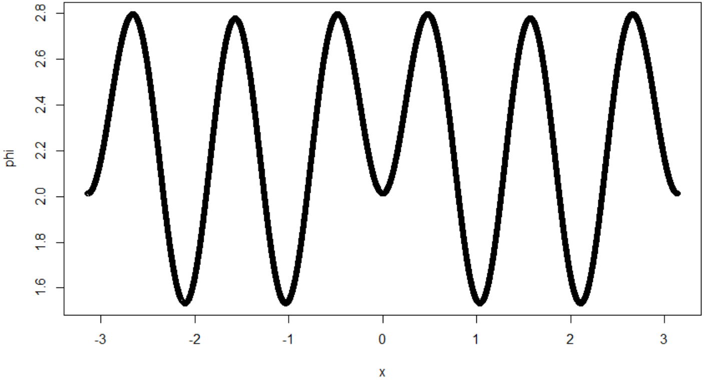
$$t_1 = \frac{5\pi}{64},\ t_2 = \frac{11\pi}{64},\ t_3 = \frac{21\pi}{64},\ t_4 = \frac{27\pi}{64},$$
$$t_5 = \frac{37\pi}{64},\ t_6 = \frac{43\pi}{64},\ t_7 = \frac{53\pi}{64},\ t_8 = \frac{59\pi}{64},\ \omega_1 = \frac{1}{16}$$

- Рассмотрим задачу построения L–оптимального плана для оценки коэффициентов $\cos x$ и $\sin(3x)$ в тригонометрической модели степени $m = 3$.
- $L = L^{(25)} = \mathrm{diag}(0, 1, 0, 0, 1, 0)$
- Численно найдем оптимальный план ξ^*:

$$\xi^* = \begin{pmatrix} -\frac{5\pi}{6} & -\frac{\pi}{2} & -\frac{\pi}{6} & \frac{\pi}{6} & \frac{\pi}{2} & \frac{5\pi}{6} \\ 0.2 & 0.1 & 0.2 & 0.2 & 0.1 & 0.2 \end{pmatrix}$$

- $$\mathrm{tr}\, LM^+(\xi^*) = \frac{25}{9}$$

- Замечание: Обобщение на модели больших степеней для заданных диагональных матриц L проводится аналогично.



Поведение экстремального полинома $\varphi(t)$ для случая $m = 3$ и матрицы $L = \mathrm{diag}(0, 1, 0, 0, 1, 0)$

Сравнение L и D оптимальных планов для полиномиальных моделей без свободного члена

- L–эффективность:

$$eff_L = \frac{\inf_{\xi \in \Xi_H} (\mathrm{tr}\, LD(\xi))}{(\mathrm{tr}\, LD(\xi))}$$

- Таблица эффективности L–оптимальных планов с единичной матрицей L относительно D–оптимальных планов для полиномиальных моделей без свободного члена малых степеней:

m	2	3	4	5	6
eff_L	1.000	0.669	0.821	0.656	0.798

- Вывод: Полученные результаты показывают, что для полиномиальных моделей D–оптимальные планы не совпадают с L–оптимальными при $n > 2$ и $L = I$ и уступают им по эффективности, которая уменьшается с ростом порядка модели.

- Найдены L–оптимальные планы для тригонометрических моделей первой, второй и третьей степеней без свободного члена с единичной матрицей L.
- Сформулирована и доказана теорема о виде L–оптимальных планов для тригонометрических моделей без свободного члена с единичной матрицей L.
- Численно найдены $L^{(qp)}$–оптимальные планы для тригонометрических моделей второй и третьей степеней без свободного члена.
- Построено обобщение L-оптимальных планов для тригонометрических моделей без свободного члена.
- Найдены D и L–оптимальные планы для полиномиальных моделей второй – шестой степеней без свободного члена и проведено сравнение их эффективностей.