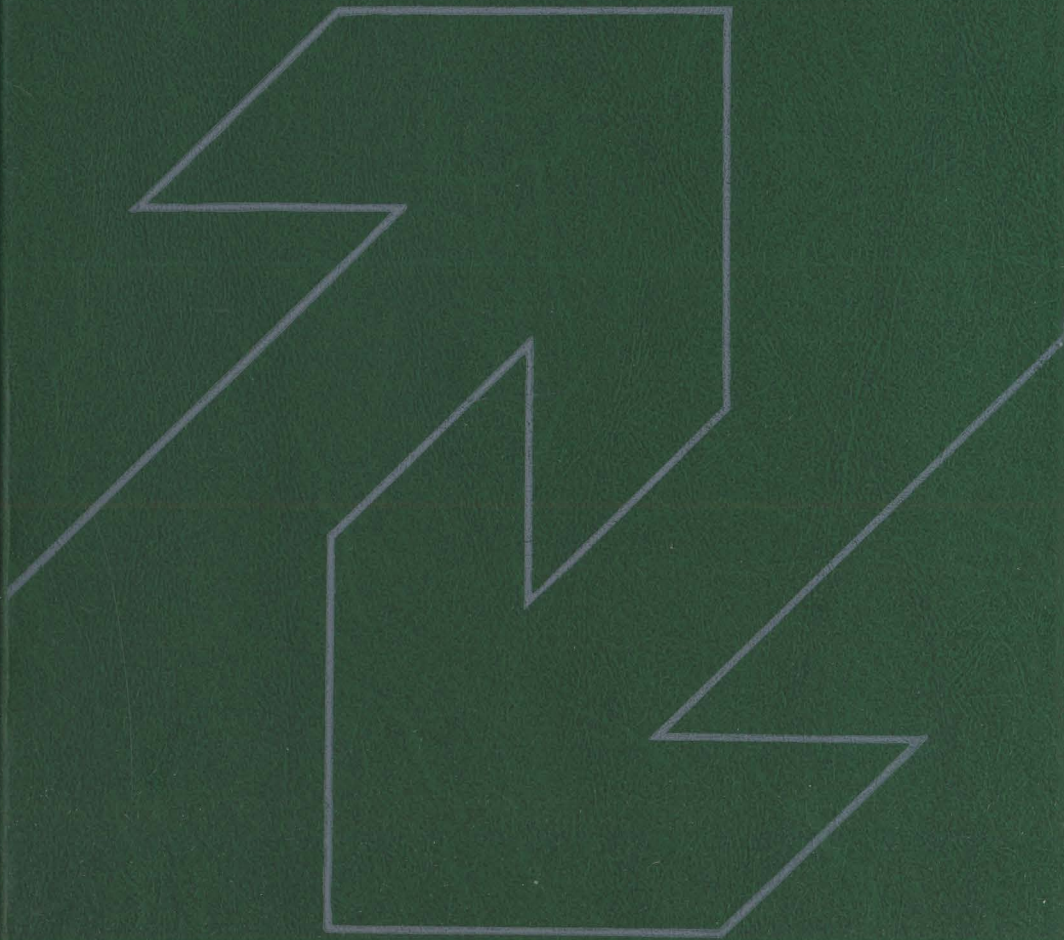


Е.З.ДЕМИДЕНКО • ОПТИМІЗАЦІЯ І РЕГРЕСІЯ

Е.З.ДЕМИДЕНКО

ОПТИМІЗАЦІЯ
І
РЕГРЕСІЯ



Е.З. ДЕМИДЕНКО

ОПТИМИЗАЦИЯ И РЕГРЕССИЯ



МОСКВА "НАУКА"
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1989

ББК 22.18
ДЗО
УДК 519.863

Демиденко Е.З. **Оптимизация и регрессия.** – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. – 296 с. – ISBN 5-02-014093-7.

Рассматриваются три круга проблем, связанных с оптимизацией: существование минимума – построение критериев достижимости инфимума непрерывной функции на некомпактном множестве; глобальность найденного минимума – построение критериев совпадения локального минимума с глобальным; нахождение локального минимума – построение специальных экономных алгоритмов минимизации. Предлагаемые подходы реализуются сначала в задаче минимизации сумм квадратов невязки, возникающей при оценивании параметров нелинейной регрессии, а затем обобщаются на случай минимизации так называемых декомпозиционных функций. Теоретические результаты иллюстрируются примерами.

Для специалистов в области теории управления, оптимизации, моделирования, анализа данных и прикладной статистики.

Табл. 2. Ил. 26. Библиогр. 71 назв.

Рецензент доктор технических наук *В.Я. Катковник*

Д $\frac{1402020000-049}{053(02)-89}$ 135-89

ISBN 5-02-014093-7

© Издательство "Наука".
Главная редакция
физико-математической литературы,
1989

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	5
ВВЕДЕНИЕ	7
Глава 1. КРИТЕРИИ СУЩЕСТВОВАНИЯ	11
§ 1. Критерий достижимости нижней грани функции на некомпактном множестве	12
§ 2. Конусы	21
§ 3. Квазилинейные модели регрессии	34
§ 4. Нелинейные тренды экспоненциального типа	40
§ 5. Производственные функции	51
Глава 2. НЕСУЩЕСТВОВАНИЕ И МНОГОЭКСТРЕМАЛЬНОСТЬ	70
§ 1. Недостижимость нижней грани суммы квадратов на некомпактном множестве	70
§ 2. Многоэкстремальность $Q(\alpha)$ при $t = 1$	75
§ 3. Многоэкстремальность $Q(\alpha)$ при $t > 1$	85
§ 4. О многостационарности математического ожидания суммы квадратов	90
Глава 3. КРИТЕРИИ ЛОКАЛЬНОЙ ВЫПУКЛОСТИ	94
§ 1. Критерий локальной выпуклости суммы квадратов.	95
§ 2. Один общий метод получения числовых неравенств	100
§ 3. Примеры вычисления Q_{LC}	113
§ 4. Сужение априорного множества параметров	124
Глава 4. КРИТЕРИИ ОДНОСТАЦИОНАРНОСТИ И ВЫПУКЛОСТИ	134
§ 1. Критерий локальной одностаціонарности	134
§ 2. Критерии глобальной выпуклости и одностаціонарности	145
§ 3. Декомпозиционные функции. Обобщения.	161
§ 4. Некоторые подходы к построению критериев глобальности в общем случае	178
Глава 5. ОБЛАСТИ ВЫПУКЛОСТИ И ОДНОСТАЦИОНАРНОСТИ СУММЫ КВАДРАТОВ В ПРОСТРАНСТВЕ НАБЛЮДЕНИЙ	185
§ 1. Область выпуклости $Q(\alpha)$	185
§ 2. Критерий одностаціонарности. Метод конусов	203

Глава 6. МИНИМИЗАЦИЯ СУММЫ КВАДРАТОВ, ОСНОВАННАЯ НА МЕТОДЕ НЬЮТОНА-ГАУССА	216
§ 1. Метод Ньютона-Гаусса	216
§ 2. Метод Левенберга–Марквардта	223
§ 3. Метод минимизации суммы квадратов без вычисления производных	228
§ 4. Критерий стационарности и устойчивости	232
Глава 7. СПЕЦИАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ МИНИМИЗАЦИИ И НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ	239
§ 1. Некоторые общие подходы к построению специальных методов	239
§ 2. Минимизация суммы неквадратических невязок линейной модели	250
§ 3. Другие примеры нелинейных регрессий	262
§ 4. Гетероскедастичные регрессии	270
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	291

ПРЕДИСЛОВИЕ

Три кита лежат в основе любой вычислительной задачи: Существование, Единственность, Алгоритм. В этом смысле не составляет исключение и задача безусловной минимизации непрерывной ограниченной функции.

Первый вопрос, на который необходимо ответить, прежде чем начинать поиск минимума, — имеет ли задача минимизации решение?. Другими словами, достигает ли функция своей нижней грани?

Второй вопрос. В общем случае неизвестно, является ли минимизируемая функция одноэкстремальной; поэтому, определив точку локального минимума, необходимо выяснить, единствен ли найденный локальный минимум, и если нет, является ли он точкой глобального минимума функции.

Наконец, третья проблема — построить сходящийся эффективный алгоритм нахождения хотя бы одного локального минимума функции.

До сих пор основные усилия в области оптимизации были направлены на решение третьего круга проблем — построение алгоритмов минимизации. Первые два вопроса фактически не затрагивались в работах по теории оптимизации. При этом проблемы существования и единственности часто снимались рассмотрением класса выпуклых функций. Разумеется, в общем случае трудно дать конструктивный ответ на вопрос существования решения оптимизационной задачи и его единственности. Здесь существует один путь — ограничиться рассмотрением некоторого класса функций. При этом должен быть выдержан извечный математический компромисс: изучаемый класс не должен быть очень широким, чтобы результаты не были тривиальными, в то же время он должен быть и не очень узким, чтобы соответствующее исследование имело практический интерес. В качестве такого класса функций рассматривается класс сумм квадратов отклонений, возникающих при применении метода наименьших квадратов в нелинейной регрессии, и его обобщения — класс так называемых декомпозиционных функций.

В книге не рассматриваются вопросы численного нахождения глобального минимума, этому вопросу посвящена своя, достаточно обширная литература. Практика автора показывает, что в реальных задачах число локальных минимумов, как правило, невелико (от одного до двух-трех). В этом случае не так важно иметь эффективный (и трудоемкий) алгоритм поиска глобального минимума, как критерий, по которому можно определить, является ли найденный локальный минимум глобальным. Именно неуверенность в том, что минимум не является глобальным, заставляет нас продолжать поиск!

Надеюсь, эта книга привлечет внимание специалистов к затрагиваемым, проблемам, окончательное решение которых – дело будущего.

В заключение хочу поблагодарить всех друзей и коллег, принявших участие в обсуждении различных частей книги. Особую благодарность выражаю Б.Т. Поляку, Г.Б. Клейнеру и А.В. Назину.

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена теоретическому анализу задачи оптимизации

$$F(x) \Rightarrow \min, \quad x \in R^m, \quad (1)$$

где $F(x)$ — непрерывная ограниченная функция на R^m , и в частности, задачи минимизации суммы квадратов отклонений (невязок) и ее обобщению — декомпозиционной функции (см. ниже). Эти классы функций служат основным иллюстрирующим материалом предлагаемых общих подходов исследования существования, единственности решения задачи (1) и построения оригинальных алгоритмов минимизации.

Минимизация суммы квадратов возникает, например, в задачах аппроксимации (подгонки), обработки результатов эксперимента, оценивания параметров регрессионных зависимостей и т.п.

Итак, пусть $y_1, y_2, \dots, y_n \in R^1$ — наблюдения или просто числа (данные). Эти наблюдения аппроксимируются соответствующими функциями $f_1(\alpha), f_2(\alpha), \dots, f_n(\alpha)$, где α — неизвестный, в общем случае многомерный параметр, $\alpha \in R^m, m \leq n$. За критерий качества аппроксимации, подгонки берем сумму квадратов невязок

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\alpha))^2. \quad (2)$$

Естественно, лучшая подгонка соответствует минимуму значения критерия (2). Таким образом, приходим к задаче оптимизации

$$Q(\alpha) \Rightarrow \min, \quad \alpha \in R^m. \quad (3)$$

Аппроксимирующие функции $f_i(\alpha)$ считаем непрерывными на R^m , достаточное число раз дифференцируемыми. К задаче (3) можно подойти и со статистических позиций. Допустим, наблюдение y_i представляет собой сумму регулярной детерминированной составляющей $f_i(\alpha)$ и случайной помехи:

$$y_i = f_i(\alpha) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4)$$

где α — неизвестный параметр, $\alpha \in R^m$; ϵ_i — помехи (случайные переменные); ϵ_i имеют нулевое математическое ожидание, постоянную дисперсию и не коррелируют друг с другом. Уравнение (4) можно интерпретировать

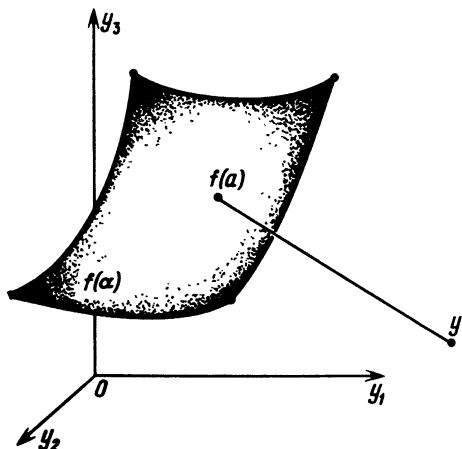


Рис. 1. Геометрия минимизации суммы квадратов; $n = 3, m = 2$

как уравнение регрессии случайной переменной y на факторы x_1, x_2, \dots, x_k , где $y_i = \varphi(x_{i1}, \dots, x_{ik}; \alpha) + \epsilon_i$, i – номер наблюдения, φ – функция регрессии. Обозначая $\varphi(x_{i1}, \dots, x_{ik}; \alpha) = f_i(\alpha)$, приходим к (4). В дальнейшем уравнение (4) будем называть *моделью нелинейной регрессии*. Задача состоит в оценивании неизвестного параметра α . В качестве метода оценивания, как правило, берут *метод наименьших квадратов* (МНК), который

и приводит к задаче (3). При этом значение α , являющееся решением (3), называют *оценкой МНК*, а функции $f_i(\alpha)$ – *функциями регрессии* или *отклика*. Именно этой терминологией мы и будем пользоваться далее. Задача (3) имеет наглядную геометрическую интерпретацию. Система функций $f(\alpha) = (f_1(\alpha), f_2(\alpha), \dots, f_n(\alpha))$ задает отображение пространства R^m в пространство R^n . Образом этого отображения является m -мерная поверхность $f(\alpha)$ в n -мерном пространстве, *поверхность регрессии*. Поэтому задача (3) эквивалентна поиску на поверхности регрессии точки, наименее удаленной от точки $y = (y_1, \dots, y_n) \in R^n$, – см. рис. 1.

Декомпозиционная функция, вводимая в гл. 4, – естественное обобщение суммы квадратов (2). Функция $F(x)$ называется *декомпозиционной*, если она допускает декомпозицию вида: $F(x) = V(f(x))$, где $f: R^m \rightarrow R^n$ – инъективное отображение, $n \geq m$, V – выпуклая функция на R^n .

Для функции (2) $V(e) = V(e_1, e_2, \dots, e_n) = \sum_1^n e_i^2$, где $e_i = y_i - f_i(\alpha)$.

Условно книгу можно разбить на три части.

1. Критерии достижимости нижней грани непрерывной функции на некомпактном множестве. Очевидно, в общем случае минимизируемая функция $F(x)$ может не достигать своей нижней грани на R^m . Таким образом, необходимы критерии проверки корректности задачи минимизации (1), т.е. существования решения этой задачи. Им посвящена первая глава книги. Критерии достижимости нижней грани основаны на понятии так называемой *нижней грани функции $F(x)$ на бесконечности* (§ 1). Предлагаемый подход иллюстрируется примерами конкретных нелинейных регрессий встречающихся в практических исследованиях. Разобранные примеры позволяют сделать следующий общий вывод: оценка МНК существует, если данные и аппроксимирующие функции имеют похожие качественные характеристики (положительность, монотонность, выпуклость и т.п.). Таким образом, критерии достижимости нижней грани суммы квадратов могут в определенной степени служить критериями адекватности модели регрессии.

II. Критерии одноэкстремальности и глобальности. Эта тема – центральная, ей посвящена почти половина книги. Прелюдией к проблеме многоэкстремальности служит вторая глава. В ней показывается, что фактически для любой нелинейной регрессии сумма квадратов может быть многоэкстремальной. Третья и четвертая главы и посвящены собственно проблеме построения конструктивных критериев одноэкстремальности и глобальности. Сначала критерии строятся для суммы квадратов (2). Основная задача ставится следующим образом: построить критерии проверки того, что найденный локальный минимум $Q(\alpha)$ является глобальным. К решению поставленной задачи мы двигаемся постепенно. Сначала строятся критерии локальной выпуклости (положительной определенности гессiana $Q(\alpha)$) – гл. 3. Затем предлагаются критерии одностационарности (существование единственной стационарной точки) – гл. 4, § 1. Наконец, в § 2 четвертой главы решается поставленная задача – соответствующие критерии позволяют выяснить глобальную экстремальность или выпуклость суммы квадратов. Все критерии устроены по следующему единому образцу. В результате аналитического исследования функции регрессии находят некоторые пороговые значения суммы квадратов, которые соответствуют желаемому свойству $Q(\alpha)$. Это свойство (положительная определенность гессiana, локальная одноэкстремальность или выпуклость) выполняется для всех $\alpha \in R^m$, для которых сумма квадратов меньше найденного порогового уровня. Так,

если существует такое $\alpha_0 \in R^m$, что $Q(\alpha_0) < \bar{Q}_E$ – пороговый уровень, соответствующий существованию оценки МНК (нижняя грань суммы квадратов на бесконечности), то нижняя грань суммы квадратов на R^m достигается (задача (3) имеет решение);

если $Q(\alpha_0) < \bar{Q}_{LC}$ – пороговый уровень локальной выпуклости, то в точке α_0 гессиан $Q(\alpha)$ положительно определен;

если $Q(\alpha_0) < \bar{Q}_C$ – пороговый уровень выпуклости, то гессиан $Q(\alpha)$ в точке α_0 положительно определен, а множество уровня $S_C = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) < \bar{Q}_C \}$ выпукло и $Q(\alpha)$ выпукла на S_C .

Всего предлагается шесть подобных уровней, они образуют иерархию (этажерку) уровней. Чем "сильнее" свойство суммы квадратов, тем ниже уровень, тем уже соответствующее множество уровня.

Естественно, для того чтобы использовать предлагаемый подход на практике, необходимо для данной модели регрессии аналитическим путем получить соответствующие пороговые уровни (оценки снизу). Примеры построения подобных оценок для некоторых нелинейных регрессий приводятся в книге, однако автор хотел бы предостеречь читателя от излишнего оптимизма: получение этих оценок – дело не простое, часто выливающееся в самостоятельное исследование. В этом смысле может быть полезен один простой и достаточно общий метод получения и доказательства числовых неравенств, основанный на методе множителей Лагранжа – гл. 3, § 2. В частности, на протяжении всей книги активно используются полученные матричные обобщения некоторых классических неравенств: матричные аналоги неравенства Коши–Буняковского с ограничениями и без ограничений, неравенство Гёльдера.

В конце четвертой главы делается попытка обобщить критерии на более широкие классы функций. Сначала (§ 3) это делается для декомпозиции

онных функций, а затем и для любых функций, для которых известны мажорирующий и/или минорирующий квазивыпуклый функционал.

Пятая глава замыкает изложение вопросов, связанных с многоэкстремальностью суммы квадратов. Для большинства нелинейных регрессий существуют такие "благоприятные" наблюдения (соответствующие области в R^n), при которых $Q(\alpha)$ выпукла или одноэкстремальна. Поиску таких областей и посвящена эта глава.

III. Алгоритмы оптимизации (локальные) — традиционные вопросы теории оптимизации. Этой проблеме посвящены две последние главы. Специфика минимизируемой функции, в данном случае суммы квадратов (2) и декомпозиционной функции, позволяет строить более эффективные и экономные методы минимизации. Классическим методом минимизации суммы квадратов является метод Ньютона—Гаусса. Ему, его различным модификациям и другим вопросам посвящена шестая глава книги.

Учитывая специфику уже самой нелинейной регрессии, можно строить еще более экономные, специальные методы минимизации $Q(\alpha)$. Некоторые общие рекомендации построения таких методов предлагаются в начале седьмой главы. Они иллюстрируются конкретными примерами некоторых моделей регрессии: робастная регрессия — минимизация суммы функций невязок, логлинейная регрессия, производственная функция CES и т.д.

Рассмотрим задачу безусловной оптимизации

$$F(x) \Rightarrow \min_{x \in R^m}$$

Относительно функции F здесь и далее будем предполагать, что она непрерывна и ограничена снизу. Разумеется, на некомпактном множестве (в данном случае R^m) непрерывная функция может не достигать своей нижней грани, поэтому задача минимизации в этом случае может оказаться некорректной. Чтобы избежать этого, часто предполагают, что существует начальное приближение x_0 такое, что множество

$$S_0 = \{ x \in R^m : F(x) \leq F(x_0) \}$$

ограничено (а значит, и компактно в силу непрерывности функции $F(x)$). Очевидно, тогда нижняя грань $F(x)$ на R^m достижима, т.е. существует $x_* \in R^m$, для которого

$$F(x_*) = \inf_{x \in R^m} F(x),$$

причем $x_* \in S_0$.

Остается, однако, открытым вопрос о существовании такого начального приближения x_0 , для которого множество S_0 ограничено. Предлагаемый в этой главе подход основан на вычислении так называемой *нижней грани функции на бесконечности* (этот подход далее обобщается и на случай минимизации функции на части пространства R^m) и иллюстрируется на примере суммы квадратов. Вычисление нижней грани суммы квадратов на бесконечности позволяет строить критерии корректности задачи минимизации на R^m (т.е. достижимости функцией своей нижней грани), другими словами, существования оценки метода наименьших квадратов. Часто исследование минимизируемой функции на бесконечности оказывается конструктивным и позволяет находить удовлетворительные начальные приближения x_0 , для которых *множество уровня* S_0 компактно. В § 1 вводится определение нижней грани функции на бесконечности и доказываются соответствующие результаты. Там же это понятие обобщается на случай минимизации на множестве, не совпадающем со всем пространством. Изложение иллюстрируется примерами нелинейных регрессий

экспоненциального вида. В § 2 собраны воедино некоторые сведения из теории конусов. Соответствующие понятия и факты будут неоднократно использоваться нами по ходу изложения книги, поэтому было решено объединить их в отдельный параграф. В § 3 вопрос о вычислении нижней грани суммы квадратов на бесконечности и построении соответствующих критериев ее достижимости решается для одного, достаточно распространенного на практике класса нелинейных регрессий, так называемых *квазилинейных регрессий* (совпадающих с линейными с точностью до некоторого монотонного преобразования). В § 4 этой главы на основе предлагаемого подхода строятся критерии существования оценки МНК для таких весьма часто встречающихся при экономическом и технико-экономическом моделировании нелинейных регрессий, как модифицированная экспонента, логистическая кривая и др. Последний параграф этой главы посвящен производственным функциям.

§ 1. Критерий достижимости нижней грани функции на некомпактном множестве

Предположим сначала, что область минимизации совпадает со всем пространством. Итак, пусть $F = F(x)$ — ограниченная снизу, непрерывная функция, $x \in R^m$. Не теряя общности можно считать $F(x) \geq 0$. *Нижней гранью функции на бесконечности* назовем¹⁾

$$\bar{F}_E = \lim_{r \rightarrow \infty} \inf_{\|x\| \geq r} F(x). \quad (1.1)$$

Предел (1.1) всегда существует (либо равен $+\infty$), так как функция $\inf F(x), \|x\| \geq r$ является неубывающей для $r > 0$. Соответственно говорим, что $F(x)$ *ограничена снизу на бесконечности числом B* , если $B < \bar{F}_E$.

Теорема 1.1. Пусть $F(x)$ непрерывна на R^m . Если существует (начальное приближение) $x_0 \in R^m$, для которого $F(x_0) < \bar{F}_E$, то нижняя грань функции $F(x)$ на R^m достигается, а множество

$$S_0 = \{x \in R^m : F(x) \leq F(x_0)\}$$

компактно.

Доказательство. Множество S_0 является замкнутым в силу непрерывности функции $F(x)$. Докажем, что оно к тому же и ограничено. Допустим противное, т.е. для некоторой последовательности $x_k \in S_0$, $\|x_k\| \rightarrow \infty$, $k \rightarrow \infty$. Положим $r_k = \max\{\|x_1\|, \dots, \|x_k\|\}$. Тогда в силу неравенства $F(x_k) \leq F(x_0)$

$$\inf_{\|x\| \geq r_k} F(x) \leq F(x_k) \leq F(x_0).$$

Переходя в последнем неравенстве к пределу при $k \rightarrow \infty$, получим $\bar{F}_E \leq F(x_0)$, что противоречит условию теоремы. Таким образом, $F(x)$ на S_0 достигнет своей нижней грани, скажем, в точке x_* . Эта точка является

¹⁾ Индекс E — первая буква от английского Existence — существование (см. следующую теорему).

глобальным минимумом на всем пространстве R^m : при $x \in S_0$ по определению $F(x_*) \leq F(x)$, при $x \in S_0$, т.е. $F(x) > F(x_0)$, имеем $F(x_*) \leq F(x_0) < F(x)$ – теорема доказана.

Для суммы квадратов

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\alpha))^2, \quad \alpha \in R^m,$$

эта теорема переформулируется следующим образом. Найдем для данной модели регрессии нижнюю грань суммы квадратов на бесконечности Q_E . Тогда если существует такое начальное приближение параметров a_0 , для которого $Q(a_0) < Q_E$, то оценка метода наименьших квадратов существует, а множество

$$S_0 = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) \leq Q(a_0) \} \quad (1.2)$$

компактно.

Множества вида (1.2) в дальнейшем будут играть важную роль в исследовании суммы квадратов. Множество

$$S(Q^*) = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) \leq Q^* \}$$

называем *множеством уровня*, а Q^* – *коэффициентом уровня* или просто *уровнем*. Иногда под множеством уровня будем понимать открытое множество $\{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) < Q^* \}$. Каждый раз это будет оговариваться особо.

Проиллюстрируем предлагаемый критерий на экспоненциальном тренде $f_t(\alpha) = \exp(\alpha t)$, $t = 1, \dots, n$. Очевидно, здесь $\bar{Q}_E = \sum_1^n y_t^2$, причем $Q(\alpha) \rightarrow \bar{Q}_E$ при $\alpha \rightarrow -\infty$. Покажем, что если $y_t > 0$, $t = 1, \dots, n$, то оценка МНК существует. Найдем

$$\min_t \frac{\ln y_t}{t} = \frac{\ln y_{t_0}}{t_0} = a_0.$$

Тогда $a_0 t \leq \ln y_t$ для всех $t = 1, \dots, n$ и

$$Q(a_0) = \sum_t (y_t - e^{a_0 t})^2 = \sum_{t \neq t_0} (y_t - e^{a_0 t})^2 \leq \sum_{t \neq t_0} y_t^2 < \bar{Q}_E.$$

По теореме 1.1 оценка МНК существует, а множество (1.2) компактно.

Обратим внимание читателя на то, что теорема 1.1 дает лишь достаточный (не необходимый и достаточный) критерий достижимости инфимума функции. В частности, для экспоненциального тренда условие $y_t > 0$, $t = 1, \dots, n$, может быть, по-видимому, ослаблено. В § 1 гл. 2 предлагается некоторый подход к построению критериев недостижимости инфимума суммы квадратов.

Практическое вычисление нижней грани функции на бесконечности по формуле (1.1) может оказаться не всегда удобным. Покажем, что имеет место следующее равенство:

$$\bar{F}_E = \inf_{\|x_k\| \rightarrow \infty} \lim_k F(x_k). \quad (1.3)$$

Другими словами, нижняя грань функции на бесконечности есть нижняя грань нижних пределов значений функции по всем последовательностям, уходящим в бесконечность. Доказательство несложно. Обозначим правую часть (1.3) че-

рез \bar{F}_E^* . Из определения (1.1) следует существование последовательности $\|x_k\| \rightarrow \infty$ такой, что $F(x_k) \rightarrow \bar{F}_E$ при $k \rightarrow \infty$; поэтому $\bar{F}_E \geq \bar{F}_E^*$. Обратно, пусть $\delta > 0$ – любое. Тогда по определению \bar{F}_E^* найдется такая последовательность $\|x_k\| \uparrow \infty$, что $\lim F(x_k) \leq \bar{F}_E^* + \delta$. Положим в формуле (1.1) $r_k = \|x_k\|$, тогда $\inf_{\|x\| \geq r_k} F(x) \leq F(x_k)$ и $\bar{F}_E \leq \bar{F}_E^* + \delta$. Так как последнее неравенство имеет место для любого $\delta > 0$, получаем $\bar{F}_E \leq \bar{F}_E^*$, что окончательно доказывает (1.3).

Последовательность $\|x_k\| \rightarrow \infty$ называем *асимптотической*, если $F(x_k) \rightarrow \text{const} < \infty, k \rightarrow \infty$. Асимптотическую последовательность называем *главной*, если $F(x_k) \rightarrow \bar{F}_E$.

Процедура нахождения уровня \bar{F}_E с учетом (1.3), таким образом, сводится к нахождению среди всех асимптотических последовательностей (если таковые существуют) таких, которые дают минимальное значение предела $F(x_k)$.

Пусть x_1, x_2, \dots – некоторая последовательность из R^m ; нормируем ее элементы: $v_k = x_k / \|x_k\|, x_k \neq 0, k = 1, 2, \dots$. Поскольку $v_k \in S^m$ – сфера в R^m (компактное множество), последовательность v_k имеет хотя бы одну предельную точку. Обозначим ее v^* и назовем *направлением последовательности*. *Главное асимптотическое направление* v^* соответствует главной асимптотической последовательности x_1, x_2, \dots . Это направление характерно тем, что для любого $\delta > 0$ найдется такое направление v , достаточно близкое к v^* , на котором существует точка x_k : $|F(x_k) - \bar{F}_E| \leq \delta$.

Главная асимптотическая последовательность определяет некоторую (ломаную) кривую, которая, "уходя в бесконечность", дает минимальное предельное значение функции. Иногда подобной кривой служит луч. Таким образом, луч $\lambda v + s$, где $\lambda > 0, \|v\| = 1, v$ – направление луча, s – начало луча, называется *главным асимптотическим*, если

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \inf_{\lambda \geq r} F(\lambda v + s) = \bar{F}_E.$$

После вычисления нижней грани функции на бесконечности имеет смысл найти условия достижимости инфимума. Один способ доказательства достижимости дается теоремой 1.1. Поиск удовлетворительного начального приближения (т.е. такого, что $F(x_0) < \bar{F}_E$) нередко будет основан на исследовании функции вдоль главного асимптотического луча. Пусть, например, $F(\lambda v + s) \rightarrow \bar{F}_E$ при $\lambda \rightarrow \infty$. Тогда, если будет доказано, что последняя сходимость имеет место снизу, то существует λ_0 , т.е. $x_0 = \lambda_0 v + s$, для которого $F(x_0) < \bar{F}_E$, – инфимум достижим. Эта идея будет неоднократно использоваться нами в дальнейшем.

Введенные понятия без изменения переносятся на случай, когда минимизируемой функцией является сумма квадратов отклонений $Q(\alpha)$. Дополнительно дадим следующее определение. Говорим, что нелинейная регрессия имеет *бесконечные хвосты*, если $\|f(\alpha)\| \rightarrow \infty$ при $\|\alpha\| \rightarrow \infty$. Наоборот, если существует такая последовательность $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$, для которой $\|f(\alpha_k)\| \leq d < \infty$, то говорим, что регрессия имеет *конечный хвост*. Легко видеть, что для того чтобы регрессия имела бесконечные хвосты, необходимо и достаточно, чтобы $\bar{Q}_E = \infty$.

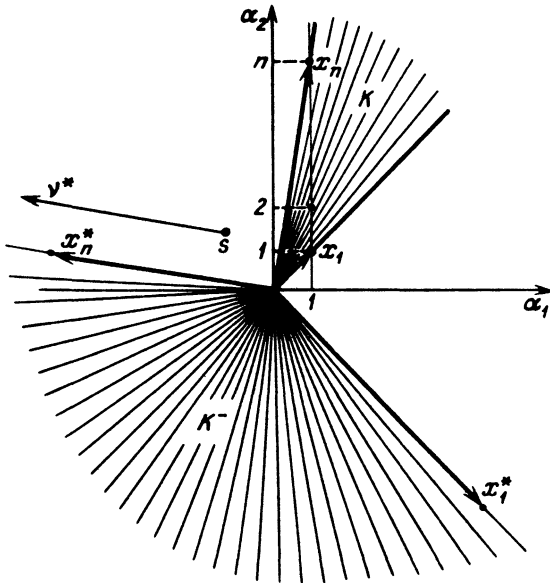


Рис. 2. Асимптотические направления регрессии-экспоненты (1.4)

Проиллюстрируем предлагаемый метод нахождения нижней грани суммы квадратов отклонений на примере регрессии – экспоненты с неизвестным масштабным множителем:

$$f_t(\alpha_1, \alpha_2) = e^{\alpha_1 + \alpha_2 t}, \quad -\infty < \alpha_1, \alpha_2 < \infty. \quad (1.4)$$

Обозначим¹⁾ $x_t = (1, t)^T \in R^2$, $t = 1, \dots, n$. Эти векторы образуют конус K , ребрами которого являются x_1 и x_n . Заметим прежде всего, что эта регрессия имеет конечный хвост, так как при $\alpha_1 = \text{const}, \alpha_2 \rightarrow -\infty$ имеем $f_t(\alpha_1, \alpha_2) \rightarrow 0$, $t = 1, \dots, n$. Значит, $\bar{Q}_E < \infty$. Будем искать асимптотические направления (рис. 2). Пусть $\|\alpha_k\|^2 = \alpha_{1k}^2 + \alpha_{2k}^2 \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow \infty$, $v_k = \alpha_k / \|\alpha_k\|$. Если хотя бы с одним x_t векторы v_k , $k = 1, 2, \dots$, образуют острый угол, то $f_t(\alpha_k) \rightarrow \infty$ и $Q(\alpha_k) \rightarrow \infty$, $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$. Таким образом, множеством асимптотических лучей будет конус²⁾

$$K^- = \{\alpha \in R^2: (\alpha, x_t) \leq 0, \quad t = 1, \dots, n\}.$$

Для лучей, являющихся внутренними для K^- , предельным значением Q является $\sum_1^n y_t^2$, так как для всех $t = 1, \dots, n$ $\exp(\alpha_{1k} + t\alpha_{2k}) \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$. Рассмотрим направления, соответствующие ребрам конуса K^- : $(-n, 1)^T = x_n^*$ и $(1, -1)^T = x_1^*$. Первый луч: $\lambda x_n^* + s$, что соответствует $\alpha_1 = -\lambda n + s_1$,

¹⁾ Здесь и далее "т" в верхнем индексе означает знак транспонирования.

²⁾ Здесь и далее (u, v) обозначает скалярное произведение векторов u и v , эквивалентная запись $v^T u = u^T v$.

$\alpha_2 = \lambda + s_2$, где $s = (s_1, s_2)^T$. Тогда $(\alpha, x_t) = -\lambda n + s_1 + t(\lambda + s_2) = -\lambda(n-t) + s_1 + ts_2$. Для всех $1 \leq t \leq n-1$ $\exp(\alpha_1 + \alpha_2 t) \rightarrow 0$; для $t = n$ имеем $f_n(\alpha_1, \alpha_2) = s_1 + s_2$. Если $y_n > 0$, то начало луча можно подобрать так, чтобы $\exp(s_1 + s_2) = y_n$. Аналогично, если $y_1 > 0$, начало луча с направлением $(1, -1)^T$ можно выбрать так, чтобы сумма $\sum_1^n y_t^2$ сократилась на член y_1^2 .

Итак, окончательно для регрессии (1.4) находим

$$\bar{Q}_E = \begin{cases} \sum_1^n y_t^2, & \text{если } \max(y_1, y_n) \leq 0, \\ \sum_1^n y_t^2 - \max^2(y_1, y_n), & \text{если } \max(y_1, y_n) > 0. \end{cases} \quad (1.5)$$

Найдем теперь условия, при которых оценка МНК существует, т.е. инфимум $Q(\alpha)$ достигается. Очевидно, если все наблюдения неположительны, то оценка МНК не существует, так как для любого $a \in R^2$

$$Q(a) = \sum_1^n (y_t - f_t(a))^2 = \sum_1^n (e^{a_1 + a_2 t} - y_t)^2 > \sum_1^n y_t^2 = \bar{Q}_E = \inf_{\alpha \in R^2} Q(\alpha).$$

Пусть теперь $\max(y_1, y_n) > 0^1$. Докажем, что оценка МНК существует, если выполнено одно из условий: $y_1 > y_n, y_2 > 0$ или $y_n > y_1, y_{n-1} > 0$. Рассмотрим второй случай (первый доказывается аналогично). Тогда, как

следует из (1.5), $\bar{Q}_E = \sum_1^{n-1} y_t^2$, а главным асимптотическим лучом будет $\alpha_1 = -\lambda n + \ln y_n, \alpha_2 = \lambda$, где $\lambda > 0$. Легко видеть, что сумма квадратов как функция λ равна

$$Q(\lambda) = \sum_1^n (y_t - y_n e^{-\lambda(n-t)})^2 \rightarrow \sum_1^{n-1} y_t^2 = \bar{Q}_E, \quad \lambda \rightarrow +\infty.$$

Докажем, что сходимость имеет место снизу. Рассмотрим разность

$$\begin{aligned} Q(\lambda) - \bar{Q}_E &= y_n^2 - 2y_n \sum_1^n y_t e^{-\lambda(n-t)} + y_n^2 \sum_1^n e^{-2\lambda(n-t)} = \\ &= -2y_n \sum_1^{n-1} y_t \omega^{n-t} + y_n^2 \sum_1^{n-1} \omega^{2(n-t)} = \\ &= y_n \omega \left(-2 \sum_1^{n-1} y_t \omega^{n-t-1} + y_n \sum_1^{n-1} \omega^{2(n-t)-1} \right) = y_n \omega P_{2n-3}(\omega), \end{aligned}$$

где $\omega = \exp(-\lambda) > 0, P_{2n-3}(\omega)$ — многочлен от ω степени $2n-3$. Понятно, что знак этой разности при $\lambda \uparrow +\infty$ определяется знаком $P_{2n-3}(\omega)$ при $\omega \downarrow 0$, т.е. знаком $P_{2n-3}(0) = -2y_n y_{n-1} < 0$. Поэтому если $y_n > 0$ и $y_{n-1} > 0$, то сходимость $Q(\lambda)$ к \bar{Q}_E имеет место снизу. А это ведет к существованию такого приближения a_0 , для которого $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. По теореме 1.1 тогда инфимум $Q(\alpha)$ достигается, а множество (1.2) компактно.

¹⁾ Случай, когда одновременно $y_1 \leq 0$ и $y_n \leq 0$, является неестественным в рамках экспоненциальной модели (1.4). Если $\alpha_2 > 0$, то вероятнее $y_n > y_1$, если, наоборот, $\alpha_2 < 0$, то $y_1 > y_n$.

Разберем теперь случай, когда априорное множество параметров Λ не совпадает со всем пространством R^m и, вообще говоря, не является компактным. Итак, пусть $f_i(\alpha)$ — непрерывные функции на некотором подмножестве $\Lambda \subset R^m$ с непустой внутренностью. На практике Λ , как правило, представляет собой обобщенный прямоугольник. Оценкой метода наименьших квадратов нелинейной регрессии называется

$$a = \text{Arg} \min_{\alpha \in \Lambda} Q(\alpha).$$

Дадим условия корректности этой записи аналогично случаю $\Lambda = R^m$. Обозначим $\partial\Lambda$ — границу множества Λ (бесконечные точки принадлежат границе), $\overset{\circ}{\Lambda}$ — его внутренность (по условию $\overset{\circ}{\Lambda} \neq \emptyset$). Как и прежде, изложение будем вести для произвольной ограниченной снизу, непрерывной на Λ функции $F(x)$.

Нижней гранью функции F на границе Λ называем

$$\bar{F}_E = \lim_{k \rightarrow \infty} \inf_{x \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k} F(x), \quad (1.6)$$

где Λ_k — семейство расширяющихся открытых подмножеств Λ , т.е. $\Lambda_k \subset \subset \Lambda_{k+1} \subset \Lambda$, причем $\partial\Lambda_k \cap \partial\Lambda = \emptyset$ и $\bigcup_k \Lambda_k = \Lambda$.

Поясним свойства последовательности подмножеств $\{\Lambda_k\}$. Прежде всего отметим, что если $\Lambda = R^m$, то выбор $\Lambda_k = \{x \in R^m : \|x\| < r_k\}$, $r_k \uparrow \infty$ при $k \rightarrow \infty$ приводит к

$$\overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k = \{x \in R^m : \|x\| \geq r_k\},$$

что соответствует определению (1.1). Нетрудно далее понять, что если Λ_k и Λ имеют общие граничные точки, то эти точки могут не принадлежать множеству $\overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k$. Если к тому же эти точки "отвечают минимуму функции", то (1.6) не будет соответствовать нижней грани функции на Λ . Использование $\overset{\circ}{\Lambda}$ вместо Λ в формуле (1.6) не является принципиальным.

Докажем, что величина (1.6) не зависит от выбора последовательности Λ_k . Пусть $\{\Lambda_k\}$ и $\{\Lambda'_k\}$ — расширяющиеся последовательности множеств, удовлетворяющие перечисленным выше условиям. Предположим, что первая последовательность приводит к значению \bar{F}_E , а вторая — к \bar{F}'_E . Докажем, что $\bar{F}'_E \leq \bar{F}_E$. Для этого достаточно показать, что для любого k

$$\inf_{x \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda'_k} F(x) \leq \lim_{p \rightarrow \infty} \inf_{x \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_p} F(x).$$

А для этого в свою очередь достаточно показать, что для любого k найдется такой номер p , что $\Lambda_k \subset \Lambda'_p$.

Допустим противное. Тогда существует такое Λ_k , что для всех Λ'_p $\Lambda_k \not\subset \Lambda'_p$, т.е. существует такая последовательность x_1, x_2, \dots , что $x_p \in \Lambda_k$, но $x_p \notin \Lambda'_p, p = 1, 2, \dots$. Рассмотрим случай, когда последовательность $\{x_p\}$ ограничена. Тогда можно выбрать сходящуюся подпоследовательность; не теряя общности можно считать, что $x_p \rightarrow x_*$. Покажем, что $x_* \in \overset{\circ}{\Lambda}$. Действительно, в противном случае найдется номер p , для которого $x_* \in \Lambda'_p$. Но поскольку Λ'_p — открытое множество, то x_* содержится в Λ'_p вместе

с некоторой окрестностью, т.е. вместе со всей последовательностью $\{x_p\}$, начиная с некоторого номера, а это противоречит $x_p \in \Lambda_p$ для любого p .

Далее, $x_* \in \Lambda_k$, так как в противном случае $x_* \in \overset{\circ}{\Lambda}$. Таким образом, получили противоречие: x_* является граничной точкой как для Λ , так и для Λ_k .

Если последовательность $\{x_p\}$ не ограничена, то условно можно записать $x_p \rightarrow x_*$, где x_* — бесконечно удаленная точка, и рассуждения повторить. Итак, $\overline{F}'_E \leq \overline{F}_E$. Меняя местами Λ_k и Λ'_p , приходим к неравенству $\overline{F}_E \leq \overline{F}'_E$, откуда $\overline{F}_E = \overline{F}'_E$.

Из доказанной независимости \overline{F}_E от выбора последовательности Λ_k , в частности для разобранный выше случая $\Lambda = R^m$, следует, что в (1.1) не обязательно в качестве Λ_k брать шары $\{\|x\| < r\}$. Эти множества могут иметь произвольную форму, лишь бы они удовлетворяли перечисленным выше условиям.

Нижнюю грань функции на границе аналогично (1.3) можно определить на языке последовательностей. Докажем их эквивалентность, т.е. покажем, что

$$\overline{F}_E = \inf_{x_k \rightarrow x_* \in \partial \Lambda} \lim_k F(x_k). \quad (1.7)$$

В случае неограниченного Λ запись $\|x_k\| \rightarrow \infty$ эквивалентна записи $x_k \rightarrow x_* \in \partial \Lambda$. Обозначим через \overline{F}_E^* правую часть (1.7); покажем, что $\overline{F}_E \geq \overline{F}_E^*$. Пусть $\{\Lambda_k\}$ — расширяющаяся последовательность открытых множеств, не имеющих общих граничных точек с Λ , $\bigcup_k \Lambda_k = \overset{\circ}{\Lambda}$. Для любого k выберем $x_k \in \Lambda \setminus \Lambda_k$ так, чтобы

$$F(x_k) - \inf_{x \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k} F(x) \leq \frac{1}{k}. \quad (1.8)$$

Докажем, что если $x_k \rightarrow x_*$, то x_* — граничная точка Λ . Для этого очевидно достаточно показать, что $x_* \in \overset{\circ}{\Lambda}$. Допустим противное: $x_* \in \Lambda$. Тогда $x_* \in \Lambda_k$ для некоторого k . Но поскольку Λ_k является открытым множеством, оно содержит x_* вместе с некоторой окрестностью $V(x_*)$, т.е. $x_k \in \Lambda_k$, $k \geq K$. Поэтому из (1.8) следует неравенство

$$\begin{aligned} \overline{F}_E &= \lim_{k \rightarrow \infty} \inf_{x \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k} F(x) \geq \\ &\geq \lim_k F(x_k) \geq \inf_{x_k \rightarrow x_* \in \partial \Lambda} \lim_k F(x_k) = \overline{F}_E^*. \end{aligned}$$

Докажем теперь противоположное неравенство, т.е. что $\overline{F}_E \leq \overline{F}_E^*$. Выберем произвольное $\delta > 0$. Для каждого k найдем такой элемент $x_k \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k$, что

$$F(x_k) \leq \inf_{x \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k} F(x) + \delta.$$

Переходя в последнем неравенстве к пределу при $k \rightarrow \infty$, получим

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F(x_k) \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \inf_{x \in \overset{\circ}{\Lambda} \setminus \Lambda_k} F(x) + \delta = \overline{F}_E + \delta.$$

Рассмотрим подпоследовательность $\{x_{k'}\}$ последовательности $\{x_k\}$, для которой $F(x_{k'}) \rightarrow \underline{\lim} F(x_k)$. Эта подпоследовательность может быть либо сходящейся, либо расходящейся. Во втором случае $\|x_{k'}\| \rightarrow \infty$, т.е. можно считать, что $x_{k'} \rightarrow x_* \in \partial\Lambda$. Отсюда следует, что

$$\lim F(x_{k'}) = \underline{\lim} F(x_k) \geq \bar{F}_E^*,$$

а значит, с учетом ранее полученного неравенства получаем $\bar{F}^* \leq \bar{F}_E + \delta$, т.е. $\bar{F}_E^* \leq \bar{F}_E$. Рассмотрим теперь первый случай, пусть $\|x_{k'}\| \leq A < \infty$. Тогда из этой последовательности можно выделить сходящуюся подпоследовательность $\{x_{k''}\}$, причем $x_{k''} \rightarrow x_* \in R^m$. Докажем, что $x_* \in \partial\Lambda$. Действительно, $x_{k''} \in \Lambda$, причем $x_* = \lim x_{k''} \in \bar{\Lambda}$, так как в противном случае не будет выполняться условие совпадения Λ и $\cup \Lambda_k$. Отсюда следует, что $x_* \in \bar{\Lambda}$ и $x_* \in \partial\Lambda$. Поэтому $\lim F(x_{k''}) \geq \bar{F}_E^*$, т.е. опять $\bar{F}_E^* \leq \bar{F}_E + \delta$, а значит, $\bar{F}_E^* \leq \bar{F}_E$.

На основе понятия нижней грани функции на границе Λ может быть построен критерий достижимости нижней грани функции, аналогичный случаю $\Lambda = R^m$.

Теорема 1.2. Пусть $F(x)$ непрерывна на $\Lambda \subset R^m$, $\Lambda \neq \emptyset$. Если существует (начальное приближение) $x_0 \in \Lambda$, для которого $F(x_0) < \bar{F}_E$, где \bar{F}_E — нижняя грань $F(x)$ на границе Λ , то нижняя грань функции F на Λ достигается, множество

$$S_0 = \{x \in \Lambda: F(x) \leq F(x_0)\}$$

компактно, не содержит граничных точек Λ , а точка, доставляющая $\inf F(x)$, $x \in \Lambda$, является внутренней для Λ .

Доказательство. Докажем, что S_0 замкнуто. Пусть дана последовательность точек $x_k \rightarrow x_*$, $x_k \in S_0$. Если $x_* \in \Lambda$, то в силу непрерывности F на Λ $F(x_*) \leq F(x_0)$ и $x_* \in S_0$. Пусть теперь $x_* \in \bar{\Lambda}$, т.е. $x_* \in \partial\Lambda$. Тогда по определению $\underline{\lim} F(x_k) \geq \bar{F}_E$, что противоречит условию $F(x_k) \leq F(x_0) < \bar{F}_E$. Одновременно мы доказали, что точки S_0 — внутренние для Λ . Ограниченность множества S_0 следует из не принадлежности ему граничных (в том числе бесконечно удаленных) точек Λ . Теорема доказана.

Как и в случае $\Lambda = R^m$, можно ввести понятие асимптотической и главной асимптотической кривой (луча).

Проиллюстрируем вышеизложенное примерами. Начнем с экспоненты $f_t(\alpha) = \exp(\alpha t)$. Пусть известно, что $\alpha > 0$, т.е. $\Lambda = \{\alpha > 0\}$. Тогда, как легко

убедиться, $\bar{Q}_E = Q(0) = \sum_1^n (y_t - 1)^2$. Для того чтобы инфимум $Q(\alpha)$ на множестве Λ достигался, т.е. чтобы $\inf_{\alpha > 0} Q(\alpha) \neq Q(0)$, достаточно, чтобы $Q'(0) < 0$. Но $Q'(0) = -2 \sum (y_t - 1)t$, поэтому оценка МНК на Λ существует, если $\sum_1^n y_t t > n(n+1)/2$.

Рассмотрим теперь двухпараметрический пример с моделью (1.4). Будем считать $\alpha_2 > 0$, т.е. $\Lambda = \{(\alpha_1, \alpha_2) \in R^2: -\infty < \alpha_1 < \infty, \alpha_2 > 0\}$. Для простоты предположим, что $y_t > 0$, $t = 1, \dots, n$. Пусть $\alpha_k \rightarrow \alpha_* \in \partial\Lambda$. Если

последовательность $\|\alpha_k\|$ ограничена по k , то $\alpha_{2k} \rightarrow 0$. В таком случае выберем α_1 так, чтобы

$$Q(\alpha_1, 0) = \sum (y_k - e^{\alpha_1})^2 \Rightarrow \min_{\alpha_1}.$$

Очевидно, поскольку $y_t > 0$, решение этой задачи есть $\ln \bar{y}$, где $\bar{y} = \sum y_t/n$.

Тогда $Q(\alpha_k) \rightarrow \sum_1^n (y_t - \bar{y})^2$. Если $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$, то множеством асимптотических лучей служит конус, натянутый на векторы $x_n^* = (-n, 1)^T$ и $x_1^* = (1, -1)^T$ —

см. рис. 2. Наименьшим предельным значением суммы квадратов будет $\sum_1^{n-1} y_t^2$. Окончательно при $\alpha_2 > 0$

$$\bar{Q}_E = \min \left\{ \sum_1^{n-1} y_t^2, \sum_1^n (y_t - \bar{y})^2 \right\}.$$

Найдем условия существования оценки МНК при $\alpha_2 > 0$. Если $\bar{Q}_E = \sum_1^{n-1} y_t^2$, то оценка МНК существует; это следует из доказательства существования этой оценки в случае без ограничений. Пусть $\bar{Q}_E = \sum_1^n (y_t - \bar{y})^2$. Очевидно

$$\frac{\partial Q(\ln \bar{y}, 0)}{\partial \alpha_2} = -2\bar{y} \sum_1^n (y_t - \bar{y}) t.$$

Поэтому если $\sum (y_t - \bar{y}) t > 0$, то $\partial Q(\ln \bar{y}, 0)/\partial \alpha_2 < 0$ и в окрестности точки $(\ln \bar{y}, 0)$ в верхней полуплоскости существуют точки с суммой квадратов, меньшей $Q(\ln \bar{y}, 0) = \bar{Q}_E$, значит, инфимум $Q(\alpha)$ достигим. Условие $\sum (y_t - \bar{y}) t > 0$ можно интерпретировать так: временной ряд наблюдений y_t должен иметь положительный линейный тренд. Другими словами, если ряд y_1, \dots, y_n по методу наименьших квадратов выравнивать по линейной функции $\alpha_1 + \alpha_2 t$, то необходимо, чтобы оценка $\hat{\alpha}_2$ МНК параметра α_2 была положительной. Это следует из того, что знак $\hat{\alpha}_2$ определяется знаком

$$\sum (y_t - \bar{y})(t - \bar{t}) = \sum (y_t - \bar{y}) t - \bar{t} \sum (y_t - \bar{y}) = \sum (y_t - \bar{y}) t,$$

где $\bar{t} = (n+1)/2$.

В заключение остановимся на одном приеме, который иногда позволяет упростить задачу минимизации и, в частности, оценивание параметров. Пусть $F(x)$ — непрерывная, ограниченная снизу функция, $x \in \Lambda \subset R^m$. Задача заключается в нахождении $x_* \in \Lambda$, для которого

$$F(x_*) = \inf_{x \in \Lambda} F(x). \quad (1.9)$$

Переобозначим аргументы функции; другими словами, пусть $g: \Lambda \rightarrow \Lambda' \subset R^m$ и $x' = g(x)$, причем $g(\Lambda) = \Lambda'$. Пусть в новых обозначениях найден минимизатор $x'_* \in \Lambda'$, для которого

$$F(x'_*) = \inf_{x \in \Lambda'} F(x).$$

Тогда для всех $x_* \in g^{-1}(x'_*) \subset \Lambda$ имеет место (1.9) (Λ – прообраз минимизатора x'_*). Этот прием в дальнейшем будем называть *методом переобозначения*. Иногда удачным переобозначением задачу (1.9) можно существенно упростить.

Например, допустим, необходимо оценить методом наименьших квадратов регрессию

$$y_i = \alpha_1 x_{i1} + \alpha_1^2 \alpha_2 x_{i2} + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

где $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2) \in \Lambda = R^2$. При этом оценка МНК есть

$$a = \arg \min_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_1^n (y_i - \alpha_1 x_{i1} - \alpha_1^2 \alpha_2 x_{i2})^2.$$

Переобозначим $\beta_1 = \alpha_1, \beta_2 = \alpha_1^2 \alpha_2$. Нетрудно проверить, что в этом случае Λ есть R^2 с выколотой прямой $\beta_1 = 0$, за исключением точки $(0, 0)$. Таким образом, пользуясь методом переобозначения, приходим к задаче нахождения

$$(b_1, b_2) = \arg \min_{\beta_1, \beta_2} \sum (y_i - \beta_1 x_{i1} - \beta_2 x_{i2})^2,$$

решение которой не представляет труда. К старым переменным переходим по следующему правилу:

$$(a_1, a_2) = \begin{cases} a_1 = b_1, & a_2 = b_2/b_1^2, & \text{если } b_1 \neq 0, \\ a_1 = 0, & a_2 = 0, & \text{если } b_1 = 0. \end{cases}$$

В третьей главе будет особо выделен класс нелинейных регрессий, сводящихся некоторым преобразованием к линейным.

§ 2. Конусы

В этом параграфе мы прервем исследование, связанное с построением критериев достижимости функцией своей нижней грани на некомпактном множестве, и рассмотрим конструкцию "конус", к которой не раз будем прибегать по ходу книги. При этом основное внимание будет сосредоточено *лишь* на малоизвестных и новых понятиях и фактах. Стандартное изложение темы "конусы" можно найти, например, в книгах [8, 9, 54].

Конусом в R^m обычно называется множество векторов K таких, что если $x \in K$, то $\lambda x \in K$ для любого $\lambda \geq 0$. В дальнейшем мы будем рассматривать только выпуклые конусы. Таким образом, по нашему определению множество $K \subset R^m$ называется *конусом (выпуклым)*, если: а) $x \in K$ влечет $\lambda x \in K$ для любого $\lambda \geq 0$; б) $x, y \in K$ влечет $x + y \in K$. Нетрудно проверить, что такое множество действительно является выпуклым.

Конус K называем *замкнутым*, если множество K замкнуто; конус K называем *открытым*, если открыто множество $K \setminus \{0\}$. Как правило, мы будем работать с замкнутыми конусами.

Конус K называется *заостренным*, если он не содержит одновременно $x \in K$ и $-x \in K$ ($x \neq 0$). Незаостренный конус может совпадать с некоторым линейным подпространством R^m или иметь форму клина. Из теоремы об отделимости [8, 9] следует, что если конус K не совпадает со всем

пространством, то найдется такой вектор $v \neq 0$, что K лежит в полупространстве $\{x \in R^m: (v, x) \geq 0\}$. В частности, для заостренного конуса найдется такой вектор v , что для всех $x \in K$ имеет место строгое неравенство $(v, x) > 0$. Вектор v в этом случае называем *направляющей конуса*.

Говорим, что множество K' есть конус с вершиной в точке π , если $K' = K + \pi$, где K — конус. Многие из излагаемых ниже результатов обобщаются на конусы с вершиной. Мы, однако, для простоты ограничимся рассмотрением обычных конусов, т.е. конусов, вершина которых совпадает с началом координат..

Углом между векторами $x, y \in R^m$ ($x \neq 0, y \neq 0$) называем $\arccos(x, y) / (\|x\| \|y\|)$; угол между векторами обозначаем (x, \hat{y}) . По определению $0 \leq (x, \hat{y}) \leq \pi$.

Докажем *неравенство треугольника для углов*: для любых ненулевых $x, y, z \in R^m$

$$(x, \hat{y}) \leq (y, \hat{z}) + (z, \hat{x}), \quad (2.1)$$

причем равенство достигается только для компланарных (лежат в одной плоскости) векторов x, y, z . Допустим сначала, что векторы x, y, z компланарны. Тогда неравенство (2.1) переходит в равенство, если вектор z "лежит между" векторами x и y . Предположим теперь, что векторы не принадлежат одной плоскости. Опустим из конца вектора z перпендикуляр на плоскость, натянутую на векторы x, y . Обозначим проекцию вектора z через u . Тогда $(z - u, x) = (z - u, y) = 0, u = \lambda_1 x + \lambda_2 y$. Докажем, что $(z, \hat{x}) > (u, \hat{x})$ и $(z, \hat{y}) > (u, \hat{y})$. Очевидно, для этого достаточно показать, что $\cos(z, \hat{x}) < \cos(u, \hat{x}); \cos(z, \hat{y}) < \cos(u, \hat{y})$. Не теряя общности можно считать $\|x\| = \|y\| = \|z\| = 1$. Тогда $\cos(z, \hat{x}) < \cos(u, \hat{x})$ эквивалентно $(z, x) < (u, x) / \|u\|$. Но $\|u\| < 1$, поскольку в силу ортогональности $z - u \perp x$ и $\|z - u\| > 0$ получаем

$$\|u\|^2 + \|z - u\|^2 = \|z\|^2 = 1.$$

Наконец,

$$(z, x) = (u, x) + (z - u, x) = (u, x),$$

откуда с учетом $\|u\| < 1$ следует неравенство $(z, x) < (u, x) / \|u\|$. Совершенно аналогично доказывается неравенство $(z, \hat{y}) > (u, \hat{y})$. Итак,

$$(x, \hat{z}) + (z, \hat{y}) > (x, \hat{u}) + (z, \hat{u}) \geq (x, \hat{z}),$$

поскольку векторы x, u, z компланарны, что и требовалось показать.

Говорим, что конус K имеет *угол раствора* γ , если

$$\sup_{x, y \in K} (x, \hat{y}) = \gamma. \quad (2.2)$$

Очевидно, конус будет заостренным тогда и только тогда, когда его угол раствора $0 \leq \gamma < \pi$; K называем *остроугольным*, если $0 \leq \gamma < \pi/2$.

Пусть M — некоторое подмножество из R^m . *Конусной оболочкой* этого множества назовем "минимальный" конус, содержащий M .

Другими словами,

$$\text{Ko}(M) = \bigcap_{M \subset K} K,$$

где $\text{Ko}(M)$ – конусная оболочка множества M ; $\text{Ko}(M)$ есть конус, поскольку пересечение любого числа конусов есть конус. Вместе с тем, если $K \supset M$, то $K \supset \text{Ko}(M)$. Если M – выпуклое множество, то нетрудно показать, что

$$\text{Ko}(M) = \{x \in R^m: x = \lambda x_0, \lambda \geq 0, x_0 \in M\},$$

которое совпадает с множеством лучей, "проходящих" через M .

Наиболее простым примером конусной оболочки служит конус, порожденный конечной системой векторов x_1, \dots, x_k ; очевидно, в этом случае

$$\begin{aligned} \text{Ko}(x_1, \dots, x_k) &= \\ &= \{x \in R^m: x = \gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2 + \dots + \gamma_k x_k; \gamma_1, \dots, \gamma_k \geq 0\}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Конус (2.3) называем *многогранным*. Ниже будет дано другое, эквивалентное определение многогранного конуса как множества решений системы линейных неравенств. В том случае, когда $\{x_i\}$ совпадают с векторами координат R^m , конус (2.3) называем *прямоугольным*.

Введем для остроугольного конуса понятие *сечения*. Итак, пусть K – заостренный конус с углом раствора γ , $0 \leq \gamma < \pi/2$. Выберем любой элемент конуса $z \neq 0$ и любое $\delta > 0$. Построим гиперплоскость $\Pi = \{x \in R^m: (x, z) = \delta\}$. Сечением заостренного конуса K называется $S = \Pi \cap K$. Множество S выпукло как пересечение двух выпуклых множеств, оно лежит в линейном многообразии размерности $m - 1$. Покажем, что конусной оболочкой S является сам конус. Для этого достаточно показать, что если $x \in K$, то найдется такое $\lambda_0 > 0$, что $\lambda_0 x \in S$. Положим $\lambda_0 = \delta / (x, z)$; поскольку в силу остроугольности $(x, z) > 0$, имеем $\lambda_0 > 0$, причем $(\lambda_0 x, z) = \delta$, т.е. $\lambda_0 x \in S$.

Пусть $0 \neq z \in R^m$, $0 \leq \varphi < \pi/2$; *круговым конусом* называется множество

$$K = \{x \in R^m: (x, \hat{z}) \leq \varphi\}. \quad (2.4)$$

Термин "круговой" объясняется тем, что этот конус совпадает с конусной оболочкой $(m - 1)$ -мерного шара (в случае $m = 3$ – круга). Действительно, выберем в качестве секущей гиперплоскости плоскость $\Pi = \{x \in R^m: (z, x) = \delta\}$, $\delta > 0$. Конус (2.4) может быть описан как $\{x: (x, z) \geq \|x\| \|z\| \cos \varphi\}$, поэтому его сечением плоскостью Π будет шар $\{x \in \Pi: \|x\| \leq \delta / \|z\| \cos \varphi\}$ в линейном многообразии Π размерности $m - 1$. Вектор z называем *осью* кругового конуса. Угол $\gamma = 2\varphi$ – угол раствора кругового конуса. Последнее следует из неравенства треугольника для углов: пусть x, y лежат в конусе (2.4), тогда по (2.1)

$$(x, \hat{y}) \leq (x, \hat{z}) + (y, \hat{z}) \leq 2\varphi.$$

Введем следующее определение. Система векторов x_1, x_2, \dots, x_k называется *однонаправленной*, если существует такой вектор $v \in R^m$, что $(v, x_i) > 0$, $i = 1, \dots, k$. Система векторов, не являющаяся однонаправленной, называется *разнонаправленной*; таким образом, x_1, x_2, \dots, x_k разнонаправлены, если для любого $v \in R^m$ найдется такое $1 \leq j \leq k$, что

$(v, x_j) \leq 0$. Векторы x_1, \dots, x_k называем *строго разнонаправленными*, если для любого $v \neq 0$ найдется такое $1 \leq j \leq k$, что $(v, x_j) < 0$. Нетрудно показать, что векторы x_1, \dots, x_k будут однонаправлены, если одна из координат для всех векторов будет либо положительна, либо отрицательна (для доказательства в качестве v необходимо взять единичный вектор, у которого на месте этой координаты стоит соответственно 1 или -1 , а остальные координаты — нули).

Докажем, что x_1, \dots, x_k однонаправлены тогда и только тогда, когда конус (2.3), натянутый на эти векторы, является заостренным. Допустим, (2.3) не является заостренным, т.е. $-u, u \in \text{Ко}(x_1, \dots, x_n)$, $u \neq 0$. Допустим в то же время, что x_1, \dots, x_k однонаправлены, т.е. что при $v \in R^m$ $(v, x_i) > 0$, $i = 1, \dots, k$. Тогда для $x \in \text{Ко}(x_1, \dots, x_k)$

$$(v, x) = \sum \gamma_i (v, x_i) > 0,$$

если $\gamma_i > 0$ хотя бы для одного $i = 1, \dots, n$, т.е. $x \neq 0$. В частности, поскольку $-u, u \in \text{Ко}$, то $(-u, \hat{v}) < \pi/2$, $(u, \hat{v}) < \pi/2$, откуда и из неравенства треугольника для углов следует

$$\pi = (u, \hat{-u}) \leq (u, \hat{v}) + (-u, \hat{v}) < \pi$$

— противоречие. Допустим теперь, что конус $\text{Ко}(x_1, \dots, x_k)$ заострен; докажем, что тогда x_1, \dots, x_k однонаправлены. Как было указано в начале параграфа, для заостренного конуса найдется такое $v \in R^m$, что для любого $u \in \text{Ко}(x_1, \dots, x_n)$ $(u, v) > 0$. В частности, $(x_i, v) > 0$ для всех $i = 1, \dots, k$. А это и означает однонаправленность системы векторов x_1, \dots, x_k .

Можно доказать, что $\text{Ко}(x_1, \dots, x_k)$ совпадает со всем пространством R^m тогда и только тогда, когда векторы x_1, \dots, x_k строго разнонаправлены.

Положительно сопряженным конусом K^+ к конусу K называем множество

$$K^+ = \{x \in R^m: (x, y) \geq 0, \forall y \in K\}.$$

Если K натянут на векторы x_1, \dots, x_k , то конусом, положительно сопряженным к $\text{Ко}(x_1, \dots, x_k)$, будет

$$\text{Ко}^+ = \{x \in R^m: (x, x_i) \geq 0, i = 1, \dots, k\}.$$

Очевидно, $K^{++} \supset K$, причем $K^{++} = K$, если K — замкнутый конус.

Введем понятие *отрицательно сопряженного конуса*¹⁾. Пусть K — конус. *Отрицательно сопряженным* к нему назовем конус

$$K^- = \{x \in R^m: (x, y) \leq 0, \forall y \in K\}.$$

Очевидно, $K^- = -K^+$. Нетрудно проверить, что если $K \subset R^m$ — заостренный конус, то K^- — выпуклое тело, т.е. не лежит в пространстве размер-

¹⁾ В литературе положительно сопряженный конус называют, как правило, двойственным конусом, отрицательно сопряженный конус иногда называют просто сопряженным [8, 9]. Мы отошли несколько от принятой терминологии, потому что в дальнейшем часто будем одновременно использовать пару конструкций K^+ и K^- .

ности, меньшей m . В том случае, когда $K = \text{Co}(x_1, \dots, x_k)$,

$$\text{Co}^- = \{x \in R^m : (x, x_i) \leq 0, i = 1, \dots, k\}.$$

Если x_1, \dots, x_k строго разнонаправлены, Co^- вырождается в $\{0\}$.

Открытым отрицательно сопряженным конусом к конусу K называем множество $\{x : (x, y) < 0, y \in K\}$. Если K — замкнутый конус, то открытый отрицательно сопряженный конус K^- будет открытым множеством. Аналогичным образом определяем *открытый положительно сопряженный конус*. Надеемся, что некоторая возникающая при этом двусмысленность не приведет к недоразумениям.

Изложение теории многогранных конусов можно вести на языке линейных однородных неравенств. Пусть $a_1, a_2, \dots, a_k \in R^m$ (не теряя общности можно считать, что среди этих векторов отсутствуют нулевые). Найдём множество решений системы k линейных неравенств

$$(a_i, x) \leq 0, i = 1, \dots, k. \quad (2.5)$$

Можно показать, что множеством решений этой системы линейных неравенств относительно x является многогранный конус вида (2.3) и наоборот, каждый конус вида (2.3) может быть представлен как множество решений некоторой конечной системы линейных неравенств.

Система неравенств (2.5) имеет нетривиальное решение $x \neq 0$, если векторы a_1, a_2, \dots, a_k однонаправлены. В этом случае множество решений (2.5) есть конус, отрицательно сопряженный к $\text{Co}(a_1, \dots, a_k)$. Если векторы a_1, a_2, \dots, a_k строго разнонаправлены, то (2.5) имеет единственное решение $x = 0$. Для доказательства первого утверждения заметим, что множество решений (2.5) по определению содержит луч $-\lambda v$, где $\lambda \geq 0$, $(v, x_i) > 0$. Отсутствие нетривиального решения (2.5) для строго разнонаправленных векторов означало бы существование $x \neq 0$, $(a_i, x) \leq 0$ — противоречие с условием строгой разнонаправленности.

Перейдем теперь к системам неоднородных линейных неравенств

$$(a_i, x) \leq b_i, i = 1, \dots, k. \quad (2.6)$$

Решением системы (2.6) будет выпуклый многогранник. Докажем, что множество решений (2.6), если оно не пусто, является ограниченным (по норме) тогда и только тогда, когда векторы a_1, a_2, \dots, a_k строго разнонаправлены. Если же a_1, a_2, \dots, a_k однонаправлены, то множество решений (2.6) является неограниченным.

Обозначим множество решений (2.6) через E . Допустим, что $E \neq \emptyset$ и ограничено, пусть $x_0 \in E$. Покажем тогда, что a_1, \dots, a_k строго разнонаправлены. Пусть $v \in R^m$ — любое, $v \neq 0$; для строгой разнонаправленности достаточно доказать, что существует a_i , $(v, a_i) > 0$. Допустим противное: существует такое $v \neq 0$, что $(v, a_i) \leq 0, i = 1, \dots, k$. Тогда луч $x_0 + \lambda v \subset E, \lambda \geq 0$, поскольку

$$(x_0 + \lambda v, a_i) = (x_0, a_i) + \lambda(v, a_i) \leq b_i,$$

— противоречие с ограниченностью E .

Предположим теперь, что E не ограничено. Можно показать, что выпуклое множество не ограничено тогда и только тогда, когда оно содержит луч $x_0 + \lambda v, \lambda \geq 0, x_0 \in E, v \neq 0$ [5]. Это значит, что $(x_0, a_i) + \lambda(v, a_i) \leq$

$\leq b_i$ для любых $\lambda \geq 0, i = 1, \dots, k$. Это в свою очередь возможно только при условии, если $(v, a_i) \leq 0$, а это и значит, что векторы a_1, \dots, a_k не являются строго разнонаправленными.

Теперь обратимся к вопросу о построении отрицательно и положительно сопряженных конусов. Поскольку $K^+ = -K^-$, то достаточно ограничиться построением отрицательно сопряженного конуса. Этот вопрос решим для двух важнейших случаев, когда исходный конус K круговой или многогранной. Итак, пусть K – круговой заостренный конус с осью z :

$$K = \{x \in R^m: (x, \hat{z}) \leq \varphi\},$$

где $0 \leq \varphi < \pi/2$. Тогда отрицательно сопряженным к нему будет опять же круговой конус

$$K^- = \left\{ x \in R^m: (x, \hat{-z}) \leq \frac{\pi}{2} - \varphi \right\}.$$

Действительно, если $x \in K, y \in K^-$, то по неравенству треугольника для углов

$$\begin{aligned} (y, \hat{x}) &\geq (x, \hat{z}) - (y, \hat{z}) = \\ &= \pi - [(x, \hat{-z}) + (y, \hat{z})] \geq \pi - \left(\varphi + \frac{\pi}{2} - \varphi \right) = \frac{\pi}{2}. \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь случай многогранного конуса. Допустим, он задается системой линейных неравенств

$$(a_i, x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, k. \quad (2.7)$$

Тогда положительно сопряженным конусом K^+ будет конус, порожденный векторами a_1, a_2, \dots, a_k . Действительно, для каждого ребра K^+ и для каждого $x \in K$ по определению имеет место (2.7). Отсюда следует, что для любого $a \in K^+$, где $a = \sum \lambda_i a_i, \lambda_i \geq 0$, имеет место $(a, x) \geq 0, x \in K$. Нетрудно доказать обратное – если $a: (a, x) \geq 0$ для всех $x \in K$, то $a = \sum \lambda_i a_i, \lambda_i \geq 0$.

Допустим, что многогранный конус задается в виде конусной оболочки конечного числа векторов $x_1, x_2, \dots, x_k \in R^m$. Будем для простоты считать эту систему векторов однонаправленной, т.е. конус K_0 заостренным ($k > m$). Не теряя общности можно предположить, что каждый из векторов x_i задает ребро конуса (в противном случае этот вектор может быть удален из системы). Переберем все комбинации по $m - 1$ векторов из системы векторов $\{x_i, i = 1, \dots, k\}$; всего таких комбинаций будет C_k^{m-1} . Поскольку x_1, \dots, x_k – ребра конуса, то каждая такая комбинация будет линейно независимой. Найдем единичный вектор, ортогональный этой системе из $m - 1$ векторов; с точностью до направления он будет единственным: e или $-e$. "Знак" выбираем из условия, чтобы со всеми остальными векторами системы x_1, \dots, x_k вектор e (или $-e$) имел неотрицательное скалярное произведение (возможны ситуации, в которых этим свойством не будет обладать ни один из векторов $\pm e$; тогда переходим к следующей комбинации из $m - 1$ векторов). Обозначим этот вектор через a_1 . Построим таким образом k векторов a_1, a_2, \dots, a_k . Конус, натянутый на эти

векторы, и есть положительно сопряженный к исходному. Действительно, по определению $(a_j, x_i) \geq 0, i, j = 1, \dots, k$, значит, $(a_j, x) \geq 0$, где $x \in \text{Ко}(x_1, \dots, x_k)$. Обратно, можно показать, что если $a: (a, x_i) \geq 0, i = 1, \dots, k$, то $a = \sum \lambda_i a_i, \lambda_i \geq 0$.

Вопрос о построении для многогранного конуса положительно сопряженного тесно связан с вопросом о представлении конуса, задаваемого (2.3), в виде системы неравенств (2.7). А именно, задача ставится таким образом: пусть конус K задается в виде (2.3), требуется найти векторы a_1, a_2, \dots, a_k , которые порождают этот конус в смысле системы неравенств (2.7). Другими словами, необходимо представить конечную конусную оболочку в виде системы линейных неравенств. Построим для данной системы векторов x_1, \dots, x_k векторы a_1, \dots, a_k по правилу построения положительно сопряженного конуса, описанному выше. Тогда, как следует из вышеизложенного,

$$\text{Ко}(x_1, \dots, x_k) = \{x \in R^m: (a_i, x) \geq 0, i = 1, \dots, k\},$$

что и требовалось установить.

Проиллюстрируем изложение примерами конусов, которые будут неоднократно использоваться нами в дальнейшем. Допустим, конус K в R^m задается системой n неравенств

$$u_1 \geq 0, u_2 - u_1 \geq 0, \dots, u_n - u_{n-1} \geq 0. \tag{2.8}$$

Требуется найти конус, положительно сопряженный к K , и выразить его также в терминах неравенств. Введем обозначения:

$$r_1 = (1, 0, 0, \dots, 0),$$

$$r_2 = (-1, 1, 0, \dots, 0),$$

$$r_3 = (0, -1, 1, 0, \dots, 0),$$

.....

$$r_n = (0, \dots, 0, -1, 1).$$

Тогда конус, задаваемый системой неравенств (2.8), записывается в виде $K = \{u \in R^m: (u, r_i) \geq 0, i = 1, \dots, n\}$. Положительно сопряженным конусом к K будет конус, натянутый на векторы r_1, \dots, r_n . Выразим его в виде линейных неравенств. Рассмотрим систему из $n - 1$ векторов (r_2, \dots, r_n) . Ортогональным вектором к этой системе будет $\pm(1, \dots, 1)$. Берем знак $+$ из условия неотрицательности скалярного произведения с r_1 . Таким образом, $a_1 = (1, \dots, 1)$. Затем рассматриваем следующую систему (r_1, r_3, \dots, r_n) . Ортогональным вектором для этой системы будет $a_2 = (0, 1, \dots, 1)$, для следующей $a_3 = (0, 0, 1, \dots, 1)$ и т.д. Таким образом, положительно сопряженным конусом к (2.8) будет конус, задаваемый следующей системой линейных неравенств:

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n \geq 0,$$

$$x_2 + \dots + x_n \geq 0,$$

.....

$$x_n \geq 0.$$

Очевидно, отрицательно сопряженный конус задается противоположной системой неравенств (знаки \geq необходимо заменить на знаки \leq).

Теперь обратимся к другой задаче, которая неоднократно будет встречаться нам на протяжении книги. Часто данный заостренный конус необходимо аппроксимировать "сверху" круговым конусом. В этом случае конус K называем *описанным круговым конусом* K_s . Более точно, круговой (замкнутый) конус K_s называем *описанным вокруг заостренного замкнутого конуса* K , если $K_s \supset K$, причем K_s имеет минимальный угол раствора. Как будет показано далее, задача построения для данного заостренного конуса описанного кругового сводится к задаче построения для данного ограниченного множества $E \subset R^n$ описанной сферы, которую мы и рассмотрим.

Итак, пусть $E \subset R^n$ – некоторое ограниченное множество,

$$\sup_{u, v \in E} \|u - v\| = d < \infty$$

d – диаметр множества. *Центром* ограниченного множества E называем $c_E \in R^n$, для которого функция от u_0

$$D(u_0) = \sup_{u \in E} \|u - u_0\| \tag{2.9}$$

достигает своей нижней грани на R^n (очевидно, c_E – центр описанной сферы). Определение центра множества корректно, поскольку нетрудно показать, что $D(u_0) \rightarrow \infty$ при $\|u_0\| \rightarrow \infty$ и $D(u_0)$ – непрерывная функция $u_0 \in R^n$. Докажем, что для любого ограниченного множества существует единственный центр. Прежде всего докажем, что функция (2.9) является выпуклой на R^n . Для этого заметим, что для любых $u, u_0^1, u_0^2 \in R^n$, $0 \leq \lambda \leq 1$

$$\begin{aligned} \|u - \lambda u_0^1 - (1 - \lambda)u_0^2\| &= \|\lambda(u - u_0^1) + (1 - \lambda)(u - u_0^2)\| \leq \\ &\leq \|\lambda(u - u_0^1)\| + \|(1 - \lambda)(u - u_0^2)\| = \\ &= \lambda \|u - u_0^1\| + (1 - \lambda) \|u - u_0^2\|. \end{aligned}$$

Используем далее неравенство

$$\max_{e \in E} (f_1(e) + f_2(e)) \leq \max_{e \in E} f_1(e) + \max_{e \in E} f_2(e),$$

где E – компактное множество в R^n , f_1, f_2 – действительные непрерывные функции на E , причем знак неравенства заменяется на знак равенства тогда и только тогда, когда существует e_* :

$$f_1(e_*) = \max_{e \in E} f_1(e), \quad f_2(e_*) = \max_{e \in E} f_2(e).$$

Далее заметим, что в рамках нашей задачи для простоты можно считать ограниченное множество E замкнутым (т.е. компактом). Пусть u_0^1 ,

$u_0^2 \in R^n$, $0 \leq \lambda \leq 1$, тогда

$$\begin{aligned} D(\lambda u_0^1 + (1 - \lambda) u_0^2) &= \max_{u \in E} \|u - \lambda u_0^1 - (1 - \lambda) u_0^2\| \leq \\ &\leq \lambda \max_{u \in E} \|u - u_0^1\| + (1 - \lambda) \max_{u \in E} \|u - u_0^2\| = \\ &= \lambda D(u_0^1) + (1 - \lambda) D(u_0^2), \end{aligned}$$

что доказывает выпуклость функции $D(u_0)$. Докажем теперь единственность центра множества E . Допустим, он неединствен, т.е. существуют два центра $u_*^1 \neq u_*^2$,

$$D(u_*^1) = D(u_*^2) = \min_{u_0 \in R^n} D(u_0).$$

Нетрудно видеть, что тогда в силу выпуклости функции D для всех $0 \leq \lambda \leq 1$ будем иметь $D(\lambda u_*^1 + (1 - \lambda) u_*^2) = D(u_*^1)$. Но последнее неравенство может превратиться в равенство, только если $u_*^1 = u_*^2$, — противоречие, единственность центра ограниченного множества доказана.

Из неравенства Юнга [20, с. 92] следует, что если c_E — центр множества E с диаметром d , то

$$\|u - c_E\| \leq d \sqrt{\frac{n}{2(n+1)}}, \quad u \in E.$$

При фиксированном d это неравенство достигается на множестве, совпадающем с правильным тетраэдром с длиной ребра d . Правая часть неравенства есть радиус сферы в R^n , описанной вокруг этого тетраэдра. Замечательно, что радиус сферы при $n \rightarrow \infty$ стремится к $d / \sqrt{2}$.

По аналогии с центром ограниченного множества введем определение оси заостренного конуса $K \subset R^n$. Для заданного $k_0 \in R^n$, $k_0 \neq 0$ положим

$$C(k_0) = \inf_{k \in K} \cos(\hat{k}, k_0).$$

Осью конуса K называем луч λk_* , $\lambda > 0$, где $k_* \neq 0$ доставляет максимум функции $C(k_0)$. Существование и единственность оси для данного заостренного конуса следует из существования и единственности центра ограниченного множества, если заметить, что

$$\cos(\hat{k}, k_0) = 1 - \|k - k_0\|^2 / 2, \quad \|k\| = \|k_0\| = 1. \quad (2.10)$$

Из этой формулы, в частности, следует, что в качестве направляющей оси конуса K можно взять центр множества

$$E = \{u \in R^n: u = k / \|k\|, k \in K\}.$$

За описанный конус тогда берем круговой конус с осью $\lambda k_* = \lambda c_E$ и косинусом угла раствора $C(k_*)$.

Как и ранее, используя неравенство Юнга, можно построить оценку снизу для косинуса угла раствора описанного кругового конуса на основе оценки снизу для косинуса угла между любыми векторами из этого конуса. Итак, допустим

$$\cos(k_1, k_2) \geq \tau, \quad k_1, k_2 \in K.$$

Тогда существует такой вектор $k_* \neq 0$ (λk_* – ось конуса), что

$$\cos(k, k_*) \geq \left[\frac{1 + (n-1)\tau}{n} \right]^{1/2}, \quad k \in K, \quad (2.11)$$

при условии, что $\tau \geq -1/(n-1)$.

В частности, для конуса $K \subset R^n$, у которого $(u, v) \geq 0$ для любых $u, v \in K$, существует такой вектор k_* , что для всех $u \in K$ имеем

$$\cos(u, k_*) \geq \frac{1}{\sqrt{n}}. \quad (2.12)$$

Пусть K – заостренный конус, K_s – круговой конус, который описывает K ; допустим, его ось есть λz , косинус половины угла раствора $\cos \varphi_s$. Пусть K^+ – положительно сопряженный конус к конусу K . Тогда можно показать, что ось кругового конуса, описанного вокруг K^+ , совпадает с осью конуса K_s , а его косинус равен $\sqrt{1 - \cos^2 \varphi_s}$, как косинус дополнительного угла. Это замечание может быть полезно при построении описанного конуса, когда исходный конус задается системой линейных неравенств (2.7). Ранее было показано, что ребра положительно сопряженного конуса к конусу (2.7) есть сами векторы ограничений a_1, \dots, a_k . Поэтому нет нужды находить ребра конуса (2.7), проще работать с a_1, a_2, \dots, a_k как с ребрами положительно сопряженного конуса.

Теперь рассмотрим некоторые наиболее важные примеры. Самая простая задача из этого класса сводится к следующему. В евклидовом пространстве R^n имеется $n+1$ точка a_0, a_1, \dots, a_n , ($a_i \neq a_j, i \neq j$). Необходимо построить шар минимального радиуса, который бы содержал эти точки. При этом будем считать, что если множество $A = \{a_0, \dots, a_n\}$ лежит в линейном многообразии M_k размерности k , то соответствующий шар строим в M_k . Таким образом, не теряя общности можно считать, что размерность множества A – u при любом u есть n (в этом случае говорят, что векторы a_0, \dots, a_n находятся в общем положении). Далее можно показать, что описанная сфера в нашем случае проходит через все точки множества A . Последнее можно записать как

$$\|u - a_0\|^2 = \|u - a_1\|^2 = \dots = \|u - a_n\|^2$$

или

$$\|u - a_1\|^2 - \|u - a_0\|^2 = \|a_1\|^2 - \|a_0\|^2 - 2(a_1 - a_0, u) = 0,$$

.....

$$\|u - a_n\|^2 - \|u - a_0\|^2 = \|a_n\|^2 - \|a_0\|^2 - 2(a_n - a_0, u) = 0,$$

где u — центр сферы. Обозначим через b вектор-столбец, i -я координата которого есть $b_i = (\|a_i\|^2 - \|a_0\|^2)/2$, а через P матрицу порядка $n \times n$, i -я вектор-строка которой есть $(a_i - a_0)^T$. Тогда последнюю систему равенств можно записать в матричном виде:

$$Pu = b \tag{2.13}$$

— система линейных уравнений относительно неизвестного центра u искомой описанной сферы. Далее замечаем, что поскольку векторы a_0, \dots, a_n находятся в общем положении, то $\text{rank } P = n$, поэтому система (2.13) разрешима и имеет единственное решение $u = P^{-1}b$ — центр искомой сферы.

Перейдем теперь к другой похожей задаче: имеется многогранный конус в R^n с ребрами a_1, \dots, a_n . Требуется вокруг него описать круговой конус и, в частности, найти его косинус угла раствора. Не теряя общности можно считать векторы a_i нормированными, т.е. $\|a_i\| = 1, i = 1, \dots, n$. Далее считаем, что исходный конус K невырожден, т.е. векторы $\{a_i\}$ линейно независимы. Нетрудно показать, что описанный круговой конус в качестве своих ребер имеет, в частности, векторы $\{a_i\}$, чем он и задается. Как и в предыдущей задаче, определим систему линейных уравнений, которая в настоящей задаче имеет вид

$$(a_2 - a_1, u) = 0, \dots, (a_n - a_1, u) = 0,$$

— система из $n - 1$ линейных уравнений с n неизвестными (заметим, что векторы $a_2 - a_1, \dots, a_n - a_1$ линейно независимы). Эта система в качестве решения имеет линейное подпространство λu_0 , где u_0 — какое-либо решение этой системы (можно считать $(u_0, a_1) > 0, -\infty < \lambda < \infty$). Характерной особенностью этого луча является то, что он составляет одинаковый угол со всеми векторами a_1, \dots, a_n , поскольку при $\lambda > 0$

$$\cos(a_i, \lambda u_0) = \cos(a_i, u_0) = \frac{(a_i, u_0)}{\|u_0\|} = \frac{(a_1, u_0)}{\|u_0\|}, \quad i \geq 2.$$

Таким образом, за ось кругового конуса берем луч $\lambda u_0, \lambda > 0$; косинус половины угла раствора этого конуса равен $(a_1, u_0)/\|u_0\|$.

Найдем описанный круговой конус вокруг конуса, задаваемого системой неравенств (2.8). Как ранее было отмечено, ось описанного конуса совпадает с осью кругового конуса, описанного вокруг положительно сопряженного к (2.8). Ребрами K^+ после их нормировки будут:

$$a_2 - a_1 = \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \dots, 0\right),$$

$$a_3 - a_1 = \left(1, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \dots, 0\right),$$

.....

$$a_n - a_1 = \left(1, 0, \dots, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right).$$

Нетрудно проверить, что вектором u_0 , удовлетворяющим системе $(a_i - a_1, u_0) = 0, i \geq 2$, будет вектор

$$u_0 = (1, \sqrt{2} + 1, 2\sqrt{2} + 1, \dots, (n-1)\sqrt{2} + 1) \quad (2.14)$$

с нормой

$$\|u_0\| = \left[n \left(1 + \sqrt{2}(n-1) + \frac{(n-1)(2n-1)}{3} \right) \right]^{1/2}.$$

Таким образом, осью кругового описанного конуса вокруг (2.8) будет вектор (2.14). Косинус половины угла раствора этого конуса равен

$$\cos \varphi_s = \frac{(n-1)\sqrt{2} + 1}{\left[n \left(\frac{(n-1)(2n-1)}{3} + \sqrt{2}(n-1) + 1 \right) \right]^{1/2}} \sim \sqrt{\frac{3}{n}}. \quad (2.15)$$

Конструкция "конус" позволяет строить частичный порядок в многомерных пространствах [23]. Существенно, что такой способ введения порядка в определенном смысле включает в себя все многообразие способов частичного упорядочивания пространства.

Итак, пусть B — банахово пространство с частичным порядком \preceq . Таким образом, для некоторых $a, b \in B$ имеем $a \preceq b$. Естественно рассмотреть порядок, который обладает важнейшими свойствами естественного порядка \leq на прямой. Порядок на B называем *линейным*, если помимо стандартных свойств: 1) $a \preceq a$, 2) $a \preceq b$ и $b \preceq c$ влечет $a \preceq c$, 3) $a \preceq b$, $b \preceq a$ влечет $a = b$, он обладает двумя другими свойствами: 4) $a \preceq b$ и $c \preceq d$ влекут $a + c \preceq b + d$, 5) $a \preceq b$ и $\lambda \geq 0$ влекут $\lambda a \preceq \lambda b$. Порядок называем *непрерывным*, если для последовательностей $a_n, b_n, n = 1, 2, \dots$, таких, что $a_n \preceq b_n$ и $a_n \rightarrow a, b_n \rightarrow b$, имеем $a \preceq b$. Линейный непрерывный частичный порядок в банаховом пространстве наследует наиболее важные свойства естественного порядка на прямой.

С помощью конуса нетрудно дать определение монотонной последовательности $x_n \in R^m, n = 1, 2, \dots$ [49]¹⁾. Итак, пусть K — заостренный выпуклый замкнутый конус в R^m ; говорим, что последовательность x_1, x_2, \dots *возрастает по конусу K* , если $x_{n+1} - x_n \in K$, что обозначаем как $x_n \preceq x_{n+1} \pmod{K}$ для $n = 1, 2, \dots$. Аналогично вводится понятие *убывающей последовательности по конусу K* . Возрастающую или убывающую последовательность по конусу K называем *монотонной* по этому конусу.

Введем еще одно определение. Последовательность $x_1, x_2, \dots \in R^m$ называем *монотонной*, если существует заостренный выпуклый замкнутый конус, по которому эта последовательность является возрастающей. Можно предложить следующий простой признак монотонности последовательности в евклидовом многомерном пространстве: последовательность $\{x_n\}$ является монотонной тогда и только тогда, когда существуют $\nu \in R^m$

¹⁾ Для простоты ограничимся конечномерным евклидовым пространством.

(направление последовательности) и $\delta \in R^1$ такие, что

$$\frac{(x_{n+1} - x_n, \nu)}{\|x_{n+1} - x_n\|} \geq \delta > 0, \quad n = 1, 2, \dots; \quad (2.16)$$

в случае $x_n = x_{n+1}$ отношение в левой части полагаем равным $\|\nu\|$.

Доказательство несложно. Допустим, $\{x_n\}$ — монотонная последовательность, т.е. $x_{n+1} - x_n \in K$, $n = 1, 2, \dots$, где K — заостренный выпуклый замкнутый конус в R^m . В силу его заостренности и замкнутости в R^m существует вектор ν такой, что $(\nu, x)/\|x\| \geq \delta > 0$ для всех $x \in K$. Это же имеет место и для вектора $(x_{n+1} - x_n)/\|x_{n+1} - x_n\|$, т.е. (2.16) выполнено для всех $n = 1, 2, \dots$ Обратное, пусть (2.16) имеет место. Рассмотрим множество

$$K = \left\{ z \in R^m: \frac{(z, \nu)}{\|z\|} \geq \delta \right\}, \quad \delta > 0;$$

легко проверить, что это множество является круговым заостренным замкнутым выпуклым конусом. По определению $x_{n+1} - x_n \in K$, значит, последовательность $\{x_n\}$ монотонна.

Последовательность называем *прямо направленной*, если она монотонна по прямому конусу K , т.е. если этот конус порожден m ортогональными векторами e_1, e_2, \dots, e_m . В частном случае, когда e_i совпадают с векторами R^m , монотонность векторной последовательности означает покоординатную монотонность.

Прямо направленные последовательности обладают свойством возрастания по норме. А именно, для таких последовательностей при любых $k \leq s \leq t$ имеет место неравенство $\|x_s - x_k\| \leq \|x_t - x_k\|$. Для доказательства соединим точки x_k, x_s, x_t отрезками прямых. Докажем, что угол, образованный отрезками $[x_k, x_s]$ и $[x_t, x_s]$, не является острым. Для этого заметим, что $(x_s - x_k, x_t - x_s) \geq 0$, поскольку $x_s - x_k \in K$, $x_t - x_s \in K$, причем K — прямой конус. Отсюда следует, что угол между векторами $x_k - x_s$ и $x_t - x_s$ не является острым, значит, $\|x_t - x_k\| \geq \|x_s - x_k\|$, поскольку сторона в треугольнике, лежащая против неострого угла, превосходит другие.

Основное свойство монотонных последовательностей в многомерных пространствах является обобщением известной теоремы на прямой: *монотонная ограниченная (по норме) последовательность x_1, x_2, \dots сходится по норме, т.е. имеет единственный предел*. Доказательство этого фундаментального факта несложно. В силу ограниченности последовательности $\{x_n\}$ имеет хотя бы одну предельную точку. Надо лишь доказать, что она единственна. Допустим, их более одной, скажем, есть две предельных точки x_*^1 и x_*^2 . Пусть $x_{N(n)} \rightarrow x_*^1$ при $n \rightarrow \infty$, где $N(n)$ — целочисленная возрастающая функция на множестве натуральных чисел; аналогично $x_{K(n)} \rightarrow x_*^2$. Для последовательности $N(n)$ построим возрастающую последовательность $R(n)$ такую, что $R(n) > N(n)$, причем $R(n) \in \{N(n), n = 1, 2, \dots\}$. Тогда по-прежнему $x_{R(n)} \rightarrow x_*^2$, причем $x_{R(n)} - x_{N(n)} \in K$, $n = 1, 2, \dots$, поскольку $R(n) > N(n)$. В силу замкнутости K , перехо-

дя к пределу, получаем $x_*^2 - x_*^1 \in K$. Аналогично доказываем, что $x_*^1 - x_*^2 \in K$, откуда в силу заостренности K следует $x_*^1 = x_*^2$, что и требовалось показать.

Воспользовавшись условием монотонности последовательности в виде (2.16), можно утверждать, что если последовательность $\{x_n\}$ ограничена, причем существуют такие $\nu \in R^m$, $\delta \in R^1$, для которых (2.16) имеет место, то эта последовательность сходится.

С помощью частичного порядка нетрудно дать определение монотонного отображения [10, 29]. Итак, пусть $f: R^m \rightarrow R^m$ – отображение. Говорим, что оно является *возрастающим* по конусу K , где K – заостренный замкнутый выпуклый конус, если $x \leq y \pmod{K}$ влечет $f(x) \leq f(y) \pmod{K}$.

Рассмотрим один важный пример возрастающего линейного отображения. Итак, пусть $f(x) = Ax$, где A – матрица $m \times m$. В качестве K возьмем положительный ортант $R_+^m = \{x \in R^m: x_i \geq 0\}$. Таким образом, если с помощью этого конуса установить частичный порядок, то $x \leq y \pmod{R_+^m}$, если $x_i \leq y_i$, $i = 1, \dots, m$. Легко видеть, что если $A_{ij} \geq 0$ (в этом случае говорят, что матрица A неотрицательна [36]), то отображение Ax является возрастающим по R_+^m .

Возрастающие отображения широко используются в решении операторных уравнений [10]. Действительно, допустим, необходимо решить некоторую систему нелинейных уравнений $P(x) = 0$, $x \in R^m$, $P: R^m \rightarrow R^m$. Допустим, это уравнение приводимо к виду

$$x = f(x),$$

где f – возрастающее непрерывное отображение по некоторому заостренному замкнутому выпуклому конусу K . Пусть x_0 – начальное приближение; положим $x_1 = f(x_0)$, $x_2 = f(x_1)$ и т.д. Тогда если $x_1 \leq x_0 \pmod{K}$ или $x_0 \leq x_1 \pmod{K}$ и последовательность $\{x_n\}$ ограничена, то она сходится к корню уравнения $P(x) = 0$, который является неподвижной точкой отображения $f(x)$. Действительно, если $x_0 - x_1 \in K$, то $f(x_0) - f(x_1) = x_1 - x_2 \in K$, т.е. $x_2 \leq x_1$, $x_3 \leq x_2 \pmod{K}$ и т.д. Таким образом, можно считать, что $x_n \leq x_{n+1} \pmod{K}$. В силу ограниченности последовательности $\{x_n\}$ она сходится. Переходя к пределу при $n \rightarrow \infty$ в равенстве $x_{n+1} = f(x_n)$, получаем, что соответствующий предел x_* удовлетворяет уравнению $x_* = f(x_*)$, т.е. является неподвижной точкой отображения $f(x)$. Аналогично доказывается сходимости в случае $x_0 \leq x_1 \pmod{K}$.

Способы решения систем нелинейных уравнений на основе сведения к возрастающим отображениям могут быть применены и в задаче минимизации суммы квадратов (см. гл. 7).

§ 3. Квазилинейные модели регрессии

Простейшим видом нелинейных статистических моделей являются квазилинейные модели регрессии. Они с точностью до монотонного преобразования совпадают с линейными. Итак, пусть g – непрерывная, достаточное число раз дифференцируемая функция действительного переменного, $g'(s) \neq 0$, $s \in R^1$. Не теряя общности, будем считать g строго возрастаю-

щей. *Квазилинейной* регрессией называется регрессия с функцией

$$f_i(\alpha) = g((\alpha, x_i)), \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

где $\alpha \in R^m$ (априорное множество параметров совпадает со всем пространством), $x_i \in R^m$ – векторы наблюдений независимых переменных (детерминированные величины), (α, x_i) – скалярное произведение.

Определение. Модель регрессии $y_i = f_i(\alpha) + \epsilon_i$, $i = 1, \dots, n$, называем *идентифицируемой*, если $f_i(\alpha_1) = f_i(\alpha_2)$, $i = 1, \dots, n$, влечет $\alpha_1 = \alpha_2$.

Легко показать, что для идентифицируемости квазилинейной регрессии достаточно, чтобы матрица X порядка $n \times m$, составленная из векторов x_1, x_2, \dots, x_n , имела ранг m . Это означает, что среди n векторов x_1, \dots, x_n можно выбрать m линейно независимых. В дальнейшем это условие будем считать выполненным.

Цель данного параграфа – найти условия, при которых функция

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^n [y_i - g((\alpha, x_i))]^2, \quad \alpha \in R^m,$$

достигает своей нижней грани на R^m .

На практике при работе с квазилинейными регрессиями часто путем обратного преобразования задачу подгонки сводят к линейной регрессии

$$g^{-1}(y_i) = (\alpha, x_i) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.2)$$

после чего параметры α оцениваются линейным методом наименьших квадратов. Использование обратного преобразования, очевидно, требует, чтобы наблюдения y_i принадлежали области изменения функции g . Следует помнить, что формально подобное сведение возможно лишь в случае, если исходная статистическая модель имеет вид

$$y_i = g((\alpha, x_i) + \epsilon_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Если же в исходной модели отклонения аддитивны, т.е. $y_i = g((\alpha, x_i) + \epsilon_i)$, а именно такие модели мы рассматриваем, редукция (3.2) становится неправомерной [15]. Применение метода наименьших квадратов к линейризованному уравнению (3.2) предполагает минимизацию квадратичной функции

$$\tilde{Q}(\alpha) = \sum_{i=1}^n [g^{-1}(y_i) - (\alpha, x_i)]^2,$$

которая, естественно, не совпадает с исходной $Q(\alpha)$. Вместе с тем оценки МНК линейной регрессии (3.2) могут служить иногда хорошими начальными приближениями для итерационного процесса минимизации $Q(\alpha)$. В целях устранения смещения, связанного с преобразованием g^{-1} , к уравнению регрессии (3.2) применяют взвешенный МНК [15]. Веса выбирают из следующих соображений. При условии, что ϵ_i достаточно малы,

$$g^{-1}(g((\alpha, x_i) + \epsilon_i)) \approx (\alpha, x_i) + \epsilon_i (g^{-1}(y_i))'.$$

Поэтому в качестве альтернативного начального приближения можно взять оценку МНК линейной регрессии

$$v_i = (\alpha, w_i) + \epsilon_i,$$

где

$$v_i = g^{-1}(y_i)/[g^{-1}(y_i)]', \quad w_i = x_i/[g^{-1}(y_i)]'.$$

К сожалению, ни первая, ни вторая оценки не гарантируют суммы квадратов, меньшей предельного значения \bar{Q}_E . Начальное приближение с таким свойством будет предложено нами в конце этого параграфа.

Вернемся к нашей задаче вычисления нижней грани суммы квадратов на бесконечности для квазилинейной регрессии. Здесь принципиальное значение имеет наличие у функции g асимптот. Таким образом, рассмотрим следующие случаи.

А. Функция g не ограничена ни сверху, ни снизу, т.е. $g(s) \rightarrow \infty$ при $s \rightarrow \infty$ и $g(s) \rightarrow -\infty$ при $s \rightarrow -\infty$.

Б. Функция g ограничена снизу (левосторонняя асимптота), т.е. $g(s) \rightarrow \infty$ при $s \rightarrow \infty$ и $g(s) \rightarrow \underline{g}$ при $s \rightarrow -\infty$.

В. Функция g ограничена сверху (правосторонняя асимптота), т.е. $g(s) \rightarrow \bar{g}$ при $s \rightarrow \infty$ и $g(s) \rightarrow -\infty$ при $s \rightarrow -\infty$.

Г. Функция g ограничена (левосторонняя и правосторонняя асимптоты), т.е. $g(s) \rightarrow \bar{g}$ при $s \rightarrow \infty$ и $g(s) \rightarrow \underline{g}$ при $s \rightarrow -\infty$.

Мы изучим первые два случая. Третий практически не отличается от второго. Исследование случаев В и Г можно проводить по схеме исследования случая Б.

С л у ч а й А. Докажем, что тогда $\bar{Q}_E = +\infty$. Это следует из неравенства

$$\Sigma (\alpha, x_i)^2 = \Sigma \alpha^T x_i x_i^T \alpha = \alpha^T \Sigma x_i x_i^T \alpha = \alpha^T X^T X \alpha \geq \|\alpha\|^2 \lambda_{\min}(X^T X),$$

где $\lambda_{\min}(\cdot)$ — минимальное собственное число. Поскольку по предположению $\text{rank } X = m$, то $\lambda_{\min}(X^T X) > 0$. Поэтому для любой последовательности параметров $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$ из этого неравенства следует

$$\sum_1^n (\alpha_k, x_i)^2 \rightarrow \infty, \quad k \rightarrow \infty,$$

т.е. хотя бы для одного i имеем $|(\alpha_k, x_i)| \rightarrow \infty$. Последнее в свою очередь приводит к тому, что $g((\alpha_k, x_i)) \rightarrow \infty$ и $Q(\alpha_k) \rightarrow \infty$. Итак, *если функция g не ограничена ни сверху, ни снизу, оценка МНК всегда существует, а множество (1.2) компактно для любого начального приближения.*

С л у ч а й Б. Теперь следует различать, является ли система векторов x_1, \dots, x_n разнонаправленной или однонаправленной (см. предыдущий параграф). Допустим, что эти векторы строго разнонаправлены. Докажем, что в этом случае опять же $\bar{Q}_E = \infty$. Пусть $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$, обозначим направление этой последовательности через ν^* . Не теряя общности можно считать, что $\alpha_k / \|\alpha_k\| \rightarrow \nu^*$ при $k \rightarrow \infty$. Из разнонаправленности векторов следует существование некоторого j , для которого $(\nu^*, x_j) > 0$. Значит, для всех k , начиная с некоторого номера, $(\alpha_k, x_j) / \|\alpha_k\| \geq \delta > 0$. Поэтому

$$(\alpha_k, x_j) \geq \delta \|\alpha_k\| \rightarrow \infty, \quad k \rightarrow \infty,$$

т.е. $g((\alpha_k, x_j)) \rightarrow \infty$ и $Q(\alpha_k) \rightarrow \infty$, что и требовалось показать.

Исследуем теперь случай, когда векторы x_1, \dots, x_n строго однонаправлены. Частный случай с функцией $g = \exp$ был рассмотрен нами ранее в § 1 (регрессия-экспонента (1.4)). Для иллюстрации последующего изложения отсылаем читателя к рис. 2.

Итак, пусть $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$. Найдем асимптотические направления. Построим конус, отрицательно сопряженный к (2.3):

$$\begin{aligned} K^- &= \{ \alpha \in R^m : (\alpha, z) \leq 0, z \in \text{Ko} \} = \\ &= \{ \alpha \in R^m : (\alpha, x_i) \leq 0, i = 1, \dots, n \}, \end{aligned}$$

где $\text{Ko} = \text{Ko}(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Из § 2 следует, что $K^- \neq \emptyset$, $K^- \neq R^m$, $\text{Ko} \cap K^- = \{0\}$ – начало координат. Докажем, что асимптотические направления лежат в конусе K^- . Действительно, пусть $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$ и ν^* – направление этой последовательности. Рассмотрим случай, когда $\nu^* \in K^-$. Это значит, существует j , для которого $(\nu^*, x_j) > 0$. Это в свою очередь ведет к тому, что для любого k начиная с некоторого номера $(\alpha_k, x_j) / \|\alpha_k\| \geq \delta > 0$. Как и в случае разнонаправленных векторов, это ведет к тому, что $Q(\alpha_k) \rightarrow \infty$. Пусть теперь ν^* – внутренняя точка K^- . Тогда, начиная с некоторого номера, $(\alpha_k, x_i) / \|\alpha_k\| \leq -\delta < 0$ для всех $i = 1, \dots, n$. Поэтому

$$g((\alpha_k, x_i)) \rightarrow \underline{g} \text{ при } k \rightarrow \infty, i = 1, \dots, n,$$

и $Q(\alpha_k) \rightarrow \Sigma (y_i - \underline{g})^2$.

Рассмотрим подробнее случай, когда ν^* – граничная точка конуса K^- , в частности, совпадает с одним из его ребер. Пусть конус K , порожденный векторами x_1, \dots, x_n , имеет l ребер $x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_l}$. Поскольку ранг системы векторов x_1, \dots, x_n равен m , то $l \geq m$. Для простоты будем считать, что остальные векторы не принадлежат граням Ko . Обозначим $I = \{i_1, i_2, \dots, i_l\}$ – множество индексов. Будем выбирать из I группы индексов из $(m-1)$ -го элемента и строить к соответствующей системе векторов ортогональный вектор (для простоты предполагаем, что эти векторы линейно независимы). Таким образом, определяем ребра отрицательно сопряженного конуса K^- (см. предыдущий параграф). Пусть S_1, S_2, \dots, S_l – те группы из $m-1$ индексов, $S_i \subset I, i = 1, \dots, l$, которые определяют ребра сопряженного конуса K^- .

Допустим теперь, что направление асимптотической последовательности $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty$, совпадает с одним из ребер конуса K^- , обозначим его ν_1 . Допустим, что это ребро определяется группой векторов-ребер S_1 , т.е.

$$\begin{aligned} (\nu_1, x_i) &= 0, i \in S_1, \\ (\nu_1, x_i) &< 0, i \in [1, n] \setminus S_1, \end{aligned} \tag{3.3}$$

где $[1, n] = \{1, 2, \dots, n\}$. Последние неравенства приводят к тому, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g((\alpha_k, x_i)) = \underline{g}, i \in S_1.$$

Поэтому

$$\underline{\lim}_{i=1}^n \sum_{i \in S_1} (y_i - g((\alpha_k, x_i)))^2 \geq \sum_{i \in S_1} (y_i - \underline{g})^2. \tag{3.4}$$

Для простоты рассмотрим случай, когда все наблюдения зависимой переменной, которые отвечают ребрам конуса K , имеют значения $y_i > \underline{g}$, $i \in I$. Докажем тогда, что специальным выбором асимптотической последовательности с направлением ν_1 можно добиться того, чтобы неравенство (3.4) обратилось в равенство. Пусть элементы последовательности α_k лежат на луче, имеющем направление ν_1 и начало $r \in R^m$, т.е. $\alpha_k = \lambda_k \nu_1 + r$, $\lambda_k \uparrow \infty$. Легко показать, что направлением этой последовательности будет ν_1 . Далее,

$$(\alpha_k, x_i) = \lambda_k (\nu_1, x_i) + (r, x_i) = (r, x_i), \quad i \in S_1.$$

Начало луча выберем так, чтобы $g((r, x_i)) = y_i$, $i \in S_1$. Это всегда можно сделать. Действительно, последнюю систему можно переписать как $(r, x_i) = g^{-1}(y_i)$, так как $y_i > \underline{g}$. Далее, по условию векторы $\{x_i, i \in S_1\}$ линейно независимы, поэтому последняя система представляет собой систему линейных уравнений с m неизвестными и $m - 1$ уравнениями, которая является разрешимой. Такой выбор начала луча приведет к тому, что $m - 1$ квадратов в сумме $Q(\alpha)$ занулятся, а неравенство (3.4) превратится в равенство. Перебирая таким способом все направления $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_i$, совпадающие с ребрами сопряженного конуса K^- , найдем минимальное предельное значение $Q(\alpha_k)$. Окончательно с учетом сделанных предположений можно записать

$$\bar{Q}_E = \sum_{i=1}^n (y_i - \underline{g})^2 - \max_{i=1, \dots, l} \sum_{j \in S_i} (y_j - \underline{g})^2. \quad (3.5)$$

На основе (3.5) можно построить более удобные для практики формулы оценки \bar{Q}_E снизу. А именно, пусть наблюдения ранжированы: $y_{(1)} \leq y_{(2)} \leq \dots \leq y_{(n)}$. Тогда из (3.5) следует, что

$$\bar{Q}_E \geq \sum_{i=1}^{n-m+1} (y_{(i)} - \underline{g})^2. \quad (3.6)$$

Используя найденное значение нижней грани суммы квадратов на бесконечности (3.5), докажем, что если $y_i > \underline{g}$ для всех $i = 1, \dots, n$, то оценка МНК существует. Предлагаемое доказательство можно считать обобщением доказательства существования оценки МНК для регрессии-экспоненты (§ 1).

Не теряя общности можно считать, что минимальное значение (3.5) достигается на множестве индексов S_1 . Таким образом, главной асимптотической кривой будет луч $\lambda \nu_1 + r$, где $(\nu_1, x_i) = 0$, $i \in S_1$; $(\nu_1, x_i) < 0$, $i \in S_1$; $(r, x_i) = g^{-1}(y_i)$, $i \in S_1$. Рассмотрим разность

$$\begin{aligned} Q(\lambda) - \bar{Q}_E &= Q(\lambda \nu_1 + r) - \bar{Q}_E = \\ &= \sum_1^n [y_i - g(\lambda(\nu_1, x_i) + (r, x_i))]^2 - \sum_{i \in S_1} (y_i - \underline{g})^2 = \\ &= \sum_{i \in S_1} [(y_i - \underline{g}) - (g(\lambda(\nu_1, x_i) + (r, x_i)) - \underline{g})]^2 - \sum_{i \in S_1} (y_i - \underline{g})^2 = \\ &= -2 \sum_{i \in S_1} (y_i - \underline{g})(g(\lambda \tau_i + \theta_i) - \underline{g}) + \sum_{i \in S_1} (g(\lambda \tau_i + \theta_i) - \underline{g})^2, \end{aligned}$$

где $\tau_i = (\nu_1, x_i)$, $\theta_i = (r, x_i)$, $i = 1, \dots, n$. Последнее выражение стремится к нулю при $\lambda \rightarrow +\infty$, так как $\tau_i < 0$ для всех $i \in S_1$ и $g(s) \rightarrow g$ при $s \rightarrow -\infty$. Докажем, что сходимость к нулю имеет место снизу. По условию g является возрастающей функцией; пусть для определенности $\bar{\tau}_i = \max \tau_i$, $i \in S_1$. Предыдущее выражение преобразуем следующим образом:

$$Q(\lambda) - \bar{Q}_E = [g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}] \left[\frac{Q(\lambda) - \bar{Q}_E}{g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}} \right] =$$

$$= [g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}] P(\lambda),$$

где

$$P(\lambda) = -2 \sum_{i \in S_1} (y_i - \underline{g}) \frac{g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}}{g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}} +$$

$$+ \sum_{i \in S_1} \frac{[g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}]^2}{g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}}.$$

Нетрудно показать, что члены последней суммы стремятся к нулю при $\lambda \rightarrow +\infty$. Действительно, для достаточно больших λ для всех $i \in S_1$ $\lambda\tau_i + \theta_i > \lambda\tau_i + \theta_i$, поэтому в силу монотонности g имеем

$$0 \leq \frac{[g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}]^2}{g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g}} \leq g(\lambda\tau_i + \theta_i) - \underline{g} \rightarrow 0, \quad \lambda \rightarrow +\infty, \quad i \in S_1.$$

Заметим теперь, что каждый член второй суммы в выражении $P(\lambda)$ имеет более высокий порядок малости по сравнению с соответствующим членом первой суммы. Таким образом, для достаточно больших λ разность $Q(\lambda) - \bar{Q}_E$ отрицательна. Это значит, найдется такое λ_0 , т.е. $a_0 = \lambda_0\nu_1 + r_1 \in R^m$, что $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. А это по теореме 1.1 влечет существование оценки МНК, т.е. достижимость $Q(\alpha)$ своего инфимума на R^m .

Найдем геометрическую интерпретацию существования оценки МНК в квазилинейной регрессии. Она будет нами неоднократно использоваться в дальнейшем при нахождении начальных приближений, дающих сумму квадратов, меньшую \bar{Q}_E . Как и прежде, будем считать, что минимальное значение (3.5) достигается на первой грани, которая порождается векторами $x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_{m-1}}$. Тогда ν_1 — главное асимптотическое направление, а $\lambda\nu_1 + r_1$ — главный асимптотический луч. Напомним, что начало луча r_1 было выбрано так, чтобы $(r_1, x_i) = g^{-1}(y_i)$, $i \in S_1$. Как только что доказано, существует такое $\lambda_0 > 0$, что $Q(\lambda_0\nu_1 + r_1) < \bar{Q}_E$. Геометрически это может быть истолковано следующим образом. Рассмотрим n точек $(x_i, g^{-1}(y_i))$, $i = 1, \dots, n$, в пространстве R^{m+1} . Отберем первые $m-1$ из них и проведем через них гиперплоскость так, чтобы все остальные точки оказались "выше". Формально это означает нахождение такого $\beta \in R^m$, что $(\beta, x_i) = g^{-1}(y_i)$, $i \in S_1 = \{i_1, \dots, i_{m-1}\}$ и $(\beta, x_i) \leq g^{-1}(y_i)$, $i \in S_1$. Докажем, что такая гиперплоскость (т.е. $\beta \in R^m$) существует. Будем искать β в классе $\beta = \lambda\nu_1 + r_1$, где ν_1, r_1 определены выше. Условие "прохождения" соответствующей гиперплоскости через первые $m-1$

точек из R^{m+1} тем самым выполнено. Далее, легко видеть, что

$$(\beta, x_i) = (\lambda \nu_1 + r_1, x_i) = \lambda(\nu_1, x_i) + (r_1, x_i).$$

Но по условию $(\nu_1, x_i) < 0$ для всех $i \in S_1$. Поэтому при $\lambda \rightarrow +\infty$ последнее выражение для всех $i \in S_1$ стремится к $-\infty$. Поэтому существует $\lambda_0 > 0$, для которого $(\beta, x_i) \leq g^{-1}(y_i)$, $i \in S_1$, что и требовалось доказать.

Таким образом, нами построено начальное приближение a_0 , которое удовлетворяет неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Значит, множество (1.2) для этого приближения компактно. В следующем параграфе для некоторых моделей трендов предложенное приближение будет конкретизировано.

§ 4. Нелинейные тренды экспоненциального типа

Одним из центральных моментов статистического анализа нестационарных временных рядов является процедура выравнивания (выделения тренда). Предполагается, что наблюдения во времени представляют собой сумму тренда, известного с точностью до конечного числа параметров, и случайной составляющей. Таким образом, статистическая модель тренда имеет вид нелинейной регрессии

$$y_t = f_t(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) + \epsilon_t, \quad (4.1)$$

где t — время ($t = 1, 2, \dots, n$), ϵ_t — случайные отклонения, которые можно считать стационарными. Как и прежде, оценкой метода наименьших квадратов считаем то значение параметров, которое доставляет сумме квадратов отклонений минимум.

Разнообразие видов нелинейных трендов, встречающихся в практике, достаточно велико. К сожалению, их широкому использованию мешают трудности вычислительного плана, связанные с задачей минимизации соответствующей суммы квадратов. Это порой приводит к тому, что исследование ограничивается линейными трендами, что существенно обедняет анализ. В этом параграфе мы ограничимся некоторыми нелинейными трендами, в которых присутствует экспоненциальный член вида $\exp(\alpha t)$. Такие тренды часто встречаются в экономических приложениях. Если не оговорено особо, наблюдения y_1, y_2, \dots, y_n считаем положительными.

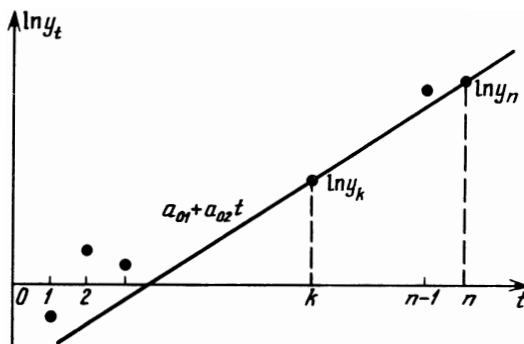


Рис. 3. Начальное приближение для простой экспоненты

1. Простая экспонента. Этот вид тренда был уже исследован ранее в § 1; функция тренда имеет вид (1.4). Нижняя грань суммы квадратов на бесконечности равна (1.5). Этот вид нелинейной регрессии представляет собой частный случай квазилинейной регрессии с $g = \exp$ и $x_t = (1, t)^T$, $t = 1, \dots, n$. В предыдущем параграфе было доказано, что в условиях положительных наблюдений оценка МНК существует, т.е. можно найти такое приближение a_0 , что $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Найдем это приближение. Пусть, например, $y_n \geq y_1$. Тогда $\bar{Q}_E = \sum_1^{n-1} y_t^2$. Нанесем точки $(t, \ln y_t)$, $t = 1, \dots, n$, на плоскость (рис. 3). Проведем через точку $(n, \ln y_n)$ прямую так, чтобы она прошла еще через другую точку $(k, \ln y_k)$, а все остальные точки были не ниже. Легко убедиться, что это всегда можно сделать. Итак, если $y_n \geq y_1$, то ¹⁾

$$a_{02}^1 = \max_{1 \leq t < n} \frac{\ln y_t - \ln y_n}{t - n}, \quad a_{01}^1 = \ln y_n - a_{02}^1 n.$$

Тогда по условию $a_{01}^1 + t a_{02}^1 \leq \ln y_t$, причем $a_{01}^1 + n a_{02}^1 = \ln y_n$ и $a_{01}^1 + k a_{02}^1 = \ln y_k$, $k \neq n$. Отсюда следует, что

$$Q(a_0^1) = \sum_1^n (y_t - e^{a_{01}^1 + a_{02}^1 t})^2 \leq \sum_{\substack{t=1 \\ t \neq k}}^{n-1} y_t^2 < \sum_{t=1}^{n-1} y_t^2 = \bar{Q}_E.$$

Пусть теперь $y_1 > y_n$. В этом случае проводим прямую так, чтобы она прошла через точки $(1, \ln y_1)$ и $(k, \ln y_k)$, а все остальные точки $(t, \ln y_t)$ были не ниже этой прямой. Очевидно, для этого необходимо положить

$$a_{02}^1 = \min_{1 < t \leq n} \frac{\ln y_t - \ln y_1}{t - 1}, \quad a_{01}^1 = \ln y_1 - a_{02}^1.$$

Как и в предыдущем случае, нетрудно показать, что $Q(a_0^1) < \bar{Q}_E$.

Для экспоненциальной модели (1.4) можно предложить массу других способов "приближенного оценивания". Например, следующим приемом часто пользуются практики-экономисты. Среднегодовой темп оценивается по крайним точкам. Таким образом, $a_{02}^2 = 1/(n-1) \ln(y_n/y_1)$. Эта процедура равносильна проведению прямой в плоскости $(t, \ln y_t)$ через две крайние точки $(1, \ln y_1)$ и $(n, \ln y_n)$. Очевидно, в этом случае

$$a_{02}^2 = \frac{\ln y_n - \ln y_1}{n - 1}, \quad a_{01}^2 = \frac{n \ln y_1 - \ln y_n}{n - 1}.$$

Простейший способ — положить $a_{02}^3 = 0$, тогда за "оптимальное" значение параметра масштаба необходимо взять $a_{01}^3 = \ln \bar{y}$, где $\bar{y} = \sum y_t/n$. Очевидно, $Q(a_0^3) = \sum (y_t - \bar{y})^2$.

¹⁾Ниже будут предложены другие начальные приближения, поэтому они сопровождаются верхним порядковым номером.

Наконец, можно использовать идею обратного преобразования. Логарифмируя уравнение экспоненциальной регрессии, получаем

$$\ln y_t = \alpha_1 + \alpha_2 t + \xi_t.$$

Начальное приближение, которое соответствует оценкам МНК этой линейной регрессии, обозначим через a_0^4 . Аналогично взвешенный МНК приводит нас к оцениванию регрессии

$$y_t \ln y_t = \alpha_1 y_t + \alpha_2 t y_t + u_t.$$

Последний вектор оценок обозначим через a_0^5 .

К сожалению, ни одно из начальных приближений, за исключением первого, не гарантирует неравенства $Q(a_0^i) < \bar{Q}_E$. Понятно, что вторая оценка может привести к противоположному неравенству, если наблюдения образуют "яму", так что основная масса наблюдений y_1, y_2, \dots, y_n лежит намного ниже экспоненты, проходящей через крайние точки y_1 и y_n . Третья оценка также может дать значение $Q(a_0^3) \geq \bar{Q}_E$. Например, если $y_n > y_1$, то это будет иметь место, если $y_n / (\sqrt{n} + 1) \geq \bar{y}_1 = \sum_1^{n-1} y_t / (n - 1)$. Возможны ситуации, при которых сумма квадратов

для четвертой и пятой оценок также будет больше \bar{Q}_E .

В целях выяснения качества предлагаемых оценок с точки зрения минимума суммы квадратов был проделан следующий машинный эксперимент. Фиксировались "истинные" значения параметров экспоненциальной кривой α_1 и α_2 и стандартного отклонения σ . Затем генерировались псевдослучайные нормально распределенные отклонения $\epsilon_t \sim N(0, \sigma^2)$, на основе которых строились "наблюдения" $y_t = \exp(\alpha_1 + \alpha_2 t) + \epsilon_t$. Для каждой такой выборки вычислялись пять начальных приближений, соответствующие им значения суммы квадратов и \bar{Q}_E .

Таким образом, было проделано 100 испытаний. Параметры $\alpha_1, \alpha_2, \sigma$ варьировались в широких пределах. Не будем приводить соответствующие таблицы, остановимся только на выводах. Если σ мало (высокая степень адекватности данных модели), то все приближения давали значения суммы квадратов меньше \bar{Q}_E . При высоких значениях σ (и малых значениях α_2) повышается доля наблюдений близких к 0; в подобных ситуациях четвертая и пятая оценки не удовлетворяли неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Проведенный статистический эксперимент позволяет сделать следующий вывод. В подавляющем большинстве случаев оценка a_0^4 является наилучшей. Однако в экстремальных ситуациях она может не удовлетворять неравенству $Q(a_0^4) < \bar{Q}_E$, поэтому перед началом процесса минимизации необходимо иметь в запасе оценку a_0^1 , для которой по построению $Q(a_0^1) < \bar{Q}_E$.

В заключение рассмотрим ситуацию с отрицательными наблюдениями. Итак, пусть в ряду наблюдений y_1, y_2, \dots, y_n есть отрицательные. Если все наблюдения отрицательны, инфимум суммы квадратов не достигается. Пусть, например, $y_n > y_1, y_n > 0$. Тогда, как ранее было доказано, при дополнительном условии $y_{n-1} > 0$ оценка МНК регрессии-экспоненты (1.4) существует.

Рассмотрим этот случай более подробно. Найдем начальное приближение a_0 такое, что $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Как и прежде, это приближение будем искать на луче $\alpha_1 = -\lambda n + \ln y_n$, $\alpha_2 = -\lambda$, $\lambda \rightarrow +\infty$. Как было показано в § 1.

$$Q(\lambda) - \bar{Q}_E = y_n \omega P_{2n-3}(\omega),$$

$$P_{2n-3}(\omega) = -2 \sum_{t=1}^{n-1} y_t \omega^{n-t-1} + y_n \sum_{t=1}^{n-1} \omega^{2(n-t)-1},$$

где $\omega = \exp(-\lambda) \rightarrow 0$. Допустим, $y_k = \min_t y_t < 0$. Будем искать $0 < \omega < 1$, которое приводит к $Q(\lambda) - \bar{Q}_E < 0$. Следующее неравенство очевидно:

$$P_{2n-3}(\omega) < -2y_{n-1} - 2y_k \frac{\omega}{1-\omega} + y_n \frac{\omega}{1-\omega^2} = \frac{P_2(\omega)}{1-\omega^2},$$

где $P_2(\omega) = \omega^2(2y_{n-1} - 2y_k) + \omega(y_n - 2y_k) - 2y_{n-1}$. Тогда для всех $0 < \omega < \bar{\omega}$, где $\bar{\omega}$ — наибольший корень уравнения $P_2(\omega) = 0$, имеем $Q(\lambda) < \bar{Q}_E$. Легко вычислить

$$\bar{\omega} = \frac{4y_{n-1}}{((y_n - 2y_k)^2 + 16y_{n-1}(y_{n-1} - y_k))^{1/2} + y_n - 2y_k}.$$

В качестве начального приближения a_0 , удовлетворяющего неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$, можно, например, взять $a_0 = (-\lambda_0 n + \ln y_n, -\lambda_0)$, где $\lambda_0 = -\ln(\bar{\omega}/2)$. Другие начальные приближения, не гарантирующие неравенства $Q(a_0) < \bar{Q}_E$, можно получать отбрасыванием отрицательных наблюдений.

2. Экспоненциальная парабола. Этот вид тренда представляет собой очевидное обобщение предыдущего. Функция тренда имеет вид

$$f_t(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = e^{\alpha_1 + \alpha_2 t + \alpha_3 t^2}, \quad t = 1, \dots, n \geq 3. \quad (4.2)$$

Выделение тренда по простой (линейной) экспоненте предполагает гипотезу о приблизительно постоянном темпе прироста (его оценкой является α_2). Если же предположить, что темп прироста непостоянен, а изменяется со временем по линейному закону, придем к зависимости (4.2). Тогда темп прироста равен $\alpha_2 + 2\alpha_3 t$.

Регрессия (4.2) представляет собой частный случай квазилинейной регрессии с $g = \exp$ и однонаправленными $x_t = (1, t, t^2)^T$. Вычислим на основе предыдущего параграфа значение \bar{Q}_E . Рассмотрим плоскость в R^3 , параллельную координатной плоскости (α_2, α_3) , проходящую через точку $(1, 0, 0)$. В этой плоскости построим параболу (t, t^2) . Тогда точки на этой параболе, отвечающие $t = 1, 2, \dots, n$, будут концами векторов x_1, \dots, x_n . Конус Ко натянут на эти векторы. Поскольку парабола выпукла по t , каждый вектор x_t будет ребром конуса. Число граней конуса Ко равно n . Каждая грань порождается парами векторов $(x_1, x_2), \dots, (x_{n-1}, x_n)$, (x_1, x_n) и не содержит векторов, кроме ее порождающих.

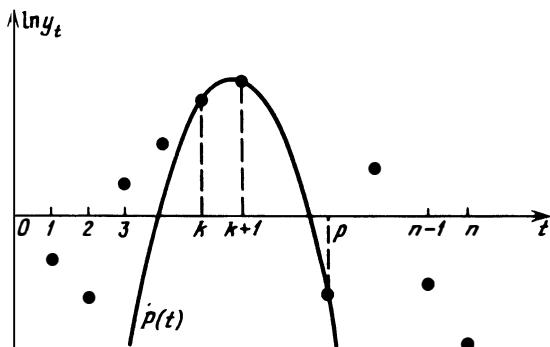


Рис. 4. Начальное приближение для (4.2), удовлетворяющее неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$

На основе предыдущего параграфа можно утверждать, что для экспоненциальной параболы

$$\bar{Q}_E = \sum_{t=1}^n y_t^2 - \max_t (y_t^2 + y_{t+1}^2), \quad (4.3)$$

где формально считаем $y_{n+1} = y_1$.

Теперь покажем, как на основе (4.3), используя общую идею из предыдущего параграфа, найти начальное приближение a_0 , удовлетворяющее неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Пусть

$$\max_t (y_t^2 + y_{t+1}^2) = y_k^2 + y_{k+1}^2.$$

Нанесем точки $(t, \ln y_t)$ на плоскость. Утверждаем, что для любых двух точек $(k, \ln y_k)$ и $(k+1, \ln y_{k+1})$ существует такая третья точка $(p, \ln y_p)$, для которой можно подобрать параболу $P(t) = \alpha_1 + \alpha_2 t + \alpha_3 t^2$ так, чтобы она прошла через эти три точки, а все остальные лежали ниже. Другими словами, существует такое $a_0 = (a_{01}, a_{02}, a_{03})$, $1 \leq p \leq n$, что $P(k) = \ln y_k$, $P(k+1) = \ln y_{k+1}$, $P(p) = \ln y_p$, $P(t) \leq \ln y_t$, $1 \leq t \leq n$ (рис. 4). Доказательство этого элементарного факта предоставляем читателю. Тогда, как и в случае простой экспоненты,

$$\begin{aligned} Q(a_0) &= \sum_{t=1}^n (y_t - e^{a_{01} + a_{02}t + a_{03}t^2})^2 \leq \\ &\leq \sum_{\substack{t \neq k \\ t \neq k+1, t \neq p}} y_t^2 < \sum_{t \neq k+1} y_t^2 = \bar{Q}_E. \end{aligned}$$

Как и в случае простой экспоненты, для модели (4.2) можно предложить массу других начальных приближений.

3. Модифицированная экспонента. "Модификация" заключается в аддитивном сдвиге простой экспоненты на некоторую величину. Таким образом, функция модифицированной экспоненты имеет вид

$$f_t(\alpha_1, \alpha_2', \alpha_3) = \alpha_1 + \alpha_2' e^{\alpha_3 t}, \quad t = 1, 2, \dots, n \geq 3,$$

где α_1 – параметр сдвига. Эта модель тренда в зависимости от знака α_2' используется, как правило, в двух вариантах. Первый соответствует $\alpha_2' > 0$:

$$f_t(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \alpha_1 + e^{\alpha_2 + \alpha_3 t}; \quad (4.4)$$

второй – $\alpha_2' < 0$:

$$f_t(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \alpha_1 - e^{\alpha_2 + \alpha_3 t}. \quad (4.5)$$

Оба тренда имеют разную форму в зависимости от знака α_3 : если $\alpha_3 > 0$, то тренд (4.4) имеет резко выраженный растущий характер, и при достаточно больших t он мало отличается от простой экспоненты (вклад параметра сдвига α_1 ничтожен); если $\alpha_3 < 0$, то зависимость (4.4) от t имеет убывающий характер с асимптотой α_1 . Наибольший интерес в рамках модели модифицированной экспоненты имеет случай (4.5) с $\alpha_3 < 0$. Это – модель возрастающего ряда с верхней асимптотой (насыщением). В экономике эта модель часто используется при моделировании количества потребления некоторого товара на душу населения (например, количества мяса, пар обуви и т.п.). Модели с насыщением имеют большое приложение и в технико-экономических исследованиях, при прогнозировании [51].

Начнем исследование существования оценки МНК с функции (4.4). Найдем сначала для нее нижнюю грань суммы квадратов на бесконечности. Пусть $\|\alpha\|^2 = \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 \rightarrow \infty$ (индекс k для простоты опускаем). При этом может быть три возможности:

- 1) $\alpha_1 \rightarrow \pm \infty$, сумма $\alpha_2^2 + \alpha_3^2$ ограничена;
- 2) $\alpha_1 \rightarrow \pm \infty$, $\alpha_2^2 + \alpha_3^2 \rightarrow \infty$;
- 3) параметр α_1 ограничен, $\alpha_2^2 + \alpha_3^2 \rightarrow \infty$.

Исследуем каждый из случаев в отдельности. Легко видеть, что в первом случае при $|\alpha_1| \rightarrow \infty$ $Q(\alpha) \rightarrow \infty$, так как $f_t(\alpha) \rightarrow \infty$. Во втором случае, если $\alpha_1 \rightarrow +\infty$, то $f_t(\alpha) = \alpha_1 + \exp(\alpha_2 + \alpha_3 t) > \alpha_1 \rightarrow +\infty$ и $Q(\alpha) \rightarrow +\infty$. Пусть теперь $\alpha_1 \rightarrow -\infty$ и $\alpha_2^2 + \alpha_3^2 \rightarrow \infty$. Для того чтобы предел $Q(\alpha)$ не был равен бесконечности, необходимо и достаточно, чтобы $f_t(\alpha)$ было ограниченным для любого $t = 1, \dots, n$. Для этого в свою очередь необходимо, чтобы асимптотические направления в плоскости (α_2, α_3) с каждым вектором $(1, t)$ составляли острый угол. Нетрудно догадаться, что направление будет асимптотическим, только если на соответствующем луче $\alpha_3 = 0$. Тогда $\alpha_2 \rightarrow \infty$, $\alpha_1 \rightarrow -\infty$, причем их можно выбрать так, чтобы сумма $\alpha_1 + \exp(\alpha_2)$ была равна любому наперед заданному числу. Для того чтобы предельное значение суммы квадратов было минимальным, за это число нужно взять $\bar{y} = \alpha_1 + \exp(\alpha_2)$, где $\bar{y} = \sum y_t/n$. Тогда предельное значение суммы квадратов равно (4.6) (см. ниже).

Наконец, рассмотрим третий случай. Как и при исследовании простой экспоненты, построим конус K , натянутый на векторы $(1, t)$. Ребрами сопряженного конуса K^- будут $x_n^* = (-n, 1)$ и $(1, -1) = x_1^*$. Если направление луча является внутренним для K^- , то $\exp(\alpha_2 + \alpha_3 t) \rightarrow 0$ для всех $t = 1, \dots, n$. Поэтому оптимальным значением параметра сдвига является $\hat{\alpha}_1 = \bar{y}$. Минимальное предельное значение $Q(\alpha)$ тогда равно

$$\bar{Q}_1 = \sum_{t=1}^n (y_t - \bar{y})^2. \quad (4.6)$$

Исследуем теперь ситуацию, когда направление луча совпадает с одним из ребер сопряженного конуса. Начнем с x_1^* . Тогда вдоль такого луча $\exp(\alpha_2 + \alpha_3 t) \rightarrow 0$ для всех $t = 2, \dots, n$. Выберем оптимальное начало луча $s = (s_1, s_2)$. Очевидно, его нужно взять таким, чтобы минимизировать квадратичную форму

$$(y_1 - \beta)^2 + \sum_2^n (y_t - \alpha_1)^2, \quad (4.7)$$

где $\beta = \alpha_1 + \exp(s_1 + s_2) > \alpha_1$. Безусловный минимум (4.7) достигается при выборе $\hat{\beta} = y_1$, $\hat{\alpha}_1 = \bar{y}_n = \sum_2^n y_t / (n - 1)$. Если $y_1 > \bar{y}_n$, то минимум квадратичной формы (4.7) при ограничении $\beta > \alpha_1$ совпадает с безусловным минимумом и равен

$$\bar{Q}_3 = \sum_2^n (y_t - \bar{y}_n)^2.$$

Если же $y_1 \leq \bar{y}_n$, то инфимум (4.7) достигается при $\hat{\beta} = \hat{\alpha}_1 = \bar{y}$. Соответствующее значение при этом равно (4.6).

Аналогичные рассуждения имеют место, когда направление луча совпадает с x_n^* : при $y_n > \bar{y}_1 = \sum_1^{n-1} y_t / (n - 1)$ минимальным пределом $Q(\alpha)$ является

$$\bar{Q}_2 = \sum_1^{n-1} (y_t - \bar{y}_1)^2,$$

в противном случае получаем сумму (4.6)

Резюмируя результаты с учетом того, что $\bar{Q}_1 \leq \bar{Q}_2$ и $\bar{Q}_1 \leq \bar{Q}_3$, формулу для нижней грани суммы квадратов модифицированной экспоненты (4.4) можно записать в виде

$$\bar{Q}_E = \begin{cases} \bar{Q}_1, & \text{если } y_1 \leq \bar{y}_n, y_n \leq \bar{y}_1, \\ \bar{Q}_2, & \text{если } y_1 \leq \bar{y}_n, y_n > \bar{y}_1, \\ \bar{Q}_3, & \text{если } y_1 > \bar{y}_n, y_n \leq \bar{y}_1, \\ \min(\bar{Q}_2, \bar{Q}_3), & \text{если } y_1 > \bar{y}_n, y_n > \bar{y}_1. \end{cases} \quad (4.8)$$

На основе формулы (4.8) можно предлагать различные достаточные условия существования оценки МНК. Охарактеризуем каждый случай формулы вычисления \bar{Q}_E (4.8) с точки зрения формы расположения наблюдений y_1, y_2, \dots, y_n (рис. 5). В первом случае наблюдения имеют выпуклую вверх форму; концы y_1 и y_n опущены (рис. 5, а). Во втором случае левый конец y_1 опущен, а правый y_n загнут (рис. 5, б). В третьем случае, наоборот, левый конец приподнят, а правый опущен (рис. 5, в). Наконец, в последнем случае форма наблюдений имеет вид чаши: оба конца приподняты (рис. 5, г).

С точки зрения целесообразности подгонки по модели (4.4) наиболее естествен второй и третий случаи расположения наблюдений. Во втором случае следует ожидать $\alpha_3 > 0$, в третьем — $\alpha_3 < 0$. Остановим свое внимание сначала на втором случае. Итак, пусть $y_n > \bar{y}_1$, $y_1 \leq \bar{y}_n$. Докажем, что

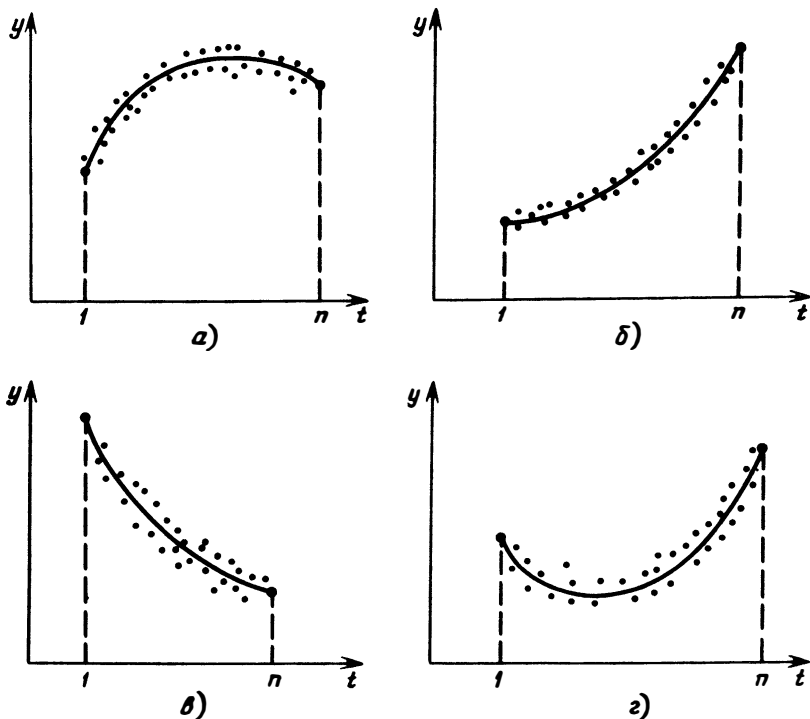


Рис. 5. Разные формы расположения наблюдений в модифицированной экспоненте

если вдобавок $y_{n-1} > \bar{y}_1$; то оценка МНК в модели (4.4) существует. Вспомним условие существования оценки МНК в экспоненте (1.4) с возможно отрицательными наблюдениями. Положим $a_{01} = \bar{y}_1$, $z_t = y_t - \bar{y}_1$. По условию $z_n > 0$. Докажем, что в рассматриваемом случае $z_n > z_1$, т.е.

что $y_n > y_1$. Обозначим $S = \sum_2^{n-1} y_t$, тогда неравенства $y_n > \bar{y}_1$ и $y_1 \leq \bar{y}_n$

перепишутся как $(n-1)y_n > y_1 + S$ и $(n-1)y_1 \leq y_n + S$. Вычитая одно неравенство из другого, получаем требуемое. Как следует из § 1, для модели (1.4), если $z_{n-1} > 0$, существует такая пара (a_{02}, a_{03}) , что

$$\begin{aligned}
 Q(a_0) &= \sum_1^n (z_t - e^{a_{02} + a_{03}t})^2 = \\
 &= \sum_1^n (y_t - a_{10} - e^{a_{02} + a_{03}t})^2 < \sum_1^{n-1} z_t^2 = \sum_1^{n-1} (y_t - \bar{y}_1)^2 = \bar{Q}_E.
 \end{aligned}$$

Это означает, что начальное приближение a_0 приводит к значению суммы квадратов, меньшему предельного, т.е. оценка МНК существует, а множество (1.2) компактно. Конкретно, пара (a_{02}, a_{03}) находится тем же методом, что в случае простой экспоненциальной модели с отрицательными наблюдениями $\{z_t\}$.

Аналогично в третьем случае, если к условиям $y_1 > \bar{y}_n$, $y_n \leq \bar{y}_1$ добавляется $y_2 > \bar{y}_n$, оценка МНК в модифицированной экспоненте (4.4) существует.

Обратимся теперь к функции (4.5). Предоставляем читателю проверить, что для этого тренда

$$\bar{Q}_E = \begin{cases} \bar{Q}_1, & \text{если } y_1 \geq \bar{y}_n, \quad y_n \geq \bar{y}_1, \\ \bar{Q}_2, & \text{если } y_1 < \bar{y}_n, \quad y_n \geq \bar{y}_1, \\ \bar{Q}_3, & \text{если } y_1 \geq \bar{y}_n, \quad y_n < \bar{y}_1, \\ \min(\bar{Q}_2, \bar{Q}_3), & \text{если } y_1 < \bar{y}_n, \quad y_n < \bar{y}_1. \end{cases} \quad (4.9)$$

Как и в формуле (4.8), здесь каждому условию вычисления \bar{Q}_E соответствует определенная форма расположения наблюдений. Из четырех случаев наибольший интерес представляет третий (первый и четвертый неудовлетворительны по тем же причинам, что и в модели (4.4)); при втором варианте следует ожидать $\alpha_3 > 0$, т.е. $f_t \rightarrow -\infty$ при $t \rightarrow \infty$. Можно показать, что если к условиям $y_n < \bar{y}_1$, $y_1 \geq \bar{y}_n$ вдобавок имеет место $y_{n-1} < \bar{y}_1$, то оценка МНК существует. Начальное приближение a_0 , удовлетворяющее неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$, находится аналогично предыдущему случаю.

Существует многообразие других "приближенных" методов оценивания параметров модифицированной экспоненты (см., например, [51]). К сожалению, ни одно из них не гарантирует того, что соответствующая сумма квадратов будет меньше нижней грани на бесконечности. Мы не будем останавливаться на них подробно. Отметим лишь, что начальные приближения для функции (4.4), например, в случае $\alpha_3 > 0$ можно находить следующим образом. Зададим несколько значений $\alpha_1 < \min_t y_t$. Оценим для

каждого значения α_1 параметры линейной регрессии $\ln(y_t - \alpha_1) = \alpha_2 + \alpha_3 t + \xi_t$. Окончательно в качестве "оптимального" начального приближения выберем ту тройку параметров, которая приводит к наименьшей сумме квадратов. Можно ограничиться одним значением α_1 , тогда за следующее, подправленное значение можно взять $\Sigma(y_t - \exp(\hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_3 t))/n$, где $\hat{\alpha}_2$ и $\hat{\alpha}_3$ — оценки МНК линейной регрессии $\ln(y_t - \alpha_1) = \alpha_2 + \alpha_3 t + \xi_t$. Аналогично можно найти начальные приближения в случае модели (4.5). Практически при расчетах параметров модифицированной экспоненты методом наименьших квадратов хорошо иметь достаточно полный запас начальных приближений. Среди них необходимо выбрать то, которое приводит к наименьшему значению $Q(a_0)$.

4. Логистическая кривая. При подгонке данных, имеющих асимптоту, помимо модифицированной экспоненты, иногда используют так называемую логистическую кривую (или кривую Перла). Ее функция имеет вид

$$f_t(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \frac{\alpha_1}{1 + \exp(\alpha_2 - \alpha_3 t)}, \quad t = 1, 2, \dots, n \geq 3. \quad (4.10)$$

Наибольший интерес представляет случай $\alpha_3 > 0$. Для положительных наблюдений также естественно считать $\alpha_1 > 0$. Очевидно, при $t \rightarrow \infty$ $f_t(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \rightarrow \alpha_1$ — уровень насыщения (рис. 6). Так же как и модифицированная экспонента, логистическая кривая содержит три неиз-

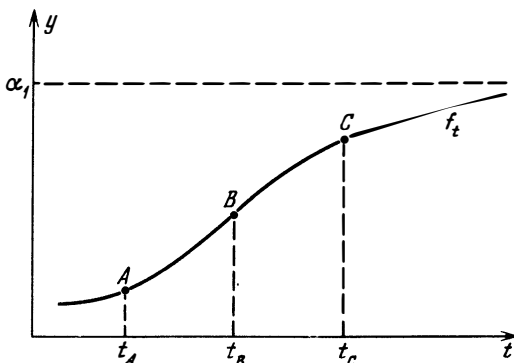


Рис. 6. Логистическая кривая

вестных параметра. Однако последняя имеет более гибкую форму. Для $t \leq t_B$ логистическая кривая выпукла вниз, для $t \geq t_B$ — выпукла вверх, т.е. t_B — точка перегиба: $d^2 f_t(t_B)/dt^2 = 0$. Легко найти $t_B = \alpha_2/\alpha_3$. Логистическая кривая отражает три фазы развития. Первая фаза — фаза подготовки, формирование базы (медленный рост): $t \leq t_A$. Вторая фаза — фаза интенсивного роста: $t_A \leq t \leq t_C$. Наконец, третья фаза — фаза насыщения (медленный рост): $t \geq t_C$. Формально точки t_A и t_C определим как те, которые обращают $d^2 f_t/dt^2$ соответственно в максимум и минимум. Таким образом по определению $d^3 f_t(t_A)/dt^3 = d^3 f_t(t_C)/dt^3 = 0$. Не утомляя читателя выкладками, сразу приведем окончательный результат:

$$t_A = \frac{\alpha_2 - \ln[7(5 + 3\sqrt{2})]}{\alpha_3} \approx \frac{\alpha_2 - 0,280}{\alpha_3}$$

$$t_C = \frac{\alpha_2 + \ln[7(5 - 3\sqrt{2})]}{\alpha_3} \approx \frac{\alpha_2 + 2,224}{\alpha_3}$$

Найдем для функции (4.10) нижнюю грань суммы квадратов на бесконечности ($y_1 > 0, y_2 > 0, \dots, y_n > 0$). Как и для модифицированной экспоненты, рассмотрим следующие три возможности:

- 1) $\alpha_1 \rightarrow \infty$, сумма $\alpha_2^2 + \alpha_3^2$ ограничена;
- 2) $\alpha_1 \rightarrow \infty$, $\alpha_2^2 + \alpha_3^2 \rightarrow \infty$;
- 3) параметр α_1 ограничен, $\alpha_2^2 + \alpha_3^2 \rightarrow \infty$.

Очевидно, в первом случае $Q(\alpha) \rightarrow \infty$. Во втором случае, если $\alpha_1 \rightarrow -\infty$, то $f_t \leq 0$ и $\lim Q(\alpha_k) \geq \sum_1^n y_t^2$. Если $\alpha_1 \rightarrow +\infty$, то

$$f_t(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_1} + \exp(\alpha_2 - \ln \alpha_1 - \alpha_3 t)} \sim \exp(\ln \alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 t).$$

Поэтому наименьшим предельным значением суммы квадратов в этом случае будет

$$\bar{Q}_1 = \sum_1^n y_t^2 - \max(y_1^2, y_n^2). \quad (4.11)$$

Наиболее интересен последний, третий случай. Рассуждения здесь похожи на те, что были приведены для модифицированной экспоненты. Если асимптотические направления в плоскости (α_2, α_3) являются внутренними для K^- , то предельным значением суммы квадратов является

$$\bar{Q}_2 = \sum_1^n (y_t - \bar{y})^2. \quad (4.12)$$

При совпадении асимптотического направления (α_2, α_3) с ребром $(1, -1)$ минимальный предел Q равен

$$\inf_{\beta < \alpha_1} [(\beta - y_1)^2 + \sum_2^n (y_t - \alpha_1)^2]. \quad (4.13)$$

Если $y_1 > \bar{y}_n = \sum_2^n y_t / (n - 1)$, то (4.13) равно (4.12); если имеет место обратное, то (4.13) равно

$$\bar{Q}_4 = \sum_2^n (y_t - \bar{y}_n)^2. \quad (4.14)$$

Аналогичные рассуждения проводятся и тогда, когда асимптотическое направление (α_2, α_3) совпадает с ребром $(-n, 1)$. Обозначим

$$\bar{Q}_3 = \sum_1^{n-1} (y_t - \bar{y}_1)^2,$$

где $\bar{y}_1 = \sum_1^{n-1} y_t / (n - 1)$, и

$$\tilde{Q} = \begin{cases} \bar{Q}_2, & \text{если } y_1 \geq \bar{y}_n, y_n \geq \bar{y}_1, \\ \bar{Q}_3, & \text{если } y_1 \geq \bar{y}_n, y_n < \bar{y}_1, \\ \bar{Q}_4, & \text{если } y_1 < \bar{y}_n, y_n \geq \bar{y}_1, \\ \min(\bar{Q}_3, \bar{Q}_4), & \text{если } y_1 < \bar{y}_n, y_n < \bar{y}_1. \end{cases}$$

Тогда нижняя грань суммы квадратов логистической кривой (4.10) равна

$$\bar{Q}_E = \min(\bar{Q}_1, \tilde{Q}). \quad (4.15)$$

Так же как и для модифицированной экспоненты, на основе формулы (4.15) можно строить различные достаточные критерии существования оценки МНК. Используя начальное приближение для экспоненциальной модели (1.4) с отрицательными наблюдениями, предложенное в § 1, для логистической кривой можно найти такое начальное приближение a_0 ,

что $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Было предложено большое количество приближенных методов оценивания параметров логистической кривой. С некоторыми из них можно ознакомиться по книге [51]. Однако, по-видимому, ни один из этих методов не дает начального приближения, которое удовлетворяет желаемому неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Мы предлагаем в качестве простой процедуры приближенного оценивания параметров задавать сетку параметра α_1 , каждый раз оценивая линейную регрессию $\ln(\alpha_1/y_t - 1) = \alpha_2 - \alpha_3 t + \xi_t$.

§ 5. Производственные функции

В этом параграфе мы рассмотрим еще один класс нелинейных регрессий, на котором проиллюстрируем методы доказательства существования оценки МНК и выбор удовлетворительных начальных приближений. *Производственная функция* (ПФ)¹⁾ — одно из важных понятий математической экономики — связывает количество используемых ресурсов X_1, \dots, X_p с выпуском продукции Y . Таким образом, по определению ПФ есть функциональная зависимость $Y = F(X_1, \dots, X_p)$. Для нас важно, что производственные функции часто содержат неизвестные параметры, которые необходимо оценить на основе имеющейся статистической информации. Таким образом, задача верификации ПФ сводится к задаче оценивания нелинейной регрессии. Как и прежде, оценку будем производить по методу наименьших квадратов. Мы ограничиваемся случаем $p = 2$. В качестве факторов производства рассматриваются $X_1 = K$ — капитал (основные фонды), $X_2 = L$ — труд (занятые или отработанные человеко-часы). По условию $Y > 0, K > 0, L > 0$.

1. Производственные функции типа Кобба—Дугласа. Этот класс функций является наиболее простым и распространенным. Оценивание ПФ типа Кобба—Дугласа сводится к оцениванию параметров квазилинейных регрессий с $g = \exp$, поэтому для них имеют место все результаты, полученные в § 3. Здесь мы только конкретизируем формулы вычисления \bar{Q}_E .

Необходимо сделать следующее важное замечание. Вычислительная проблема оценивания параметров для этого типа ПФ кардинальным образом зависит от того, считаем ли мы отклонения мультипликативными или аддитивными. В первом случае операция логарифмирования регрессии корректна; она приводит нас к линейной регрессии — вычислительной проблемы не возникает. Во втором случае регрессия является существенно нелинейной, так как к линейной не сводится. На практике во избежании серьезных вычислительных трудностей ПФ Кобба—Дугласа рассматривают в логарифмах, неявно предполагая, что отклонения мультипликативны. Мы, наоборот, считаем, что они аддитивны.

Простейшим представителем рассматриваемого класса производственных функций является ПФ Кобба—Дугласа

$$Y = AK^\alpha L^{1-\alpha}, \quad (5.1)$$

где $A > 0$ — коэффициент масштаба, α — эластичность по капиталу, $1 - \alpha$ —

¹⁾ Более подробно с теорией производственных функций читатель может ознакомиться по книгам [4, 21, 26].

эластичность по труду; параметры A и α неизвестны и подлежат статистическому оцениванию на основе n наблюдений троек (Y_i, K_i, L_i) , $i = 1, \dots, n$. Индекс i может соответствовать как моменту времени (динамическая ПФ), так и какому-либо предприятию, отрасли и т.п. (статическая ПФ). В экономике отношения именуется следующим образом: Y/L – производительность труда, Y/K – фондоотдача, K/Y – фондоемкость, K/L – фондоемкость.

Обозначим $x_i = \ln(K_i/L_i)$, тогда предположение об аддитивности ошибки приводит нас к нелинейной регрессии

$$Y_i = L_i \exp(\alpha_1 + \alpha_2 x_i) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (5.2)$$

Обозначим далее $z_i = (1, x_i) \in R^2$. Эти векторы однонаправлены, так как $z_{i1} = 1 > 0$ для всех $i = 1, \dots, n$. Пусть

$$x_j = \min_i x_i, \quad x_s = \max_i x_i.$$

Предположим, что j и s единственны. Тогда векторы $(1, x_j)$ и $(1, x_s)$ являются ребрами конуса Ko (§ 3). Нетрудно проверить, что присутствие в функции регрессии постоянного положительного множителя L_i не меняет системы рассуждений § 3, а все результаты остаются в силе. Так как по условию $Y_i > 0$, то нижняя грань $Q(\alpha)$ для ПФ (5.1) равна

$$\bar{Q}_E = \sum_1^n Y_i^2 - \max(Y_j^2, Y_s^2),$$

и оценка МНК существует. Хорошим начальным приближением является оценка МНК линейной, "прологарифмированной" регрессии

$$\ln \frac{Y_i}{L_i} = \alpha_1 + \alpha_2 \ln \frac{K_i}{L_i} + \xi_i.$$

Однако она может не удовлетворять неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Поэтому в запасе необходимо иметь оценку, гарантирующую это неравенство (см. § 3).

В рассмотренной ПФ эффект от увеличения масштаба производства отсутствует, т.е. увеличение ресурсов капитала и труда в некоторое число раз приводит к увеличению выпуска в то же самое число раз. Можно отказаться от этой гипотезы. Тогда придем к функции

$$Y = AK^\alpha L^\beta.$$

Очевидные переобозначения сведут задачу оценивания параметров этой ПФ к квазилинейной регрессии. Так же просто сводятся к квазилинейным регрессиям две другие разновидности динамических ПФ

$$Y_t = A e^{\gamma t} K_t^\alpha L_t^\beta, \quad Y_t = A e^{\gamma t} K_t^\alpha L_t^{1-\alpha}.$$

Здесь t – момент времени, $t = 1, \dots, n$; γ – темп прироста выпуска, ассоциируемый с научно-техническим прогрессом. В дальнейшем при рассмотрении динамических производственных функций вместо индекса i будем использовать t .

Прежде чем переходить к рассмотрению следующего класса производственных функций, введем следующий достаточно часто встречающийся

тип нелинейных регрессий. Говорим, что в нелинейной регрессии часть параметров линейна, если функцию регрессии можно записать в виде

$$f(\alpha) = F(\beta)\gamma, \quad (5.3)$$

где $\alpha = (\beta^T, \gamma^T)^T$, β – вектор собственно нелинейных параметров $k \times 1$, γ – вектор линейных параметров $p \times 1$ ($m = k + p$), $f(\alpha)$ – вектор-функция $n \times 1$, $F(\beta)$ – матрица $n \times p$. Коротко нелинейную регрессию с функцией (5.3) будем называть *регрессией с линейной частью*. Как и прежде, для простоты будем считать, что априорное множество параметров α совпадает с R^m .

Допустим, имеет место следующее неравенство:

$$F^T(\beta)F(\beta) \geq \delta I_m, \quad \beta \in R^k, \quad \delta > 0. \quad (5.4)$$

Это неравенство требует, чтобы матрица $F(\beta)$ была полного ранга не только для всех конкретных $\beta \in R^k$, но и для "предельных значений" $\|\beta\| \rightarrow \infty$. Если условие (5.4) имеет место, то при $\|\gamma\| \rightarrow \infty$ сумма квадратов $Q(\alpha) \rightarrow \infty$. Это следует из неравенства

$$\|f(\alpha)\|^2 = \gamma^T F^T(\beta)F(\beta)\gamma \geq \delta \|\gamma\|^2 \rightarrow \infty, \quad \|\gamma\| \rightarrow \infty.$$

Пусть $\|\alpha\|^2 = \|\beta\|^2 + \|\gamma\|^2 \rightarrow \infty$. Для того чтобы $Q(\alpha)$ не стремилась к бесконечности, необходимо, чтобы линейные параметры были ограничены. Таким образом, при вычислении нижней грани Q на бесконечности параметры β и γ можно рассматривать изолированно, поэтому

$$\bar{Q}_E = \min_{\gamma} \bar{Q}_{\beta}(\gamma), \quad (5.5)$$

где \bar{Q}_E – нижняя грань $Q(\alpha)$ на бесконечности (для регрессии с линейной частью (5.3)), $\bar{Q}_{\beta}(\gamma)$ – нижняя грань суммы квадратов на бесконечности регрессии (5.3) при фиксированных линейных параметрах γ . Например, в случае, когда $\bar{Q}_{\beta}(\gamma)$ достигается для матрицы F , не зависящей от γ ,

$$\bar{Q}_E = \min_{\gamma} \|y - F\gamma\|^2 = \|y - Fg\|^2 = y^T(I - F(F^T F)^{-1}F^T)y, \quad (5.6)$$

где

$$g = (F^T F)^{-1}F^T y.$$

Обратимость матрицы $F^T F$ есть следствие неравенства (5.4).

Рассмотрим еще один класс регрессий – *регрессии с аддитивной линейной частью*

$$f(\alpha) = F\gamma + \varphi(\beta),$$

где F – невырожденная матрица $n \times p$, $\varphi(\beta)$ – вектор-функция $n \times 1$. Будем считать, что $\varphi(\beta)$ ограничена:

$$\|\varphi(\beta)\| \leq r, \quad \beta \in R^k.$$

Тогда, если $\|\gamma\| \rightarrow \infty$, то $\|f(\alpha)\| \rightarrow \infty$, поэтому формула (5.5) остается в силе. В частности, если $k = 1$ и

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \varphi(\beta) = \varphi_1, \quad \lim_{\beta \rightarrow -\infty} \varphi(\beta) = \varphi_2,$$

то

$$\bar{Q}_E = \min(\bar{Q}_1, \bar{Q}_2),$$

где

$$\begin{aligned} \bar{Q}_j &= \min_{\gamma} \|y - \varphi_j - F \cdot \gamma\|^2 = \\ &= (y - \varphi_j)^T (I - F(F^T F)^{-1} F^T)(y - \varphi_j), \quad j = 1, 2. \end{aligned}$$

Этот прием с некоторыми модификациями будет использоваться далее.

2. Производственные функции с постоянной эластичностью замены (CES). Это – один из интересных классов нелинейных регрессий с богатым экономическим содержанием. Более подробно заинтересованный читатель может познакомиться с этими функциями по книгам [4, 21, 26]. Простейшим представителем этого класса является производственная функция вида

$$Y = A(\alpha K^{-\rho} + (1 - \alpha)L^{-\rho})^{-1/\rho}, \quad (5.7)$$

где A , α , ρ – неизвестные параметры, подлежащие оцениванию. Функция (5.7) не сводится к линейной как в предыдущем случае, поэтому задача оценивания ее параметров является существенно нелинейной. Как и ранее, могут быть рассмотрены две ситуации. В первой отклонения мультипликативны, во второй аддитивны. Мы будем считать отклонения мультипликативными; это требование для ПФ CES не является принципиально отличным от случая аддитивных отклонений, как это имело место для ПФ Кобба – Дугласа. Оно лишь упрощает изложение. Таким образом, по условию

$$Y_i = A(\alpha K_i^{-\rho} + (1 - \alpha)L_i^{-\rho})^{-1/\rho} e^{\epsilon_i}, \quad 0 \leq \alpha \leq 1.$$

Возьмем логарифм от обеих частей, т.е. сведем регрессию к регрессии с аддитивными отклонениями¹⁾:

$$f_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \alpha_1 + \frac{1}{\alpha_3} \ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2), \quad (5.8)$$

или $f_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \alpha_1 + \varphi_i(\alpha_2, \alpha_3)$, где

$$\varphi_i(\alpha_2, \alpha_3) = \frac{1}{\alpha_3} \ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2), \quad (5.8')$$

$$y_i = \ln\left(\frac{Y_i}{L_i}\right), \quad x_i = \ln\left(\frac{K_i}{L_i}\right), \quad \alpha_1 = \ln A, \quad \alpha_2 = \alpha, \quad \alpha_3 = -\rho.$$

Эта регрессия имеет аддитивную линейную часть в виде первого параметра α_1 .

Докажем, что для идентифицируемости регрессии с функцией (5.8) (см. § 3) необходимо и достаточно, чтобы последовательность x_1, x_2, \dots, x_n принимала не менее трех различных значений. Пусть $f_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) =$

¹⁾ По определению полагаем $\varphi_i(\alpha_2, 0) = \lim_{\alpha_3 \rightarrow 0} \varphi_i(\alpha_2, \alpha_3) = \alpha_2 x_i$. Таким образом, частным случаем ПФ CES является ПФ Кобба – Дугласа (5.1).

$= f_i(\nu_1, \nu_2, \nu_3)$ для всех $i = 1, \dots, n$. Докажем, что $\alpha_j = \nu_j, j = 1, 2, 3$. Обозначим

$$p(x) = \frac{1}{\alpha_3} \ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x} + 1 - \alpha_2) - \frac{1}{\nu_3} \ln(\nu_2 e^{\nu_3 x} + 1 - \nu_2).$$

Покажем, что при $\alpha_3 \neq \nu_3$ уравнение $p(x) = \text{const}$ имеет не более двух решений. Имеем

$$p'_x = \frac{\alpha_2 e^{\alpha_3 x}}{\alpha_2 e^{\alpha_3 x} + 1 - \alpha_2} - \frac{\nu_2 e^{\nu_3 x}}{\nu_2 e^{\nu_3 x} + 1 - \nu_2}.$$

Очевидно, знак p'_x совпадает со знаком величины

$$\begin{aligned} & \alpha_2 e^{\alpha_3 x} (\nu_2 e^{\nu_3 x} + 1 - \nu_2) - \nu_2 e^{\nu_3 x} (\alpha_2 e^{\alpha_3 x} + 1 - \alpha_2) = \\ & = \alpha_2 (1 - \nu_2) e^{\alpha_3 x} - \nu_2 (1 - \alpha_2) e^{\nu_3 x}. \end{aligned}$$

Поэтому $p'_x > 0$ тогда и только тогда, когда

$$(\alpha_3 - \nu_3)x > \ln \frac{\nu_2 (1 - \alpha_2)}{\alpha_2 (1 - \nu_2)}.$$

Не теряя общности можно считать, что $\alpha_3 > \nu_3$. Тогда на интервале $(-\infty, x_0)$ функция $p(x)$ будет возрастающей, а на интервале (x_0, ∞) — убывающей, где x_0 — решение уравнения $p'_x = 0$, а это и значит, что уравнение $p(x) = \text{const}$ имеет не более двух решений. Равенство $f_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = f_i(\nu_1, \nu_2, \nu_3)$ эквивалентно $p(x_i) = \nu_1 - \alpha_1$. Если в последовательности x_1, \dots, x_n существует три разных элемента, то из доказанного следует $\alpha_3 = \nu_3$. Отсюда уже легко получить $\alpha_1 = \nu_1, \alpha_2 = \nu_2$, что и требовалось доказать.

Обратно, если последовательность x_1, \dots, x_n принимает только два значения, можно подобрать такие параметры $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \neq (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$, что $f_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = f_i(\nu_1, \nu_2, \nu_3), i = 1, \dots, n$, — утверждение полностью доказано.

Таким образом, в дальнейшем при исследовании регрессии (5.8) будем предполагать, что последовательность x_1, \dots, x_n принимает не менее трех различных значений. Относительно параметров будем предполагать выполненным единственное ограничение $0 \leq \alpha_2 \leq 1$. Другими словами, априорное множество параметров для (5.8) будет

$$\Lambda = \{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \in R^3: -\infty < \alpha_1 < \infty, 0 \leq \alpha_2 \leq 1, -\infty < \alpha_3 < \infty\}.$$

Далее неоднократно будем пользоваться следующим очевидным неравенством:

$$\min(0, \alpha_3 x_i) \leq \ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2) \leq \max(0, \alpha_3 x_i). \quad (5.9)$$

Итак, пусть $\alpha_k = (\alpha_{1k}, \alpha_{2k}, \alpha_{3k}) \rightarrow \partial \Lambda$, т.е. либо $\alpha_{2k} \rightarrow 0$ ($\alpha_{2k} \rightarrow 1$), либо $\alpha_{1k}^2 + \alpha_{3k}^2 \rightarrow \infty$ (нижний индекс k далее опускаем). Рассмотрим последнюю возможность. Здесь имеют место три случая:

- 1) $|\alpha_1| \rightarrow \infty$, параметр α_3 ограничен;
- 2) $|\alpha_1| \rightarrow \infty, |\alpha_3| \rightarrow \infty$;
- 3) параметр α_1 ограничен, $|\alpha_3| \rightarrow \infty$.

В первом случае в силу неравенства (5.9) $f_i = \alpha_1 + \varphi_i \rightarrow \infty$, поэтому $Q(\alpha) \rightarrow \infty$. Во втором случае также $Q(\alpha) \rightarrow \infty$. Это следует, например, при $\alpha_3 \rightarrow \infty$ из неравенства

$$\min(0, x_i) \leq \frac{1}{\alpha_3} \ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2) \leq \max(0, x_i).$$

Наибольший интерес представляет третий случай.

Сначала фиксируем $0 < \alpha_2 < 1$. Пусть $\alpha_3 \rightarrow +\infty$, тогда по правилу Лопиталя при $x_i > 0$

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow \infty} \frac{\ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2)}{\alpha_3} = \lim_{\alpha_3 \rightarrow \infty} \frac{\alpha_2 x_i e^{\alpha_3 x_i}}{\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2} = x_i$$

(при $x_i \leq 0$ предел очевидно равен нулю). Аналогично

$$\lim_{\alpha_3 \rightarrow -\infty} \frac{\ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2)}{\alpha_3} = \min(0, x_i).$$

Обозначим

$$v_i = y_i - \max(0, x_i), \quad w_i = y_i - \min(0, x_i), \quad r_i = y_i - x_i.$$

Тогда, если $\alpha_3 \rightarrow +\infty$ и α_2 фиксировано, то наименьшим предельным значением суммы квадратов будет

$$\tilde{Q}_1 = \min_{\alpha_1} \sum (v_i - \alpha_1)^2 = \sum (v_i - \bar{v})^2.$$

Если $\alpha_3 \rightarrow -\infty$, то минимальным предельным значением будет

$$\tilde{Q}_2 = \min_{\alpha_1} \sum (w_i - \alpha_1)^2 = \sum (w_i - \bar{w})^2.$$

Если $\alpha_2 = 0$, то

$$\tilde{Q}_3 = \min_{\alpha_1} \sum (y_i - \alpha_1)^2 = \sum (y_i - \bar{y})^2,$$

а если $\alpha_2 = 1$, то

$$\tilde{Q}_4 = \min_{\alpha_1} \sum (r_i - \alpha_1)^2 = \sum (r_i - \bar{r})^2.$$

Интересно отметить, что при $\alpha_3 \rightarrow -\infty$ ПФ с постоянной эластичностью замены вырождается в так называемую производственную функцию В. Леонтьева¹⁾:

$$F(K, L) = \min(AK, AL) = A \min(K, L).$$

При $\alpha_3 \rightarrow +\infty$ получаем другое предельное значение ПФ (5.7), которое

¹⁾ В литературе по производственным функциям указывается, что производственная функция В. Леонтьева нижевыписанного вида есть результат предельного перехода в ПФ CES. Иногда бездоказательно утверждается, что из CES-функции предельным переходом при $\alpha_3 \rightarrow -\infty$ можно получить двухпараметрическую ПФ Леонтьева $Y = \min(AK, BL)$. В конце параграфа приводится строгое доказательство этого факта, при этом предельный переход $\alpha_3 \rightarrow -\infty$ осуществляется одновременно с $\alpha_2 \rightarrow 0$ или $\alpha_2 \rightarrow 1$ (см. ниже).

соответствует ПФ

$$F(K, L) = \max(AK, AL) = A \max(K, L).$$

Итак, найдем для функции (5.8) нижнюю грань суммы квадратов на границе Λ . Найдем минимальные предельные значения $Q(\alpha)$ при условии, что (α_2, α_3) стремится к "углам" полосы в трехмерном пространстве $0 \leq \alpha_2 \leq 1, -\infty < \alpha_1, \alpha_3 < \infty$. Четыре угла соответствуют следующим четырем случаям сходимости:

- А) $\alpha_3 \rightarrow +\infty, \alpha_2 \rightarrow 0$;
- Б) $\alpha_3 \rightarrow +\infty, \alpha_2 \rightarrow 1$;
- В) $\alpha_3 \rightarrow -\infty, \alpha_2 \rightarrow 0$;
- Г) $\alpha_3 \rightarrow -\infty, \alpha_2 \rightarrow 1$.

Каждому из этих четырех случаев сходимости отвечают три варианта относительной скорости сходимости:

при $\alpha_2 \rightarrow 0$

$$а) \ln \alpha_2 = o(\alpha_1), \quad б) \alpha_3 = o(\ln \alpha_2), \quad в) \ln \alpha_2 = O(\alpha_3);$$

при $\alpha_2 \rightarrow 1$

$$а') \ln(1 - \alpha_2) = o(\alpha_3), \quad б') \alpha_3 = o(\ln(1 - \alpha_2)), \quad в') \ln(1 - \alpha_2) = O(\alpha_3).$$

Случай а) рассмотрим подробно. Итак, пусть вариантом сходимости будет а), т.е. $\ln \alpha_2 = o(\alpha_3)$. Тогда, если $x_i < 0$, то $\ln \alpha_2 + \alpha_3 x_i \rightarrow -\infty, \varphi_i \rightarrow 0$. Если $x_i > 0$, то $\ln \alpha_2 + \alpha_3 x_i \rightarrow +\infty$, поэтому $\varphi_i \sim \ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i}) / \alpha_3 \rightarrow x_i^1$. Таким образом, в случае а) предельной ПФ будет

$$\bar{f}_i = \alpha_1 + \max(0, x_i), \quad i = 1, \dots, n,$$

а соответствующим минимальным предельным значением $Q(\alpha)$ будет значение \tilde{Q}_1 .

Рассмотрим теперь случай б), т.е. когда $\alpha_3 = o(\ln \alpha_2)$. Теперь для любого x_i имеем $\ln \alpha_2 + \alpha_3 x_i \rightarrow -\infty$, поэтому $\varphi_i \rightarrow 0$, значит, предельной ПФ в этом случае будет $\bar{f}_i = \alpha_1$, а соответствующим предельным значением $Q(\alpha)$ будет значение \tilde{Q}_3 .

В случае А) наиболее интересен последний вариант в). Не теряя общности можно считать, что $\alpha_2 = \exp(-\beta\alpha_3), \beta > 0$. Тогда если $\beta < x_i$, то

$$\varphi_i \sim \frac{1}{\alpha_3} \ln e^{(x_i - \beta)\alpha_3} = x_i - \beta.$$

Если $\beta \geq x_i$, в частности, если $x_i < 0$, то

$$e^{(x_i - \beta)\alpha_3} + 1 - e^{-\beta\alpha_3} \rightarrow 1,$$

откуда $\varphi_i \rightarrow 0$. Так, собирая воедино результаты, можно считать, что в этом случае в условиях сходимости в) имеем

$$f_i(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \rightarrow \bar{f}_i(\alpha_1, \beta) = \alpha_1 + \min(x_i - \beta, 0) \quad (5.10)$$

– предельная ПФ на границе, где $\beta \sim -\ln \alpha_2 / \alpha_3 > 0, i = 1, \dots, n$.

¹⁾ Запись $A \sim B$ означает $A/B \rightarrow 1$.

Таблица 5.1. Предельные ПФ и соответствующие суммы квадратов

Случай сходимости	Вариант сходимости	Предельная функция \bar{f}_i	Минимальное предельное значение $Q(\alpha)$
А)	$\ln \alpha_2 = o(\alpha_2)$	$\alpha_1 + \max(0, x_i)$	\tilde{Q}_1
	$\alpha_3 \rightarrow +\infty$ $\alpha_2 \rightarrow 0$	α_1	\tilde{Q}_3
	$\ln \alpha_2 / \alpha_3 \rightarrow \beta$, $\beta > 0$	$\alpha_1 + \max(x_i - \beta, 0)$	$\bar{Q}_A = \min_{\alpha_1, \beta > 0} Q_A(\alpha_1, \beta)$
Б)	$\ln(1 - \alpha_2) = o(\alpha_2)$	$\alpha_1 + \max(0, x_i)$	\tilde{Q}_1
	$\alpha_3 \rightarrow +\infty$ $\alpha_2 \rightarrow 1$	$\alpha_1 + x_i$	\tilde{Q}_4
	$\ln(1 - \alpha_2) / \alpha_3 \rightarrow \beta$ $\beta > 0$	$\alpha_1 + \max(x_i, -\beta)$	$\bar{Q}_B = \min_{\alpha_1, \beta > 0} Q_B(\alpha_1, \beta)$
В)	$\ln \alpha_2 = o(\alpha_2)$	$\alpha_1 + \min(0, x_i)$	\tilde{Q}_2
	$\alpha_3 \rightarrow -\infty$ $\alpha_2 \rightarrow 0$	α_1	\tilde{Q}_3
	$\ln \alpha_2 / \alpha_3 \rightarrow \beta$ $\beta > 0$	$\alpha_1 + \min(x_i + \beta, 0)$	$\bar{Q}_B = \min_{\alpha_1, \beta > 0} Q_B(\alpha_1, \beta)$
Г)	$\ln(1 - \alpha_2) = o(\alpha_2)$	$\alpha_1 + \min(0, x_i)$	\tilde{Q}_2
	$\alpha_3 \rightarrow -\infty$ $\alpha_2 \rightarrow 1$	$\alpha_1 + x_i$	\tilde{Q}_4
	$\ln(1 - \alpha_2) / \alpha_3 \rightarrow \beta$ $\beta > 0$	$\alpha_1 + \min(x_i - \beta, 0)$	$\bar{Q}_\Gamma = \min_{\alpha_1, \beta > 0} Q_\Gamma(\alpha_1, \beta)$

Предельное значение суммы квадратов при фиксированных α_1 и $\beta > 0$ равно

$$Q_A(\alpha_1, \beta) = \sum_i (y_i - \alpha_1 - \max(x_i - \beta, 0))^2,$$

а минимальное предельное значение $Q(\alpha)$ в случае А) равно

$$\bar{Q}_A = \inf_{\alpha_1, \beta > 0} Q_A(\alpha_1, \beta). \tag{5.11}$$

Мы не будем расписывать подробно все случаи сходимости, так как они получаются аналогичным образом. Приведем поэтому лишь окончательные результаты, которые сведены в таблицу 5.1; $Q_B(\alpha_1, \beta)$, $Q_V(\alpha_1, \beta)$ и $Q_\Gamma(\alpha_1, \beta)$ – суммы квадратов отклонений наблюдений y_i от соответствующих предельных функций \bar{f}_i .

Нетрудно заметить, что случаи А), Б) и В), Г) можно объединить. Действительно, предельные производственные функции в случае А) и Б) можно записать как

$$\bar{f}_i(\alpha_1, \beta) = \alpha_1 + \max(x_i, \beta), \quad -\infty < \beta < +\infty, \tag{5.12}$$

а в случае В) и Г)

$$\bar{f}_i(\alpha_1, \beta) = \alpha_1 + \min(x_i, \beta), \quad -\infty < \beta < +\infty. \tag{5.13}$$

Обозначим

$$Q_{AB}(\alpha_1, \beta) = \sum_i (y_i - \alpha_1 - \max(x_i, \beta))^2,$$

$$Q_{B\Gamma}(\alpha_1, \beta) = \sum_i (y_i - \alpha_1 - \min(x_i, \beta))^2,$$

$$\bar{Q}_{AB} = \inf_{\alpha_1, \beta} Q_{AB}(\alpha_1, \beta), \quad (5.14)$$

$$\bar{Q}_{B\Gamma} = \inf_{\alpha_1, \beta} Q_{B\Gamma}(\alpha_1, \beta). \quad (5.15)$$

Понятно, что нижней гранью суммы квадратов на границе априорного множества Λ для ПФ CES будет

$$\bar{Q}_E = \min(\bar{Q}_{AB}, \bar{Q}_{B\Gamma}). \quad (5.16)$$

Как находить это значение, т.е. как вычислить \bar{Q}_{AB} и $\bar{Q}_{B\Gamma}$? Ранжируем наблюдения в порядке возрастания x_i : $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. Рассмотрим, например, задачу (5.14). Дело осложняется тем, что β — нелинейный параметр. Разобьем числовую ось на $n + 1$ интервал $(-\infty, x_1]$, $[x_1, x_2]$, \dots , $[x_n, \infty)$. Заметим, что если $\beta \leq x_1$, то в случае AB

$$Q(\alpha_1, \beta) = \sum_1^n (y_i - \alpha_1 - \beta)^2.$$

Если $x_1 \leq \beta \leq x_2$, то

$$Q(\alpha_1, \beta) = (y_1 - x_1 - \alpha_1)^2 + \sum_2^n (y_i - \alpha_1 - \beta)^2,$$

и т.д. Для того чтобы вычислять минимумы этих выражений, можно воспользоваться следующим фактом.

Лемма 5.1. Пусть u_1, \dots, u_n — некоторая последовательность. Обозначим

$$\bar{u}_{1k} = \sum_1^k u_i / k, \quad \bar{u}_{kn} = \sum_{k+1}^n u_i / (n - k),$$

$$Q(\tau, \nu) = \sum_1^k (u_i - \tau)^2 + \sum_{k+1}^n (u_i - \tau + \nu)^2,$$

где $-\infty < \tau < +\infty$, $\nu_1 \leq \nu \leq \nu_2$. Тогда

$$\min_{\substack{-\infty < \tau < +\infty \\ \nu_1 \leq \nu \leq \nu_2}} Q(\tau, \nu) = \begin{cases} Q(\bar{u}_{1k}, \bar{u}_{1k} - \bar{u}_{kn}), & \text{если } \nu_1 \leq \bar{u}_{1k} - \bar{u}_{kn} \leq \nu_2, \\ Q(\tau_1, \nu_2), & \text{если } \bar{u}_{1k} - \bar{u}_{kn} > \nu_2, \\ Q(\tau_2, \nu_1), & \text{если } \bar{u}_{1k} - \bar{u}_{kn} < \nu_1, \end{cases}$$

где

$$\tau_1 = \frac{1}{n} \left[\sum_1^k u_i + (n - k) \nu_2 \right], \quad \tau_2 = \frac{1}{n} \left[\sum_1^k u_i + (n - k) \nu_1 \right].$$

Доказательство леммы следует из того, что если точка глобального минимума квадратичной формы не принадлежит системе линейных ограничений, то ее минимум лежит на границе.

Аналогично находится значение $\bar{Q}_{ВГ}$. Хотя на каждом интервале $x_k \leq \beta \leq x_{k+1}$, функция $Q(\alpha_1, \beta)$ является квадратичной, а значит, унимодальной, она может не быть таковой для $\beta \in (-\infty, +\infty)$.

Разумеется, трудно ожидать существования оценки параметров ПФ СЕС по методу наименьших квадратов без каких-либо ограничений на наблюдения. Ниже будут предложены условия, в рамках которых сумма квадратов в ПФ СЕС достигает своего инфимума.

Определение. Последовательность u_1, u_2, \dots, u_n называем *возрастающей в среднем*, если для любого $k = 1, \dots, n$

$$u_k > \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k u_i.$$

Пусть далее (u_i, v_i) – последовательность пар, причем $v_i \neq v_j$ при $i \neq j$. Говорим, что последовательность u_1, u_2, \dots, u_n является *возрастающей в среднем по $\{v_i\}$* , если она является возрастающей в среднем после перенумерации пар в соответствии с возрастанием v_i . Последовательность t_1, t_2, \dots, t_n называем *убывающей в среднем*, если для любого $k = 1, \dots, n$

$$t_k > \frac{1}{n-k+1} \sum_{i=k}^n t_i.$$

Последовательность пар (t_i, v_i) называем *убывающей в среднем по $\{v_i\}$* , если она является убывающей в среднем после перенумерации пар в соответствии с возрастанием v_i .

Содержание введенных определений раскрывается в следующей лемме.

Лемма 5.2. Пусть u_1, \dots, u_n – *возрастающая в среднем*, а t_1, \dots, t_n – *убывающая в среднем последовательности*. Тогда для любых $k = 1, \dots, n$ и $r = 1, \dots, n-k$

$$а) u_{k+r} > \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k u_i, \quad \frac{1}{k+r} \sum_{i=1}^{k+r} u_i > \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k u_i$$

и любого $r' = 1, \dots, k-1$

$$б) t_{k-r'} > \frac{1}{n-k+1} \sum_{i=k}^n t_i,$$

$$\frac{1}{n-k+r'+1} \sum_{i=k-r'}^n t_i > \frac{1}{n-k+1} \sum_{i=k}^n t_i.$$

До к а з а т е л ь с т в о. Докажем первое неравенство в а). При $r = 0$ оно следует из определения. Пусть оно верно для всех $0 \leq r' < r$. Докажем, что тогда оно верно и для r . Из определения возрастающей в среднем последовательности u_1, \dots, u_n следует

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{k+r} u_i &= \sum_{i=1}^k u_i + \sum_{i=k+1}^{k+r-1} u_i + u_{k+r} > \sum_{i=1}^k u_i + \frac{r-1}{k} \sum_{i=1}^k u_i + u_{k+r} = \\ &= \frac{k+r-1}{k} \sum_{i=1}^k u_i + u_{k+r}. \end{aligned}$$

Из того же определения с учетом предыдущего неравенства

$$(k+r)u_{k+r} > \sum_1^{k+r} u_i > \frac{k+r-1}{k} \sum_1^k u_i + u_{k+r}.$$

Переносим u_{k+2} в левую часть и сокращая на $k+r-1$, получаем доказываемое неравенство. Второе неравенство в а) доказывается сложением предыдущих. Неравенства в б) доказываются аналогично.

В целях простоты дальнейшего анализа будем считать, что $x_i \neq x_j, i \neq j$. Предположим, что наши наблюдения таковы, что y_1, \dots, y_n являются возрастающими, а $y_1 - x_1, \dots, y_n - x_n$ убывающими в среднем по x_i . Как следует из определения, это означает, что для любого $k = 1, \dots, n-1$

$$y_{k+1} > \frac{1}{k} \sum_1^k y_i, \quad y_k - x_k > \frac{1}{n-k} \sum_{k+1}^n (y_i - x_i). \quad (5.17)$$

Неравенства (5.17) будем называть *условиями естественной монотонности*. Их аргументируем следующим образом. Найдем

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_i} = \frac{\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i}}{\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2} > 0,$$

поэтому если модель регрессии (5.8) адекватна¹⁾, то мы вправе требовать, чтобы бóльшие значения x_i соответствовали и бóльшим значениям y_i . Это в определенном смысле и означает возрастание y_i в среднем по x_i . Экономически эта гипотеза вполне естественна: бóльшим значениям фондовооруженности соответствуют бóльшие значения производительности труда. Аналогично

$$\frac{\partial(\varphi_i - x_i)}{\partial x_i} = \frac{\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i}}{\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2} - 1 = -\frac{1 - \alpha_2}{\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2} < 0,$$

поэтому гипотеза об убывании $y_i - x_i$ в среднем по x_i является также весьма естественной. На экономическом языке это означает, что бóльшим значениям фондовооруженности отвечают меньшие значения фондоотдачи, что тоже весьма реально.

Теорема 5.1. *Если наблюдения $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n, x_1 < x_2 < \dots < x_n$ в производственной функции CES (5.8) обладают условиями естественной монотонности, то нижняя грань соответствующей суммы квадратов достигается, т.е. существует такое $a_0 \in R^3$, что $Q(a_0) < \bar{Q}_E$.*

Доказательство. Прежде всего заметим, что при доказательстве теоремы не теряя общности можно считать $x_i > 0$. Действительно, пусть $x_i > h$. Перепишем

$$\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} = \alpha_2 e^{\alpha_3 x_i - \alpha_3 h + \alpha_3 h} = (\alpha_2 e^{\alpha_3 h}) e^{\alpha_3 (x_i - h)}.$$

Обозначая в (5.8) $x'_i = x_i - h > 0$,

$$\alpha_2' = \alpha_2 e^{\alpha_3 h} / (\alpha_2 e^{\alpha_3 h} + 1 - \alpha_2), \quad \alpha_1' = \alpha_1 + \alpha_3^{-1} \ln(\alpha_2 e^{\alpha_3 h} + 1 - \alpha_2),$$

¹⁾ В том смысле, что данные, которые аппроксимируются моделью, имеют те же качественные характеристики, что и сама модель.

приходим к ПФ CES с положительными наблюдениями по x . При этом подобные преобразования не меняют истинности (или ложности) утверждений о достижимости нижней грани.

Проведем доказательство для случая $\bar{Q}_E = \bar{Q}_{AB}$, аналогично проводится доказательство в случае $\bar{Q}_E = \bar{Q}_{BG}$. Как было ранее отмечено, $Q_{AB}(\alpha_1, \beta)$ представляет собой кусочно-квадратичную функцию. Обозначим

$$P_k(\beta) = \min_{\alpha_1} Q_{AB}(\alpha_1, \beta) = \min_{\alpha_1} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha_1 - \max(x_i, \beta))^2,$$

$$x_k \leq \beta \leq x_{k+1},$$

где $k = 0, 1, \dots, n$ (формально полагаем $x_0 = -\infty$, $x_{n+1} = +\infty$). Функция $P_k(\beta)$ на каждом интервале представляет собой полином второго порядка, поскольку, как легко видеть,

$$P_k(\beta) = \sum_1^k (y_i - \beta - w(\beta))^2 + \sum_{k+1}^n (y_i - x_i - w(\beta))^2,$$

где

$$w(\beta) = \frac{1}{n} \left[\sum_1^k (y_i - \beta) + \sum_{k+1}^n (y_i - x_i) \right].$$

В частности,

$$P_0(\beta) = \sum_1^n \left[y_i - x_i - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_j - x_j) \right]^2 = \text{const}, \quad -\infty < \beta \leq x_1.$$

Возможное расположение полиномов $P_k(\beta)$ на соседних участках $[x_k, x_{k+1}]$ и $[x_{k+1}, x_{k+2}]$ показано на рис. 7. Случай 7, 2, как следует из леммы 5.1, соответствует двум неравенствам

$$\frac{1}{k} \sum_1^k y_i - \frac{1}{n-k} \sum_{k+1}^n (y_i - x_i) \geq x_{k+1}$$

и

$$\frac{1}{k+1} \sum_1^{k+1} y_i - \frac{1}{n-k-1} \sum_{k+2}^n (y_i - x_i) \leq x_{k+1}.$$

Покажем, что в условиях естественной монотонности эта ситуация невозможна. Допустим противное. Вычитая из первого неравенства второе, получим

$$\left(\frac{1}{k} \sum_1^k y_i - \frac{1}{k+1} \sum_1^{k+1} y_i \right) + \left(\frac{1}{n-k-1} \sum_{k+2}^n (y_i - x_i) - \frac{1}{n-k} \sum_{k+1}^n (y_i - x_i) \right) \geq 0.$$

Но как следует из леммы 5.2,

$$\frac{1}{k} \sum_1^k y_i < \frac{1}{k+1} \sum_1^{k+1} y_i,$$

$$\frac{1}{n-k-1} \sum_{k+2}^n (y_i - x_i) < \frac{1}{n-k} \sum_{k+1}^n (y_i - x_i),$$

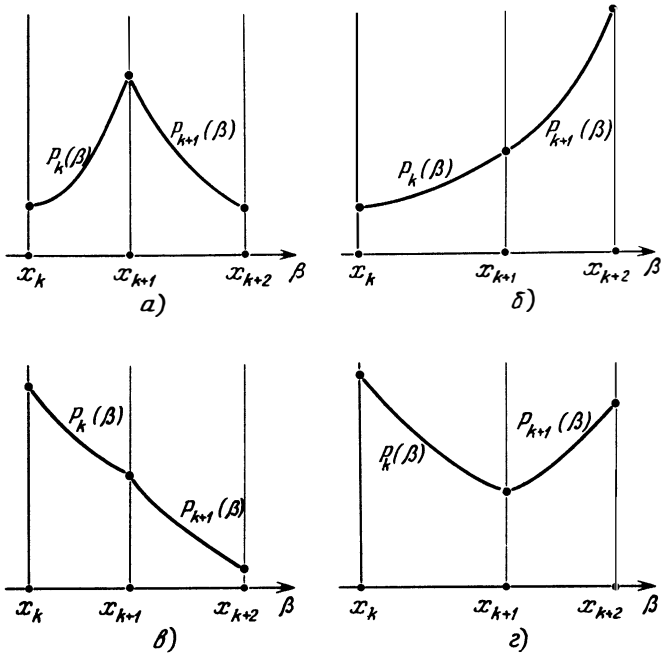


Рис. 7. Различные случаи расположения соседних полиномов второго порядка $P_k(\beta)$

– противоречие. Отсюда, в частности, следует, что оптимальное значение β не совпадает ни с одним из x_1, \dots, x_n .

Приступим теперь непосредственно к доказательству теоремы, а именно докажем, что сходимость $Q(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ к \bar{Q}_{AB} имеет место снизу. Покажем это на примере случая А), т.е. когда $\alpha_3 \rightarrow +\infty$, $\alpha_2 \rightarrow 0$, причем $\ln \alpha_2 \sim -\beta\alpha_3$, $\beta > 0$. Итак, пусть $\alpha_1 = a$, $\beta = b > 0$ выбраны так, что

$$\bar{Q}_{AB} = \min_{\alpha_1, \beta > 0} Q_{AB}(\alpha_1, \beta) = Q_{AB}(a, b).$$

Докажем, что $Q(\alpha_3) = Q(a, b, \alpha_3) \rightarrow \bar{Q}_{AB}$ при $\alpha_3 \rightarrow +\infty$ снизу. Обозначим

$$\tilde{f}_i = a + \frac{1}{\alpha_3} \ln(e^{(x_i - b)\alpha_3} + 1 - e^{-b\alpha_3}).$$

Как было установлено, при $\alpha_3 \rightarrow +\infty$

$$\tilde{f}_i \rightarrow \bar{f}_i = \begin{cases} a + x_i - b, & \text{если } b < x_i, \\ a, & \text{если } b \geq x_i. \end{cases}$$

Схема доказательства похожа на доказательство существования оценки МНК в квазилинейной регрессии (§ 3). Найдем разность

$$\begin{aligned} \Delta Q &= \bar{Q}_{AB} - Q(\alpha_3) = \sum (y_i - \bar{f}_i)^2 - \sum (y_i - \tilde{f}_i)^2 = \\ &= \sum (y_i - \bar{f}_i)^2 - \sum [(y_i - \bar{f}_i) + (\bar{f}_i - \tilde{f}_i)]^2 = \\ &= -\sum (\bar{f}_i - \tilde{f}_i)^2 - 2 \sum (\bar{f}_i - \tilde{f}_i)(y_i - \bar{f}_i). \end{aligned}$$

Определим порядок сходимости $\tilde{f}_i \rightarrow \bar{f}_i$. Если $0 < b < x_i$, то

$$\begin{aligned} \bar{f}_i - \tilde{f}_i &= x_i - b - \frac{1}{\alpha_3} \ln [e^{(x_i-b)\alpha_3} + 1 - e^{-b\alpha_3}] = \\ &= -\frac{1}{\alpha_3} \ln [1 + e^{(b-x_i)\alpha_3} - e^{-\alpha_3 x_i}]. \end{aligned}$$

Далее воспользуемся следующим известным пределом $[\ln(1 + \delta)]/\delta \rightarrow 1$ при $\delta \rightarrow 0$. Поэтому

$$\begin{aligned} \bar{f}_i - \tilde{f}_i &= -\frac{1}{\alpha_3} \frac{\ln[1 + e^{(b-x_i)\alpha_3} - e^{-\alpha_3 x_i}]}{e^{(b-x_i)\alpha_3} - e^{-\alpha_3 x_i}} (e^{(b-x_i)\alpha_3} - e^{-\alpha_3 x_i}) \sim \\ &\sim -\frac{1}{\alpha_3} (e^{(b-x_i)\alpha_3} - e^{-\alpha_3 x_i}) \sim -\frac{1}{\alpha_3} e^{(b-x_i)\alpha_3}, \quad \alpha_3 \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Заметим, что скорость сходимости очень высока – выше экспоненциальной. Наименьший порядок сходимости, как видим, соответствует минимальному $x_i > b$, который обозначим x_s . Важно, что для всех i : $x_i > b$ и $x_i \neq x_s$

$$\frac{\bar{f}_i - \tilde{f}_i}{\bar{f}_s - \tilde{f}_s} \sim \frac{\exp((b-x_i)\alpha_3)}{\exp((b-x_s)\alpha_3)} \rightarrow 0, \quad \alpha_3 \rightarrow +\infty.$$

Это означает, что для всех i : $x_i > x_s > b$ порядок сходимости $Q(\alpha_s) \rightarrow \bar{Q}_{AB}$ определяется порядком s -го члена второй суммы в разности ΔQ :

$$\Delta Q \sim -2(f_s - \bar{f}_s)(y_s - \bar{f}_s).$$

Пусть теперь $x_i \leq b$, тогда, как и прежде,

$$\begin{aligned} \bar{f}_i - \tilde{f}_i &= -\frac{1}{\alpha_3} \ln [1 + e^{(x_i-b)\alpha_3} - e^{-b\alpha_3}] \sim \\ &\sim -\frac{1}{\alpha_3} (e^{x_i-b} - e^{-b\alpha_3}) \sim -\frac{1}{\alpha_3} e^{(x_i-b)\alpha_3}, \quad \alpha_3 \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Таким образом, минимальный порядок сходимости $Q(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ к \bar{Q}_{AB} определяется $|b - x_s| = \min |b - x_i|$, $i = 1, \dots, n$ (как следует из предыдущего, $b - x_s \neq 0$). Докажем, что $y_s - \bar{f}_s > 0$. Это, очевидно, повлечет положительность знака ΔQ при $\alpha_3 \rightarrow +\infty$, что и означает сходимость $Q(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ к \bar{Q}_{AB} снизу. Но, как следует из леммы 5.2,

$$y_s - \bar{f}_s = y_s - x_s - (a - b) = y_s - x_s - \frac{1}{n-s} \sum_{s+1}^n (y_i - x_i) > 0$$

по условию естественной монотонности.

Таким образом, существует такое α_3^0 , что $\Delta Q < 0$, значит, инфимум $Q(\alpha)$ достигается, теорема доказана.

Остановимся теперь на весьма важном вопросе выбора хорошего начального приближения для функции CES. Самый простой метод – заменить CES-функцию на функцию Кобба – Дугласа. Таким образом, в качестве

начального приближения берем

$$(a_1^0, a_2^0) = \arg \min_{(\alpha_1, \alpha_2)} \sum (y_i - \alpha_1 - \alpha_2 x_i)^2.$$

Очевидно

$$a_2^0 = \frac{\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sum (x_i - \bar{x})^2},$$

$$a_1^0 = \bar{y} - a_2^0 \bar{x}.$$

Окончательно в качестве начального приближения для $Q(\alpha)$ с функцией (5.8) берем $a^0 = (a_1^0, a_2^0, 0)^1$. Не всегда, однако, будет выполняться неравенство

$$Q_0 = Q(a^0) < \bar{Q}_E.$$

С другой стороны, если $x_i \neq \text{const}$, $a_2^0 \neq 1$ и $a_2^0 \neq 0$, то $Q(a^0) < \tilde{Q}_j$, где \tilde{Q}_j — значение нижней грани суммы квадратов при фиксированном α_2 и $\alpha_3 \rightarrow \pm \infty$, $j = 1, 2, 3, 4$. Это следует из разложения, хорошо известного в линейном регрессионном анализе:

$$\sum (y_i - a_1^0 - a_2^0 x_i)^2 = \sum (y_i - \bar{y})^2 + (a_2^0)^2 \sum (x_i - \bar{x})^2.$$

Докажем, что если y_i и $x_i - \bar{x}$ возрастают в среднем по x_i , то $0 < a_2^0 < 1$, т.е. эластичность по основным фондам в производственной функции Кобба — Дугласа больше нуля и меньше единицы²⁾. Ранжируем наблюдения в порядке возрастания x_i ; при этом значение оценки МНК не изменится. Докажем сначала, что $a_2^0 > 0$. Для этого необходимо и достаточно показать, что $\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x}) > 0$. Воспользуемся преобразованием Абеля [48]:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i \beta_i = \sum_{i=1}^{n-1} (\alpha_i - \alpha_{i+1}) B_i + \alpha_n B_n, \quad B_i = \sum_{j=1}^i \beta_j.$$

Положим $\alpha_i = x_i - \bar{x}$, $\beta_i = y_i - \bar{y}$. Тогда

$$B_n = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}) = \sum y_i - n\bar{y} = 0,$$

поэтому

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x}) = - \sum_{i=1}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) B_i.$$

По условию $x_{i+1} - x_i > 0$. Докажем, что $B_i < 0$. Действительно, $B_n = 0$, а B_j/i — возрастающая последовательность:

$$\begin{aligned} \frac{B_{i+1}}{i+1} - \frac{B_i}{i} &= \\ &= \frac{1}{i+1} \sum_{j=1}^{i+1} y_j - \frac{1}{i} \sum_{j=1}^i y_j = \frac{iy_{i+1} - \sum_{j=1}^i y_j}{i(i+1)} > 0 \end{aligned}$$

по условию естественной монотонности.

¹⁾ При расчетах на ЭВМ следует вместо $a_3^0 = 0$ полагать $a_3^0 = \delta \neq 0$, где δ достаточно мало, чтобы избежать переполнения.

²⁾ В работе [27] это утверждение доказано при более сильном предположении: $x_i > x_j$ влечет $y_i > y_j$, $i \neq j$.

Для доказательства неравенства $a_2^0 < 1$ заметим, что

$$1 - a_2^0 = \frac{\sum (x_i - y_i - \bar{x} - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sum (x_i - \bar{x})^2},$$

где $\bar{x} - \bar{y} = \sum (x_i - y_i)/n$, поэтому все предыдущие рассуждения дословно повторяются для ряда $\{x_i - y_i\}$.

В 1967 г. Кментой [63] была предложена квадратическая аппроксимация CES-функции. Его идея заключается в следующем. Разложим функцию

$$\varphi(x; \alpha_2, \alpha_3) = \frac{1}{\alpha_3} \ln [\alpha_2 e^{\alpha_3 x} + 1 - \alpha_2]$$

по x в ряд Тейлора до членов второго порядка в окрестности $x = 0$. Для этого найдем

$$\varphi'_x = \frac{\alpha_2 e^{\alpha_3 x}}{\alpha_2 e^{\alpha_3 x} + 1 - \alpha_2},$$

$$\varphi''_x = \frac{\alpha_2 \alpha_3 (1 - \alpha_2) e^{\alpha_3 x}}{(\alpha_2 e^{\alpha_3 x} + 1 - \alpha_2)^2}.$$

Имеем $\varphi'_x(0) = \alpha_2$, $\varphi''_x(0) = \alpha_2(1 - \alpha_2)\alpha_3$, поэтому

$$\varphi(x; \alpha_2, \alpha_3) \approx \alpha_2 x + \frac{1}{2} \alpha_2 (1 - \alpha_2) \alpha_3 x^2. \quad (5.18)$$

Обозначим $\beta = \alpha_2(1 - \alpha_2)\alpha_3/2$ и рассмотрим следующую линейную регрессию¹⁾:

$$y_i = \alpha_1 + \alpha_2 x_i + \beta x_i^2 + \eta_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Пусть a_{01} , a_{02} , b_0 – соответствующие оценки МНК этой регрессии. Тогда начальное приближение по Кменте для CES-функции находится как

$$a_0 = (a_{01}, a_{02}, 2b_0/[a_{02}(1 - a_{02})]).$$

Разумеется, нельзя утверждать, что это начальное приближение удовлетворяет неравенству $Q(a_0) < \bar{Q}_E$. Более того, оно может оказаться вообще неприемлемым из-за того, что $a_{02} > 1$ или $a_{02} < 0$. Из теоретических соображений, однако, ясно, что чем больше последовательность x_1, \dots, x_n концентрируется около нуля, тем лучше будет аппроксимация Кменты и тем лучше будет его начальное приближение. Другими словами, можно ожидать, что начальное приближение Кменты будет хорошим, если $K_i \approx L_i$. Этот факт является весьма отрядным, так как в том случае, когда $K_i \gg L_i$ (или $L_i \leq K_i$), удовлетворительным начальным приближением, возможно, будет оценка ПФ Кобба – Дугласа. Таким образом, эти два приближения дополняют друг друга.

Что же делать, когда условие близости x_i нулю не выполняется? Терсби и Ловелл [71] предлагают нормировать данные. Например, положить $K'_i = K_i/\bar{K}$, $L'_i = L_i/\bar{L}$. Разумеется, для новых рядов концентрация x'_i вокруг

¹⁾ Здесь мы пользуемся методом переобозначения, который был описан в конце § 1.

нуля повысится, однако следует заметить, что переход в функции CES к другим рядам капитала и труда не оставляет инвариантными параметры α_2 и α_3 . Переход к новым рядам K_i и L_i , строго говоря, означает переход и к новой функции CES.

На самом деле можно, используя идею Кменты, найти удовлетворительное начальное приближение и в случае, когда, например, $K_i \geq L_i$ (или $L_i \leq K_i$) для всех $i = 1, \dots, n$. Покажем, как это сделать. Пусть $\bar{x} = \sum x_i/n \neq 0$. Преобразуем $\varphi(x; \alpha_2, \alpha_3)$ следующим образом:

$$\varphi(x; \alpha_2, \alpha_3) = \beta' + \frac{1}{\alpha_3} \ln [\alpha_2' e^{\alpha_3(x-\bar{x})} + 1 - \alpha_2'], \quad (5.19)$$

где

$$\alpha_2' = \frac{\alpha_2 e^{\alpha_3 \bar{x}}}{\alpha_2 e^{\alpha_3 \bar{x}} + 1 - \alpha_2}, \quad \beta' = \frac{1}{\alpha_3} \ln [\alpha_2 e^{\alpha_3 \bar{x}} + 1 - \alpha_2].$$

Оценим МНК линейную регрессию

$$y_i = \gamma_1 + \gamma_2(x_i - \bar{x}) + \gamma_3(x_i - \bar{x})^2 + \xi_i^1).$$

Пусть g_1, g_2, g_3 — соответствующие оценки МНК. Начальное приближение тогда является решением следующей нелинейной системы уравнений:

$$g_1 = \alpha_1, \quad g_2 = \frac{\alpha_2 e^{\alpha_3 \bar{x}}}{\alpha_2 e^{\alpha_3 \bar{x}} + 1 - \alpha_2}, \quad g_3 = \frac{\alpha_2(1 - \alpha_2)\alpha_3 e^{\alpha_3 \bar{x}}}{[\alpha_2 e^{\alpha_3 \bar{x}} + 1 - \alpha_2]^2}.$$

Эта система относительно интересующих нас параметров α_2 и α_3 может быть решена аналитически. Предоставляем читателю проверить, что решением этой системы является

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_1 &= g_1, \\ \hat{\alpha}_3 &= g_3 / [g_2(1 - g_2)], \\ \hat{\alpha}_2 &= [1 + (g_2^{-1} - 1)e^{\hat{\alpha}_3 \bar{x}}]^{-1}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Разумеется, решение будет существовать, если выражение под знаком логарифма положительно. Как и для предыдущего начального приближения, у нас нет уверенности в том, что $0 < \hat{\alpha}_2 < 1$, $Q(\hat{\alpha}) < \bar{Q}_E$.

Аппроксимация Кменты имеет следующую замечательную особенность: правая часть (5.19) совпадает с линейной аппроксимацией (5.8¹) как функцией параметра α_3 в точке $\alpha_3 = 0$. Это следует из разложения в ряд φ_i по степеням α_3 :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\alpha_3} \ln [\alpha_2 e^{\alpha_3 x_i} + 1 - \alpha_2] = \\ & = \alpha_2 x_i + \frac{1}{2} \alpha_2 (1 - \alpha_2) \alpha_3 x_i^2 + \frac{1}{6} \alpha_2 (1 - \alpha_2) (1 - 2\alpha_2) \alpha_3^2 x_i^3 + \dots \end{aligned} \quad (5.21)$$

Разложение (5.21) наталкивает на мысль о квадратичной аппроксимации

¹) К этой регрессии можно было бы прийти с помощью стандартного разложения в ряд Тейлора функции $\varphi(x; \alpha_2, \alpha_3)$ в окрестности точки \bar{x} . Преобразование (5.19) имеет другую положительную особенность, о которой речь пойдет ниже.

функции $\varphi_i(\alpha_2, \alpha_3)$ в нулевой точке. К сожалению, эта аппроксимация приводит опять к нелинейной регрессии

$$y_i = \alpha_1 + \alpha_2 x_i + \frac{1}{2} \alpha_2 (1 - \alpha_2) \alpha_3 x_i^2 + \frac{1}{6} (1 - \alpha_2) \alpha_2 (1 - 2\alpha_2) \alpha_3^2 x_i^3 + \xi_i, \quad (5.22)$$

однако более простой, чем исходная (5.8). Регрессия (5.22) принадлежит к классу (3,4) – связанной регрессии (см. § 3 гл. 3). На основе результатов гл. 7 можно построить специальные эффективные методы минимизации суммы квадратов для этого класса регрессий.

Другая возможность построения начальных приближений связана с аппроксимацией CES-функции на бесконечности, т.е. при $\alpha_3 \rightarrow \pm \infty$. Эта аппроксимация приводит нас опять же к нелинейной регрессии, более простой, чем исходная (5.8).

Теперь остановимся на другой немаловажной проблеме – проблеме спецификации CES-функции. Дело в том, что осуществляя замену переменных в пространстве параметров, функцию регрессии можно записывать в разной форме. Существенно, что от этого зависит скорость сходимости процессов минимизации суммы квадратов.

Первая спецификация основана на представлении (5.19). Таким образом, полагаем

$$f_i(\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3) = \alpha'_1 + \frac{1}{\alpha'_3} \ln[\alpha'_2 e^{\alpha'_3(x_i - \bar{x})} + 1 - \alpha'_2].$$

Одним из недостатков вышеописанных спецификаций CES-функций является ограниченность множества значений α_2 ($0 \leq \alpha_2 \leq 1$). В процессе минимизации суммы квадратов этот параметр может выходить за рамки $[0,1]$, что может привести к аварийному прерыванию процесса. Этого можно

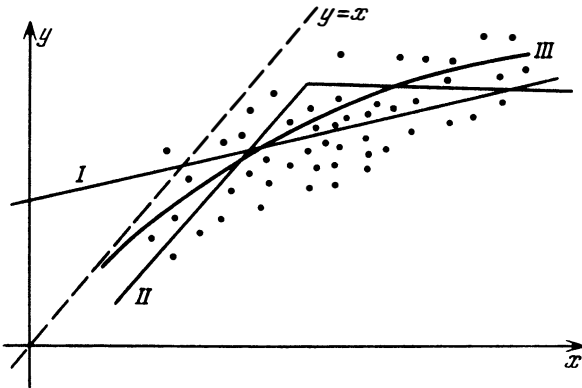


Рис. 8. Подгонка трех производственных функций: I – ПФ Кобба–Дугласа, II – предельная ПФ, III – ПФ CES

избежать, если CES-функцию специфицировать в виде

$$f_i(\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3) = \frac{1}{\alpha'_3} \ln [e^{\alpha'_1 + \alpha'_3 x_i} + e^{\alpha'_2}];$$

где $\alpha' = (\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3) \in R^3$, причем

$$\alpha_1 = \alpha'_1,$$

$$\alpha_2 = e^{\alpha'_1} / (e^{\alpha'_1} + e^{\alpha'_2}),$$

$$\alpha_3 = (e^{\alpha'_1} + e^{\alpha'_2}) / \alpha'_3.$$

Эту спецификацию можно объединить с предыдущей, записав

$$f_i(\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3) = \frac{1}{\alpha'_3} \ln [e^{\alpha'_1 + \alpha'_3(x_i - \bar{x})} + e^{\alpha'_2}].$$

Выбор конкретной спецификации должен в каждом конкретном случае решаться особо.

Подведем итоги исследования существования оценки МНК с содержательной точки зрения. Неформально можно утверждать, что границам множества $\Lambda = \{ -\infty < \alpha_1 < +\infty, 0 \leq \alpha_2 \leq 1, -\infty < \alpha_3 < +\infty \}$ отвечает своя совокупность производственных функций. Если существует хотя бы одна CES ("внутренняя" для Λ), имеющая сумму квадратов меньшую, чем каждая из этих предельных, то инфимум $Q(\alpha)$ достигается, т.е. оценка МНК, а значит, и лучшая CES, существует. Найдем вид предельных ПФ. Потенцируя (5.12) и (5.13), приходим к ПФ

$$Y = \min(AK, BL)$$

и

$$Y = \max(AK, BL),$$

где A и B – параметры. Таким образом, можно утверждать, что задача подгонки ПФ CES будет корректна, если найдется хотя бы одна CES, лучшая, чем ПФ Леонтьева для всех A и B (рис. 8).

НЕСУЩЕСТВОВАНИЕ И МНОГОЭКСТРЕМАЛЬНОСТЬ

Эта глава содержит в основном отрицательные результаты. Здесь будет показано, что задача оптимизации суммы квадратов

$$Q(\alpha) = \sum_1^n (y_i - f_i(\alpha))^2 \Rightarrow \min_{\Lambda},$$

где Λ – априорное множество параметров из R^m , $f_i(\alpha)$ – непрерывные функции, во-первых, при некомпактном множестве Λ может не иметь решения, т.е. нижняя грань $Q(\alpha)$ не достигается, и во-вторых, если и достигается, то функция $Q(\alpha)$ может быть многоэкстремальной.

В частности, цель главы – убедить читателя в том, что существование у суммы квадратов нескольких локальных минимумов – не патология, а реальность. Показывается, что практически для любой нелинейной регрессии вероятность “неудачных” наблюдений больше нуля. Таким образом, для любой нелинейной регрессии найденную оценку следует проверять не только на достижимость локального минимума ($\partial Q/\partial \alpha = 0$, $\partial^2 Q/\partial \alpha^2$ – положительно определенная матрица), но и на то, что полученное значение приводит к глобальному минимуму суммы квадратов. Последняя задача гораздо сложнее численного нахождения оценки. Конечно, можно начать из другого начального приближения; тогда, если процесс итерации опять сойдется к старой точке, можно быть более уверенным в том, что она дает глобальный минимум, однако это не решает проблемы.

Особую важность представляют аналитические методы проверки того является ли найденная стационарная точка точкой глобального минимума. Построению подобных критериев глобальности суммы квадратов в нелинейных регрессиях посвящены следующие главы книги.

§ 1. Недостижимость нижней грани суммы квадратов на некомпактном множестве

В предыдущей главе исследовалась проблема достижимости нижней грани суммы квадратов на некомпактном множестве. Там же на некоторых примерах нелинейных регрессий был продемонстрирован предложенный подход, на основе которого можно строить критерии достижимости и находить удовлетворительные начальные приближения. Иными слова-

ми, исследовалась корректность задачи оптимизации. В этом параграфе будет изучаться противоположная задача – задача некорректности.

Конкретно вопрос ставится следующим образом. Пусть для данного набора наблюдений $y = (y_1, y_2, \dots, y_n) \in R^n$ необходимо решить следующую задачу оптимизации:

$$Q(\alpha; y) = \sum (y_i - f_i(\alpha))^2 = \|y - f(\alpha)\|^2 \Rightarrow \min_{\alpha \in \Lambda} . \quad (1.1)$$

Здесь $Q(\alpha; y)$ – сумма квадратов отклонений (в этой главе мы иногда будем указывать в качестве аргумента y ; таким образом, допуская некоторую вольность, считаем $Q(\alpha) \equiv Q(\alpha; y)$), $f(\alpha) = (f_1(\alpha), f_2(\alpha), \dots, f_n(\alpha))$ – данная функция регрессии (непрерывная по α и достаточное число раз дифференцируемая), $R^m \supset \Lambda$ – априорное некомпактное множество параметров, которое в дальнейшем будем считать выпуклым телом.

Для данной регрессии $f(\alpha)$ задача (1.1) может решаться неоднократно для разного набора наблюдений. Первый вопрос, на который бы хотелось получить ответ: насколько часто задача (1.1) может не иметь решения? Второй вопрос: если в первой главе решалась проблема построения критериев достижимости нижней грани $Q(\alpha; y)$, то нельзя ли построить аналогичные критерии недостижимости этой грани? Зная ответ на второй вопрос, можно было бы заведомо не приступать к минимизации $Q(\alpha; y)$, если известно, что для данного y задача (1.1) не имеет решения. Решение указанных двух проблем и есть цель этого параграфа.

Начнем со случая $m = 1$. Как всегда относительно функции регрессии, будем предполагать, что $f(\alpha)$ – гладкая идентифицируемая (без самопересечений) кривая в R^n , Λ – отрезок с невключенными левым или правым концами. Пусть кривая $f(\alpha)$ имеет конечный хвост (если $f(\alpha)$ имеет бесконечные хвосты, т.е. если $\|f(\alpha)\| \rightarrow \infty$ при $|\alpha| \rightarrow \infty$, то $\bar{Q}_E = \infty$, поэтому задача (1.1) имеет решение для любого $y \in R^n$). Не теряя общности можно считать, что Λ не содержит левого конца и левый же конец $f(\alpha)$ конечен (для простоты ограничимся случаем лишь одного конечного хвоста). Далее не теряя общности можно считать, что $\Lambda = (0, T]$, либо $\Lambda = (0, T)$. В первом случае $T < \infty$, во втором возможно $T = \infty$. Действительно, если левый конец отрезка Λ есть $-\infty$, всегда некоторым монотонным преобразованием (переобозначением параметра α) можно свести априорное множество параметров к интервалу с нулевым левым концом. В частности, можно считать кривую $f(\alpha)$ натурально параметризованной относительно левого конца, что и будем предполагать в дальнейшем.

Допустим, что существуют пределы ¹⁾

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} f(\alpha) = u, \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \dot{f}(\alpha) = v, \quad v \neq 0,$$

причем $f(\alpha) \neq u$ для $\forall \alpha \in \Lambda$. Это условие будем называть *условием идентифицируемо гладкой продолжаемости*. По сути дела это означает, что $f(\alpha)$ продолжаемо до $\alpha = 0$, если положить $f(0) = u$, $\dot{f}(0) = v$, причем продолженная таким образом кривая останется идентифицируемой на $[0, T]$, где под } понимаем либо), либо] .

¹⁾ $\dot{f}(\alpha)$ обозначает вектор-производную $f(\alpha)$.

Теорема 1.1. Множество наблюдений $y \in R^n$, для которых сумма квадратов на некомпактном выпуклом множестве $\Lambda \subset R^1$ не достигает своей нижней грани для идентифицируемо гладко продолжаемой регрессии, имеет меру Лебега, отличную от нуля.

Доказательство. Будем пользоваться обозначениями (1.1). Для простоты будем считать $\Lambda = (0, T]$. Для каждого $a \in (0, T]$ рассмотрим множество векторов $\{f(\alpha) - u : 0 < \alpha \leq a\}$. Докажем, что существует такое a , что это множество лежит в некотором заостренном конусе. Действительно, рассмотрим следующую непрерывную функцию:

$$\psi(\alpha) = \cos(f(\alpha) - u, \hat{v}) = \frac{(f(\alpha) - u, v)}{\|f(\alpha) - u\| \|v\|}, \quad 0 < \alpha \leq T.$$

Очевидно $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \psi(\alpha) = 1$, поскольку для $\alpha > 0$

$$\cos(f(\alpha) - u, \hat{v}) = \cos\left(\frac{1}{\alpha} (f(\alpha) - u), \hat{v}\right)$$

и $(f(\alpha) - u)/\alpha \rightarrow v$ при $\alpha \rightarrow 0$. Пусть выбрано произвольно $0 < \tau < 1$. Обозначим b – первый корень уравнения $\psi(\alpha) = \tau$:

$$b = \sup_{\psi(\beta) > \tau \forall \beta < \alpha} \alpha, \quad \psi(b) = \tau.$$

Тогда для всех $\alpha \in (0, b]$ имеем $\cos(f(\alpha) - u, \hat{v}) \geq \tau$. А это означает, что множество $\{f(\alpha) : 0 < \alpha \leq b\}$ лежит в заостренном круговом конусе K_u с вершиной в точке u и углом раствора $2 \arccos \tau < \pi$. Построим для этого конуса отрицательно сопряженный конус K_u^- (рис. 9). Обозначим

$$a(y) = \arg \min_{0 \leq \alpha \leq T} Q(\alpha; y); \tag{1.2}$$

утверждаем тогда, что для любого $y \in K_u^-$ либо $a(y) = 0$, либо $a(y) > b$.

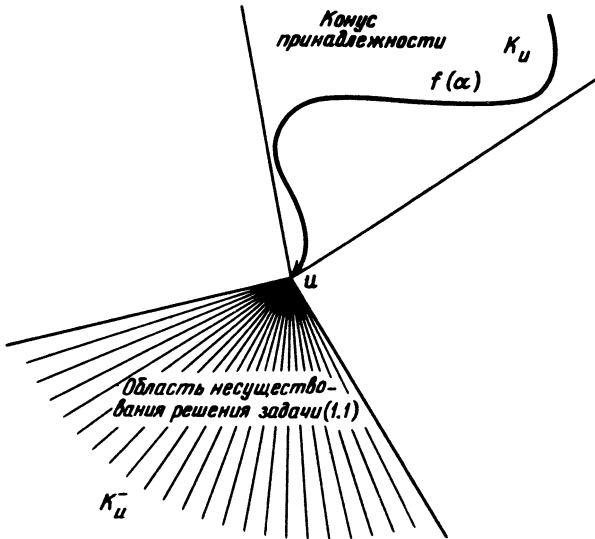


Рис. 9. Конус принадлежности и область несуществования оптимизационной задачи (1.1)

Действительно, допустим противное, т.е. что $0 < a(y) \leq b$ для некоторого $y \in K_u^-$. Проведем через точки y , u и $f(a(y))$ плоскость. Угол, образованный отрезками (y, u) и $(f(a(y)), u)$, как следует из определения K_u^- , является тупым, а значит, $\|y - f(a(y))\| > \|y - u\|$ как сторона треугольника, лежащая против тупого угла. Таким образом, получаем

$$Q(a(y); y) > Q(0, y),$$

что противоречит (1.2).

Обозначим далее

$$\delta^2 = \inf_{a \geq b} Q(\alpha; u).$$

Нетрудно видеть, что $\delta \neq 0$, так как в противном случае придем в противоречие с идентифицируемостью регрессии на замыкании Λ . Опишем вокруг u окрестность $V(u; \delta/3)$ радиуса $\delta/3$. Докажем, что тогда для любого $y \in V(u, \delta/3)$ $a(y) < b$. Действительно, по определению

$$Q(0; y) = \|y - u\|^2 \leq \delta^2/9.$$

Но из неравенства треугольника для $\alpha \geq b$ следует

$$\|y - f(\alpha)\| \geq \|u - f(\alpha)\| - \|y - u\| \geq \delta - \frac{\delta}{3} = \frac{2}{3} \delta,$$

т.е.

$$Q(\alpha; y) \geq \frac{4}{9} \delta^2 > Q(0; y), \quad \alpha \geq b,$$

значит, $a(y) < b$.

Для завершения доказательства теоремы осталось с очевидностью заметить, что если $y \in K_u^- \cap V(u; \delta/3)$, то ближайшей к y точкой кривой $f(\alpha)$, $0 \leq \alpha \leq T$, будет $u = f(0)$. А это и значит, что для этих наблюдений задача оптимизации $Q(\alpha; y)$ для $\alpha \in \Lambda$ не имеет решения, теорема доказана.

Используя идеи последнего доказательства, можно предложить следующий критерий некорректности задачи (1.1).

Определение. Пусть $f(\alpha)$ – идентифицируемо гладко продолжаемая кривая, $\alpha \in \Lambda$ – некомпактное выпуклое множество на R^1 ; не теряя общности можно считать $\Lambda = (0, T)$, причем

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} f(\alpha) = u. \tag{1.3}$$

Конусом принадлежности называем конус K , для которого

$$f(\alpha) - u \in K \quad \forall \alpha \in \Lambda. \tag{1.4}$$

Теорема 1.2. Пусть для кривой регрессии имеет место (1.3) и конус принадлежности K заострен. Тогда для всех $y \in K^- + u$ задача оптимизации (1.1) не имеет решения.

Доказательство повторяет соответствующее место из доказательства предыдущей теоремы. Показывается, что

$$\inf_{\alpha \in \Lambda} \|y - f(\alpha)\|^2 = \|y - u\|^2 \quad \forall y \in K^- + u,$$

поскольку для всех $\alpha > 0$

$$\|y - f(\alpha)\|^2 > \|y - u\|^2,$$

так как против тупого угла в треугольнике лежит большая сторона.

Перейдем теперь к многомерному случаю. Функцию регрессии $f(\alpha)$ считаем гладкой и идентифицируемой, $R^m \supset \Lambda$ — некомпактное выпуклое множество в R^m . Допустим, регрессия имеет конечный хвост, т.е.

$$f(\alpha_k) \rightarrow u \neq \infty, \quad \alpha_k \rightarrow \alpha_* \in \partial\Lambda, \quad k \rightarrow \infty. \quad (1.5)$$

При этом требуется определить, насколько "вероятно" для данного $y \in R^n$ задача оптимизации (1.1) не имеет решения, в частности, попытаться найти области несуществования решения в пространстве наблюдений.

Мы не будем здесь формулировать обобщение теоремы 1.1 на многомерный случай, а перейдем сразу к практически более интересному вопросу построения области несуществования решения задачи (1.1). Итак, пусть u задается соотношением (1.5). Конусом принадлежности $K = K(u)$, как и в одномерном случае, называем конус, для которого имеет место (1.4).

Теорема 1.3. Пусть для функции регрессии имеет место (1.5) и (1.4), причем конус принадлежности K заострен, $m \geq 1$. Тогда для всех $y \in K^- + u$ задача оптимизации (1.1) не имеет решения.

Доказательство дословно повторяет доказательство теоремы 1.2.

Применение предложенного подхода покажем на примере логлинейной однопараметрической модели регрессии $f_i(\alpha) = \exp(\alpha x_i)$, где x_1, \dots, x_n — одного знака; для конкретности будем считать $0 < x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. Если $\alpha \rightarrow -\infty$, то $f(\alpha) \rightarrow u = 0$. Допустим для простоты, что $\Lambda = (-\infty, 0]$. Естественно, в качестве конуса принадлежности можно взять R_+^n — положительный ортант R^n , однако можно построить более "узкий" конус. Для этого заметим, что $0 < f_n(\alpha) \leq f_{n-1}(\alpha) \leq \dots \leq f_1(\alpha)$, $\alpha \in \Lambda$. Таким образом, конус принадлежности есть

$$K = \{z \in R^n: 0 < z_n \leq z_{n-1} \leq \dots \leq z_1\}.$$

Как следует из § 2 гл. 1, отрицательно сопряженным конусом будет

$$K^- = \{y \in R^n: \sum_{i=1}^j y_i \leq 0, \quad j=1, \dots, n\}.$$

Таким образом, на основании доказанных теорем заключаем, что если наблюдения y_1, \dots, y_n таковы, что

$$y_1 \leq 0, \quad y_1 + y_2 \leq 0, \dots, \quad y_1 + y_2 + \dots + y_n \leq 0,$$

то оптимизационная задача

$$\sum_1^n (y_i - e^{\alpha x_i})^2 \Rightarrow \min_{-\infty < \alpha \leq 0}$$

не имеет решения (более конкретно, оценка МНК равна $-\infty$). Для построения более "широких" областей некорректности в этой задаче можно воспользоваться другими свойствами функций $f_i(\alpha) = \exp(\alpha x_i)$, например, выпуклостью (см. подробнее гл. 3 и 5).

§ 2. Многоэкстремальность $Q(\alpha)$ при $m = 1$

Следующий параграф будет посвящен случаю $m > 1$. Конечно, можно было бы сразу рассмотреть $m \geq 1$, однако из методических соображений нам показалось целесообразным начать с простейшего случая. Многомерность не привносит чего-либо принципиально существенного.

При $m = 1$ имеем один оцениваемый параметр $\alpha \in R^1$. Предполагаем пока, что относительно параметра α ничего неизвестно, т.е. его область изменения — вся числовая ось. Набор n функций откликов $f_1(\alpha), \dots, f_n(\alpha)$ задает отображение из R^1 в R^n , образ этого отображения — кривая в R^n . В дальнейшем, не оговаривая особо, кривую считаем достаточное число раз непрерывно дифференцируемой без особых точек, $f' \neq 0$. Для того чтобы задача оценивания была корректной, необходимо также предположить, чтобы соответствующая регрессия была идентифицируемой, т.е. выполнено условие взаимной однозначности отображения $f: R^1 \rightarrow R^n$; это условие будем предполагать выполненным.

Доказываемые ниже утверждения относятся к собственно нелинейным регрессиям. Дадим этому понятию строгое определение. Регрессию называем *сводимой к линейной* (или просто *сводимой*), если после некоторого переобозначения параметра ее функции являются линейными по параметру. Таким образом, функция сводимой регрессии с одним оцениваемым параметром равна $f_i(\alpha) = g(\alpha)x_i + z_i$ или $f_i(\beta) = \beta x_i + z_i$, где $\beta = g(\alpha)$; x_i, z_i — константы, $i = 1, \dots, n$. Отсутствие особых точек и идентифицируемость регрессии означают, что $g(\alpha)$ — монотонная, достаточное число раз непрерывно дифференцируемая функция на R^1 , $\sum x_i^2 \neq 0$. Заметим, что $g(\alpha)$ может быть ограниченной, в таком случае образ функции регрессии — отрезок прямой. Регрессию, не являющуюся сводимой к линейной, называем *несводимой*. На геометрическом языке регрессия с одним оцениваемым параметром является несводимой, если образ отображения f не является прямой или отрезком прямой в R^m .

Относительно приведенного определения необходимо сделать несколько замечаний. Со статистической точки зрения "линейную регрессию" с функцией $g(\alpha)x_i + z_i$ следует рассматривать как нелинейную. Так, например, нахождение несмещенной оценки для α приводит нас к нелинейной задаче. С вычислительной же точки зрения, т.е. с точки зрения нахождения оценки МНК, ее единственности и т.п. вышеозначенная регрессия действительно является линейной задачей.

Лемма 2.1. *Следующие утверждения эквивалентны:*

- а) *регрессия несводима к линейной;*
- б) *существует $\alpha_0 \in R^1$, для которого векторы первых и вторых производных $f(\alpha_0)$ и $\dot{f}(\alpha_0)$ не коллинеарны в R^n ;*
- в) *существуют $\alpha_1, \alpha_2 \in R^1$ такие, что векторы $\dot{f}(\alpha_1)$ и $\dot{f}(\alpha_2)$ не коллинеарны в R^n .*

Доказательство. Легко проверить, что в регрессии, сводимой к линейной, векторы первых и вторых производных коллинеарны. Этим доказываются утверждения б) \rightarrow а) и в) \rightarrow а). Докажем а) \rightarrow б). Пусть для всех $\alpha \in R^1$ векторы $f(\alpha)$ и $\dot{f}(\alpha)$ коллинеарны. Поскольку $\dot{f}(\alpha) \neq 0$, это означает существование такой функции $r(\alpha)$, что $\dot{f}_i(\alpha) = r(\alpha) f_i(\alpha)$, $i =$

$= 1, \dots, n$. Нетрудно определить, что решением этого дифференциального уравнения второго порядка является $f_i(\alpha) = g(\alpha)x_i + z_i$, где x_i, z_i — константы, т.е. соответствующая регрессия является сводимой. Остальные утверждения следуют из определения второй производной

$$\ddot{f}(\alpha_1) = \lim_{\alpha_2 \rightarrow \alpha_1} \frac{\dot{f}(\alpha_2) - \dot{f}(\alpha_1)}{\alpha_2 - \alpha_1}.$$

Если для любой пары α_1 и α_2 векторы $\dot{f}(\alpha_1)$ и $\dot{f}(\alpha_2)$ коллинеарны, то таковыми будут $\ddot{f}(\alpha_1)$ и $\ddot{f}(\alpha_2)$, и наоборот. Доказательство леммы закончено.

При установлении "числа наблюдений", приводящих к многоэкстремальным и многостационарным суммам квадратов, нам потребуется другой класс нелинейных регрессий. Регрессия (и соответствующая ей кривая) называется *плоской*, если образ функций отклика лежит в линейном многообразии размерности 2 (т.е. в двумерной плоскости в R^n). Очевидно, уравнение плоской кривой имеет вид $f_i(\alpha) = g_1(\alpha)x_{i1} + g_2(\alpha)x_{i2} + z_i$, $i = 1, \dots, n$, где $x_1 = (x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1})$, $x_2 = (x_{12}, x_{22}, \dots, x_{n2})$, $z = (z_1, \dots, z_n)$. В этом случае кривая регрессии лежит в плоскости с несущими векторами x_1 и x_2 , сдвинутой на вектор z .

Аналогично предыдущей лемме можно показать, что имеет место следующий результат.

Лемма 2.2. Следующие утверждения эквивалентны:

а) несводимая регрессия не является плоской;

б) существует $\alpha_0 \in R^1$, для которого векторы первых трех производных $\dot{f}(\alpha_0), \ddot{f}(\alpha_0), \dddot{f}(\alpha_0)$ линейно независимы в R^n ;

в) существуют $\alpha_1, \alpha_2 \in R^1$, для которых векторы $\dot{f}(\alpha_1), \dot{f}(\alpha_2), \ddot{f}(\alpha_2)$ линейно независимы в R^n .

Доказательство. Утверждения б) \rightarrow а) и в) \rightarrow а) доказываются непосредственным дифференцированием. Докажем а) \rightarrow б). Пусть для всех $\alpha \in R^1$ векторы $\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha)$ и $\ddot{f}(\alpha)$ линейно зависимы в R^n , тогда можно показать, что

$$\ddot{f}_i(\alpha) = r_1(\alpha)\ddot{f}_i(\alpha) + r_2(\alpha)\dot{f}_i(\alpha).$$

Найдем общее решение обыкновенного дифференциального уравнения $\ddot{f}(\alpha) = r_1(\alpha)\dot{f}(\alpha) + r_2(\alpha)f(\alpha)$. Обозначим $\dot{f}(\alpha) = \psi(\alpha)$. Известно, что общим решением линейного дифференциального уравнения второго порядка является $\psi(\alpha) = c_1g_1(\alpha) + c_2g_2(\alpha)$, а в терминах f_i

$$f_i(\alpha) = x_{i1}g_1(\alpha) + x_{i2}g_2(\alpha) + z_i.$$

А это значит, что наша регрессия плоская. Таким образом, доказано утверждение а) \rightarrow б). Для доказательства утверждения а) \rightarrow в) разложим вектор f в ряд Тейлора до членов второго порядка

$$\dot{f}_i(\alpha_2) = \dot{f}_i(\alpha_1) + (\alpha_2 - \alpha_1)\ddot{f}_i(\alpha_1) + \frac{1}{2}(\alpha_2 - \alpha_1)^2\dddot{f}_i(\alpha_1) + o(|\alpha_1 - \alpha_2|^2).$$

Вспользуемся теперь следующим элементарным фактом. Если векторы e_1, e_2, e_3 линейно независимы в R^n и $u = \nu_1 e_1 + \nu_2 e_2 + \nu_3 e_3, \nu_3 \neq 0$, то векторы e_1, e_2, u линейно независимы. Производя соответствующие переобозначения: $e_1 = \dot{f}(\alpha_1), e_2 = \dot{f}(\alpha_1), u = \dot{f}(\alpha_2)$ с учетом того, что $o(|\alpha_2 - \alpha_1|^2)/(\alpha_2 - \alpha_1)^2 \rightarrow 0$ при $\alpha_2 \rightarrow \alpha_1$, окончательно приходим к утверждению леммы.

Исследуем сначала наличие стационарных точек суммы квадратов отклонений ($Q'(\alpha) = 0$).

Теорема 2.1. *Для любой регрессии, не сводимой к линейной, существует набор чисел (наблюдений) y_1, \dots, y_n ($n \geq 3$), для которого сумма квадратов имеет по крайней мере две стационарные точки. Более того, если кривая регрессии не лежит на окружности, лебегова мера таких наблюдений больше нуля.*

Доказательство. Как следует из леммы 2.1, несводимость регрессии ведет к существованию таких α_{10} и α_{20} , что векторы $\dot{f}(\alpha_{10})$ и $\dot{f}(\alpha_{20})$ линейно независимы в R^n . Поэтому система двух линейных уравнений относительно y_1, \dots, y_n

$$Q'(\alpha_{10}; y) = 0, \quad Q'(\alpha_{20}; y) = 0$$

или

$$\begin{aligned} \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_{10}) &= \sum f_i(\alpha_{10}) \dot{f}_i(\alpha_{10}), \\ \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_{20}) &= \sum f_i(\alpha_{20}) \dot{f}_i(\alpha_{20}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

имеет решение, т.е. множество наблюдений, приводящих к многостационарной сумме квадратов, не пусто. Здесь обозначено $Q(\alpha; y) = \sum (y_i - f_i(\alpha))^2$. Докажем теперь, что лебегова мера наблюдений, для которых сумма квадратов имеет несколько стационарных точек, больше нуля. Обозначим $c(\alpha) = \sum f_i(\alpha) \dot{f}_i(\alpha)$. В силу линейной независимости производных последние два столбца в системе (2.1) при наблюдениях y_{n-1} и y_n не теряя общности можно считать независимыми, т.е. $\dot{f}_{n-1}(\alpha_{10}) \dot{f}_n(\alpha_{20}) - \dot{f}_n(\alpha_{10}) \dot{f}_{n-1}(\alpha_{20}) \neq 0$. Непрерывность производных ведет к тому, что существуют такие непересекающиеся окрестности $V_1 = V_1(\alpha_{10})$ и $V_2 = V_2(\alpha_{20})$, что для всех $(\alpha_1, \alpha_2) \in V_1 \times V_2$ $\dot{f}_{n-1}(\alpha_1) \dot{f}_n(\alpha_2) - \dot{f}_n(\alpha_1) \dot{f}_{n-1}(\alpha_2) \neq 0$. Ясно, что для любого набора y_1, \dots, y_{n-2} и $(\alpha_1, \alpha_2) \in V_1 \times V_2$ найдутся оставшиеся наблюдения y_{n-1}, y_n удовлетворяющие системе (2.1).

Докажем, что множество наблюдений при этом "заполняет" некоторую окрестность в R^n . Рассмотрим отображение из R^n в R^n

$$\psi: (y_1, \dots, y_{n-2}, \alpha_1, \alpha_2) \rightarrow (y_1, \dots, y_n),$$

где y_{n-1} и y_n находятся из решения (2.1) при $\alpha_{10} = \alpha_1, \alpha_{20} = \alpha_2$. Оно является непрерывно дифференцируемым. Найдем его якобиан и докажем, что в некоторой точке он отличен от нуля. Продифференцируем систему

$$\sum y_i \dot{f}_i(\alpha_1) = c(\alpha_1), \quad \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_2) = c(\alpha_2)$$

по α_1 и α_2 . Получим

$$\frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_1} \dot{f}_{n-1}(\alpha_1) + \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_1} \dot{f}_n(\alpha_1) = \frac{1}{2} Q''(\alpha_1; y),$$

$$\frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_1} \dot{f}_{n-1}(\alpha_2) + \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_1} \dot{f}_n(\alpha_2) = 0,$$

$$\frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_2} \dot{f}_{n-1}(\alpha_1) + \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_2} \dot{f}_n(\alpha_1) = 0,$$

$$\frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_2} \dot{f}_{n-1}(\alpha_2) + \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_2} \dot{f}_n(\alpha_2) = \frac{1}{2} Q''(\alpha_2; y).$$

Решая эту систему относительно неизвестных производных, находим

$$\frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_1} = \frac{1}{2\Delta} Q''(\alpha_1; y) \dot{f}_n(\alpha_2),$$

$$\frac{\partial y_n}{\partial \alpha_1} = -\frac{1}{2\Delta} Q''(\alpha_1; y) \dot{f}_{n-1}(\alpha_2),$$

$$\frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_2} = -\frac{1}{2\Delta} Q''(\alpha_2; y) \dot{f}_n(\alpha_1),$$

$$\frac{\partial y_n}{\partial \alpha_2} = \frac{1}{2\Delta} Q''(\alpha_2; y) \dot{f}_{n-1}(\alpha_1),$$

где $\Delta = \dot{f}_{n-1}(\alpha_1) \dot{f}_n(\alpha_2) - \dot{f}_n(\alpha_1) \dot{f}_{n-1}(\alpha_2)$. Якобиан отображения ψ с учетом приведенных формул равен

$$|J| = \begin{vmatrix} I & 0 & 0 \\ & \frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_2} \\ P(\alpha_1, \alpha_2) & & \\ & \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha_2} \\ \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial y_n}{\partial \alpha_2} \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{1}{4\Delta} Q''(\alpha_1; y) Q''(\alpha_2; y),$$

где $P(\alpha_1, \alpha_2)$ — некоторая матрица $2 \times (n-2)$. Как уже было отмечено, в силу линейной независимости векторов $\dot{f}(\alpha_{10})$ и $\dot{f}(\alpha_{20})$ для всех $(\alpha_1, \alpha_2) \in V_1 \times V_2$ $\Delta = \Delta(\alpha_1, \alpha_2) \neq 0$.

Покажем теперь, что существует такой набор наблюдений $y_0 = (y_{10}, \dots, y_{n0}) \in R^n$, удовлетворяющий системе (2.1), для которого $Q''(\alpha_1; y_0) \neq 0$, $Q''(\alpha_2; y_0) \neq 0$. Рассмотрим два случая.

Регрессия не является плоской. Тогда, как следует из леммы 2.2, α_{10} и α_{20} можно выбрать такими, чтобы тройки векторов $(\dot{f}(\alpha_{10}), f(\alpha_{20}), \dot{f}(\alpha_{20}))$ и $(\dot{f}(\alpha_{10}), \dot{f}(\alpha_{20}), \ddot{f}(\alpha_{10}))$ были линейно независимы и, следовательно, система из трех линейных уравнений

$$\begin{aligned} \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_{10}) &= c(\alpha_{10}), \quad \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_{20}) = c(\alpha_{20}), \\ \sum y_i \ddot{f}_i(\alpha_{10}) &= \sum [(\dot{f}_i(\alpha_{10}))^2 + f_i(\alpha_{10}) \ddot{f}_i(\alpha_{10})] + s \end{aligned} \quad (2.2)$$

совместна при любом $s \neq 0$. Если четверка векторов $(\dot{f}(\alpha_{10}), \dot{f}(\alpha_{20}), \ddot{f}(\alpha_{10}), \ddot{f}(\alpha_{20}))$ является линейно независимой в R^n , то будет также совместна расширенная система (2.2) с добавлением уравнения

$$\sum y_i \ddot{f}_i(\alpha_{20}) = \sum [(\dot{f}_i(\alpha_{20}))^2 + f_i(\alpha_{20}) \ddot{f}_i(\alpha_{20})] + d$$

для любого $d \neq 0$. А это и значит, что для найденного решения $Q'(\alpha_{10}; y) = Q'(\alpha_{20}; y) = 0$; $Q''(\alpha_{10}; y) \neq 0$, $Q''(\alpha_{20}; y) \neq 0$. Если же четверка векторов первых и вторых производных линейно зависима, то легко видеть, что тогда $\ddot{f}(\alpha_{20}) = \lambda_1 \dot{f}(\alpha_{10}) + \lambda_2 \dot{f}(\alpha_{20}) + \lambda_3 \ddot{f}(\alpha_{10})$. Перепишем последнее уравнение следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum y_i \ddot{f}_i(\alpha_{20}) &= \\ &= \lambda_1 \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_{10}) + \lambda_2 \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_{20}) + \lambda_3 \sum y_i \ddot{f}_i(\alpha_{10}) = \\ &= \lambda_1 c(\alpha_{10}) + \lambda_2 c(\alpha_{20}) + \lambda_3 \sum [(\dot{f}_i(\alpha_{10}))^2 + f_i(\alpha_{10}) \ddot{f}_i(\alpha_{10})] + \lambda_3 s. \end{aligned}$$

Из линейной независимости $\dot{f}(\alpha_{10}), \dot{f}(\alpha_{20}), \ddot{f}(\alpha_{20})$ следует $\lambda_3 \neq 0$. Поэтому выбором некоторого $s \neq 0$ можно добиться того, чтобы $Q''(\alpha_{20}; y) \neq 0$, что и требовалось показать.

Регрессия является плоской, но не лежит на окружности. Очевидно, теперь рассуждения можно вести для кривой регрессии, принадлежащей плоскости R^2 . Наблюдения, удовлетворяющие системе (2.1), также лежат в этой плоскости. Не останавливаясь подробно на достаточно элементарном доказательстве существования α_{10}, α_{20} таких, что $Q'(\alpha_{10}; y) = Q'(\alpha_{20}; y) = 0$, $Q''(\alpha_{10}; y) \neq 0$, $Q''(\alpha_{20}; y) \neq 0$, заметим лишь, что непринадлежность кривой регрессии окружности эквивалентна существованию таких $y \in R^2$ и $\alpha_{10} \neq \alpha_{20}$, что $Q'(\alpha_{10}; y) = Q'(\alpha_{20}; y) = 0$, но $Q''(\alpha_{10}; y) \neq 0$.

В завершение доказательства теоремы применим теорему об обратной функции: построенное непрерывно дифференцируемое отображение ψ в некоторой точке $y_0 \in R^n$, что соответствует точке $(y_{10}, \dots, y_{n-2,0}, \alpha_{10}, \alpha_{20}) \in R^n$, имеет якобиан, отличный от нуля, значит, образ отображения ψ содержит n -мерную окрестность [53], лебегова мера которой больше нуля. Теорема доказана.

З а м е ч а н и е. Если кривая регрессии лежит на окружности, то множество наблюдений из R^n , приводящих к многостационарным суммам квадратов, принадлежит линейному многообразию размерности $n - 2$, проходящему через центр окружности и перпендикулярному к ее плоскости. Лебегова мера линейного многообразия равна нулю. Другими словами, утверждение теоремы обратимо.

Доказанная теорема имеет одно немаловажное с практической точки зрения следствие. Пусть y_1, \dots, y_n — имеющиеся конкретные наблюдения. Как следует из доказательства теоремы, изменением значений любой пары наблюдений можно добиться того, что сумма квадратов будет иметь несколько стационарных точек, причем эти точки можно выбрать заранее. Таким образом, даже в окрестности "правдоподобных" значений параметров, т.е. разумных с точки зрения "физики" моделируемого процесса, изменение лишь незначительной части наблюдений может привести к стационарной сумме квадратов.

Теорема 2.2. Пусть $f(\alpha)$ — несводимая регрессия с одним оцениваемым параметром, $n \geq 2$. Тогда, если выполнено одно из условий:

либо регрессия имеет бесконечные хвосты,

либо имеет конечный хвост, но не является плоской ($n \geq 3$),

то найдутся наблюдения y_1, \dots, y_n , для которых сумма квадратов имеет не менее двух локальных минимумов.

Доказательство. Вместо того чтобы сразу искать два локальных минимума $Q(\alpha)$, найдем один локальный максимум. Затем покажем, что в условиях теоремы это повлечет существование двух локальных минимумов.

Итак, пусть $s > 0$ произвольно, $\alpha_0 \in R_1$. Рассмотрим линейную систему из двух уравнений с n неизвестными y_1, \dots, y_n : $Q'(\alpha_0; y) = 0$, $Q''(\alpha_0; y) = -2s$, которую перепишем как

$$\begin{aligned} \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_0) &= \sum f_i(\alpha_0) \dot{f}_i(\alpha_0), \\ \sum y_i \ddot{f}_i(\alpha_0) &= \sum [(\dot{f}_i(\alpha_0))^2 + f_i(\alpha_0) \ddot{f}_i(\alpha_0)] + s. \end{aligned} \quad (2.3)$$

В силу несводимости регрессии по лемме 2.1 существует $\alpha_0 \in R^1$, для которого векторы первых и вторых производных линейно независимы. Тогда система (2.3) совместна относительно y_1, \dots, y_n , а множество решений E представляет собой линейное многообразие размерности $n - 2$. Соответственно условиям теоремы рассмотрим два случая.

Регрессия имеет бесконечные хвосты. Пусть $y \in E$; определим два множества на $(-\infty, \infty)$:

$$\begin{aligned} S_1 &= \{\alpha \leq \alpha_0: Q(\alpha; y) \leq Q(\alpha_0; y)\}, \\ S_2 &= \{\alpha \geq \alpha_0: Q(\alpha; y) \leq Q(\alpha_0; y)\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Эти множества компактны. Действительно, в силу непрерывности $Q(\alpha)$ они замкнуты. Далее, $\sum f_i^2(\alpha) \rightarrow \infty$ при $|\alpha| \rightarrow \infty$, поэтому $Q(\alpha; y) \rightarrow \infty$ при $|\alpha| \rightarrow \infty$. Значит, S_1 и S_2 ограничены. Пусть α_j^* — точка минимума $Q(\alpha; y)$ на S_j , $j = 1, 2$. Очевидно, $\alpha_1^* \neq \alpha_2^*$, так как система (2.3) означает, что α_0 — точка условного максимума, и слева и справа от нее найдутся точки, в которых $Q(\alpha; y) < Q(\alpha_0; y)$. Таким образом, найдены два локальных минимума $Q(\alpha; y)$ на S_1 и S_2 , они остаются таковыми и на всем множестве изменения параметра $\alpha \in R^1$.

Регрессия имеет конечный хвост, но не является плоской. Рассмотрим сначала случай, когда регрессия имеет один конечный хвост. Не теряя общности можно считать его правым: $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} f(\alpha) = u < \infty$ при $\alpha \rightarrow \infty$. Теперь выберем α_0 так, чтобы векторы $f(\alpha_0) - u$, $\dot{f}(\alpha_0)$, $\ddot{f}(\alpha_0)$ были линейно

независимы. Докажем, что если кривая регрессии не является плоской, то такая точка существует. Действительно, в противном случае для всех $\alpha \in R^1$

$$\ddot{f}_i(\alpha) = c_1(\alpha) \dot{f}_i(\alpha) + c_2(\alpha) (f_i(\alpha) - u_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Решением этого дифференциального уравнения второго порядка является $f_i(\alpha) = g_1(\alpha) x_{i1} + g_2(\alpha) x_{i2} + u_i$, что приводит нас к плоской регрессии.

Найдем теперь $y \in E$ так, чтобы

$$Q(\alpha_0; y) = \|y - f(\alpha_0)\|^2 < \|y - u\|^2. \quad (2.5)$$

Опустим из точки $f(\alpha_0) - u$ перпендикуляр r на подпространство, натянутое на векторы $\dot{f}(\alpha_0)$, $\ddot{f}(\alpha_0)$. В силу линейной независимости векторов $\dot{f}(\alpha_0)$, $\ddot{f}(\alpha_0)$, $f(\alpha_0) - u$ вектор $r \neq 0$. Пусть $y = y_0 + \lambda r$, где $y_0 \in E$, λ — действительное число. Легко видеть, что $y \in E$. Введем функцию

$$\begin{aligned} L &= L(\lambda) = \|y - u\|^2 - \|y - f(\alpha_0)\|^2 = \\ &= 2\sum (y_{0i} + \lambda r_i) (f_i(\alpha_0) - u_i) + \sum (u_i^2 - f_i^2(\alpha_0)) = \\ &= 2\lambda \|r\|^2 + 2\sum (f_i(\alpha_0) - u_i) y_{0i} + \|u\|^2 - \|f(\alpha_0)\|^2. \end{aligned}$$

При $\lambda \rightarrow \infty$ $L(\lambda) \rightarrow \infty$, поэтому для любого $y_0 \in E$ можно подобрать λ , а соответственно и $y \in E$ таковым, чтобы (2.5) имело место. Далее, как и в предыдущем случае, построим два множества (2.4). Они по-прежнему замкнуты. Неравенство же (2.5) приводит к тому, что они будут и ограниченными, а это означает существование по крайней мере двух локальных минимумов $Q(\alpha; y)$.

Если регрессия имеет два конечных хвоста, т.е. $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} f(\alpha) = u$ и $\lim_{\alpha \rightarrow -\infty} f(\alpha) = v$, то можно найти $y \in E$ так, чтобы

$$Q(\alpha_0; y) \leq \min \{ \|y - u\|^2, \|y - v\|^2 \}.$$

Дальнейшие рассуждения полностью аналогичны предыдущим. Теорема доказана.

Теорема 2.3. *В условиях предыдущей теоремы множество наблюдений, приводящих к многоэкстремальной сумме квадратов, имеет меру Лебега, большую нуля.*

Доказательство. Рассмотрим систему линейных уравнений

$$\begin{aligned} \sum y_i \dot{f}_i(\alpha) &= \sum f_i(\alpha) \dot{f}_i(\alpha), \\ \sum y_i \ddot{f}_i(\alpha) &= \sum [(\dot{f}_i(\alpha))^2 + f_i(\alpha) \ddot{f}_i(\alpha)] + s, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где s пробегает положительные значения, α принадлежит некоторой окрестности такого значения α_0 , для которого векторы первых и вторых производных неколлинеарны. Для доказательства теоремы, очевидно, достаточно показать, что при этом множество решений $(y_1, y_2, \dots, y_n) \in R^n$ "заметает" некоторую окрестность в R^n . Для этого аналогично доказательству теоремы 2.1 построим отображение

$$\psi: (y_1, \dots, y_{n-2}, \alpha, s) \rightarrow (y_1, \dots, y_n),$$

где последние два наблюдения y_{n-1} и y_n для заданных α и s являются решением системы (2.6) (последние два столбца этой системы считаем линей-

но независимыми). Покажем, что в некоторой точке якобиан этого отображения отличен от нуля.

Для нахождения якобиана воспользуемся тем же приемом, что и при доказательстве теоремы 2.1: продифференцируем систему (2.6) по α и s . Дифференцирование первого уравнения по α и s приведет нас к следующей системе:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha} \dot{f}_{n-1} + \frac{\partial y_n}{\partial \alpha} \dot{f}_n &= \frac{1}{2} Q'', \\ \frac{\partial y_{n-1}}{\partial s} \dot{f}_{n-1} + \frac{\partial y_n}{\partial s} \dot{f}_n &= 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Дифференцирование второго уравнения (2.6) по s даст

$$\frac{\partial y_{n-1}}{\partial s} \dot{f}_{n-1} + \frac{\partial y_n}{\partial s} \dot{f}_n = 1. \quad (2.8)$$

Как и при доказательстве теоремы 2.1, можно показать, что якобиан отображения ψ равен

$$|J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial y_{n-1}}{\partial \alpha} & \frac{\partial y_{n-1}}{\partial s} \\ \frac{\partial y_n}{\partial \alpha} & \frac{\partial y_n}{\partial s} \end{vmatrix}.$$

Заметим, что рассматривая уравнения (2.7) как систему относительно величин \dot{f}_{n-1} и \dot{f}_n , можно записать

$$\dot{f}_{n-1} = -\frac{1}{2} Q'' \frac{\partial y_n}{\partial s} / |J|, \quad \dot{f}_n = \frac{1}{2} Q'' \frac{\partial y_{n-1}}{\partial s} / |J|.$$

Подставим эти значения в (2.8), откуда найдем искомую величину:

$$|J| = \frac{1}{2} Q''(\alpha; y) / \Delta(\alpha) = -s / \Delta(\alpha) \neq 0,$$

где $\Delta(\alpha) = \dot{f}_{n-1}(\alpha) \ddot{f}_n(\alpha) - \dot{f}_n(\alpha) \ddot{f}_{n-1}(\alpha) \neq 0$ в некоторой окрестности α_0 . Воспользовавшись теоремой об обратной функции, приходим к окончательному доказательству теоремы.

З а м е ч а н и я. 1. Теоремы 2.1, 2.2 и 2.3 легко обобщаются на случай, когда априорное множество параметров есть интервал на прямой, т.е. $\alpha \in (a, b)$. Тогда вводим взаимнооднозначное отображение $\beta: (a, b) \rightarrow (-\infty, \infty)$ и рассматриваем $f_i(\gamma) = f_i(\beta(\gamma))$; $\gamma \in (-\infty, \infty)$, $\beta(\gamma) = \alpha$.

2. Утверждение теоремы 2.2 для регрессий с бесконечными хвостами было доказано автором ранее [14]. Прежнее доказательство отличалось от изложенного здесь и носило геометрический характер.

3. Допустим, закон распределения отклонений $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n$ взаимно абсолютно непрерывен относительно лебеговой меры (соответствующие меры эквивалентны), например, отклонения нормально распределены.

Тогда в условиях теорем 2.1 и 2.3 вероятность многостационарности и соответственно многоэкстремальности суммы квадратов больше нуля.

Теперь обратимся к примерам.

Пример 1. Продолжим рассмотрение параболической регрессии $f_i(\beta) = \beta x_i + \beta^2 z_i$. Для простоты ограничимся случаем $n = 2$; пусть $x_1 = 1, z_1 = 0, x_2 = 0, z_2 = 1$. В этом случае $f_1(\beta) = \beta, f_2(\beta) = \beta^2$. На плоскости наблюдений R^2 график функции регрессии есть график простейшей параболы $(\beta, \beta^2), -\infty < \beta < \infty$. Найдем для этой регрессии область многостационарности, многоэкстремальности и невыпуклости. Имеем

$$Q(\beta) = (y_1 - \beta)^2 + (y_2 - \beta^2)^2,$$

$$\frac{1}{4} Q'(\beta) = \beta^3 + \beta \left(\frac{1}{2} - y_2 \right) - \frac{y_1}{2},$$

$$\frac{1}{4} Q''(\beta) = 3\beta^2 + \left(\frac{1}{2} - y_2 \right).$$

Поэтому область (строгой) выпуклости в пространство наблюдений для этой регрессии есть полупространство $y_2 < 1/2$; соответственно область невыпуклости: $y_2 > 1/2$. Область многостационарности – множество наблюдений (y_1, y_2) , для которых уравнение $Q'(\beta) = 0$ имеет два действительных различных корня. Пользуясь известным критерием существования трех различных действительных корней кубического полинома [30], можно утверждать, что $Q(\beta)$ многостационарна тогда и только тогда, когда

$$\left[\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} - y_2 \right) \right]^3 + \frac{1}{4} y_1^2 < 0,$$

т.е. если

$$y_2 > \frac{3}{\sqrt[3]{4}} y_1^{2/3} + \frac{1}{2}.$$

Нетрудно убедиться, что существование для уравнения $Q'(\beta) = 0$ трех различных корней равносильно условию многоэкстремальности, поэтому выписанное выше неравенство как раз и задает область многоэкстремальности. Область многостационарности, нетрудно проверить, задается строгим неравенством

$$y_2 \geq \frac{3}{\sqrt[3]{4}} y_1^{2/3} + \frac{1}{2}$$

с выколотой точкой $(0, 1/2)$. Все области показаны на рис. 10. На этом рисунке для точек \bar{y}_1 и \bar{y}_2 функция $Q(\beta)$ имеет два локальных минимума (расстояние от точки до кривой – параболы). Точка \bar{y}_3 лежит в области невыпуклости, но не принадлежит области многоэкстремальности. Для точки \bar{y}_4 сумма квадратов $Q(\beta)$ не только одноэкстремальна, но и выпукла, $\beta \in (-\infty, \infty)$.

Пример 2. Рассмотрим простейший класс регрессий, не сводимых к линейным – квазилинейные регрессии (§ 3, гл. 1). Чтобы не утруждать читателя техникой доказательств, разберем лишь случай логлинейной регрес-

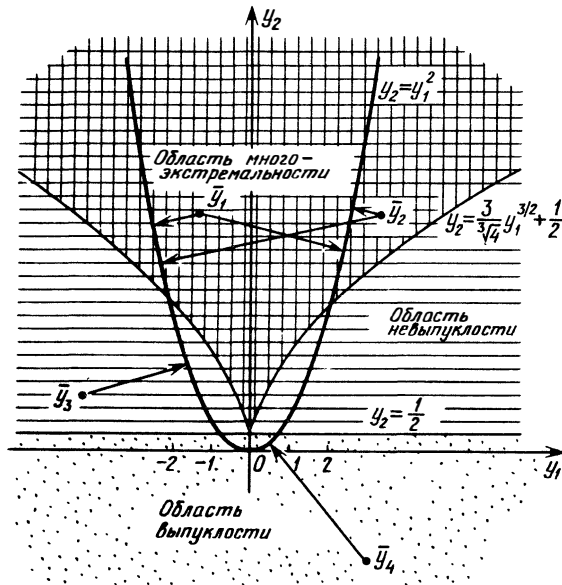


Рис. 10. Области многоэкстремальности, выпуклости и невыпуклости регрессии-параболы

сии $f_i(\alpha) = \exp(\alpha x_i + z_i)$, где $-\infty < \alpha < \infty$, x_i, z_i – некоторые константы. Так, этому классу функций принадлежат производственные функции типа Кобба–Дугласа (§ 5, гл. 1). С помощью доказанных теорем покажем, что сумма квадратов отклонений, соответствующая этой функции, с вероятностью, большей нуля, не является унимодальной.

Логлинейная регрессия, вообще говоря, может иметь один конечный хвост (если все x_i одного знака). Поэтому необходимо установить, что регрессия с функцией $f_i(\alpha) = \exp(\alpha x_i + z_i)$ не является плоской. Прежде всего заметим, что не теряя общности можно считать $x_i \neq 0$, так как присутствие члена $(y_i - f_i(\alpha))^2 = (y_i - \exp(z_i))^2$ в сумме квадратов меняет последнюю лишь на постоянное значение. Естественно поэтому, чтобы x_i не все были равны нулю, $i = 1, \dots, n$. Предположим далее, что $x_i \neq \text{const}$. Векторы первых трех производных, как легко проверить, равны

$$\dot{f} = (x_1 e^{\alpha x_1 + z_1}, \dots, x_n e^{\alpha x_n + z_n}),$$

$$\ddot{f} = (x_1^2 e^{\alpha x_1 + z_1}, \dots, x_n^2 e^{\alpha x_n + z_n}),$$

$$\ddot{\ddot{f}} = (x_1^3 e^{\alpha x_1 + z_1}, \dots, x_n^3 e^{\alpha x_n + z_n}).$$

Докажем, что они линейно независимы для любого $\alpha \in (-\infty, \infty)$, $n \geq 3$. Пусть X – матрица $3 \times n$, i -й столбец которой равен $(x_i, x_i^2, x_i^3)^T$. Известно, что ранг этой матрицы равен 3. Пусть E – диагональная матрица $n \times n$ с элементом $\exp(\alpha x_i + z_i)$ на диагонали. Тогда легко видеть, что $XE = (\dot{f}, \ddot{f}, \ddot{\ddot{f}})$. Но $\text{rank } E = n$, поэтому векторы \dot{f}, \ddot{f} и $\ddot{\ddot{f}}$ линейно независимы

в R^n . Как следует из теоремы 2.3, множество наблюдений, приводящих к мультимодальным суммам квадратов, имеет меру Лебега в R^n , большую нуля. Можно показать, что этот же результат верен для $f_i(\alpha) = g(\alpha x_i + z_i)$, если g не является квадратичной функцией.

§ 3. Многоэкстремальность $Q(\alpha)$ при $m > 1$

Теперь образом отображения $f: R^m \rightarrow R^n$ является поверхность в R^n . Как и в случае $m = 1$, предполагаем f достаточное число раз непрерывно дифференцируемой без особых точек. Другими словами, если $F_{ij} = \partial f_i / \partial \alpha_j$, то $\text{rank } F = m$ для всех $\alpha \in R^m$. Регрессию считаем идентифицируемой, т.е. отображение f — взаимно однозначным.

Регрессию при $m \geq 1$ называем *сводимой к линейной* (или просто *сводимой*), если ее функция имеет вид

$$f_i(\alpha) = g_1(\alpha)x_{i1} + \dots + g_m(\alpha)x_{im} + z_i, \quad (3.1)$$

где $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, x_{ij} , z_i — константы, $g_j(\alpha)$ — достаточное число раз непрерывно дифференцируемые функции. Другими словами, регрессия называется сводимой, если переобозначением параметров $\beta_j = g_j(\alpha)$ ее можно свести к линейной:

$$f_i(\beta) = \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_m x_{im} + z_i.$$

Идентифицируемость регрессии и отсутствие особых точек для регрессии (3.1) влекут независимость векторов x_1, x_2, \dots, x_m , взаимную однозначность отображения $\beta = g(\alpha)$ и $|\partial g / \partial \alpha| \neq 0$. Множественную регрессию называем *несводимой*, если переобозначением параметров она не может быть приведена к виду (3.1).

Множественную регрессию называем *гиперплоской*, если ее функция имеет вид

$$f_i(\alpha) = g_1(\alpha)x_{i1} + \dots + g_m(\alpha)x_{im} + g_{m+1}(\alpha)x_{i,m+1} + z_i. \quad (3.2)$$

Если векторы x_1, x_2, \dots, x_{m+1} линейно независимы, то поверхность гиперплоской регрессии лежит в линейном многообразии размерности $m + 1$. Это многообразие представляет собой подпространство размерности $m + 1$, натянутое на векторы $x_1, x_2, \dots, x_m, x_{m+1} \in R^n$ и сдвинутое на вектор z .

Лемма 3.1. Следующие утверждения эквивалентны:

- а) множественная регрессия является сводимой;
- б) для любых $\alpha \in R^m$ и для любых $i, j = 1, \dots, m$ вектор $\partial^2 f / \partial \alpha_i \partial \alpha_j$ является линейной комбинацией m векторов $\{\partial f / \partial \alpha_i\}$;
- в) для любой пары $\alpha^1, \alpha^2 \in R^m$ каждый из m векторов $\partial f(\alpha^1) / \partial \alpha_i$ является линейной комбинацией m векторов $\partial f(\alpha^2) / \partial \alpha_1, \partial f(\alpha^2) / \partial \alpha_2, \dots, \partial f(\alpha^2) / \partial \alpha_m$.

Лемма 3.2. Следующие утверждения эквивалентны:

- а) несводимая регрессия является гиперплоской;
- б) для любых $\alpha \in R^m$ и для любых $i, j, k = 1, \dots, m$ вектор $\partial^3 f(\alpha) / \partial \alpha_i \partial \alpha_j \partial \alpha_k$ является линейной комбинацией $m + m^2$ векторов $\{\partial f(\alpha) / \partial \alpha_i, \partial^2 f(\alpha) / \partial \alpha_j \partial \alpha_k\}$;

в) для любой пары $\alpha^1, \alpha^2 \in R^m$ и для любых $i, j = 1, \dots, m$ вектор $\partial^2 f(\alpha^k)/\partial \alpha_i \partial \alpha_j$ является линейной комбинацией $2m$ векторов $\partial f(\alpha^1)/\partial \alpha_1, \dots, \partial f(\alpha^1)/\partial \alpha_m, \partial f(\alpha^2)/\partial \alpha_1, \dots, \partial f(\alpha^2)/\partial \alpha_m, k = 1, 2$.

Относительно доказательств этих лемм ограничимся лишь некоторыми замечаниями. В одну сторону утверждения легко проверяются непосредственно дифференцированием функций регрессий. Эта операция, как легко видеть, не выводит нас из начального линейного подпространства. В обратную сторону доказательство опирается на теорию систем линейных дифференциальных уравнений в частных производных [38].

Теорема 3.1. *Для любой множественной регрессии, не сводимой к линейной, множество наблюдений, приводящих к многостационарной сумме квадратов, непусто ($n \geq 3$). Более того, если регрессия не является гиперплоской, то это множество имеет меру Лебега, большую нуля.*

Доказательство является прямым обобщением доказательства теоремы 2.1. Докажем сначала теорему для случая, когда составная матрица из производных для некоторой пары параметров имеет полный ранг, причем $2m \leq n$. Итак, пусть $\alpha_{10}, \alpha_{20} \in R^m$ таковы, что

$$\text{rank}(F(\alpha_{10}), F(\alpha_{20})) = 2m \leq n. \quad (3.3)$$

Найдем наблюдения, для которых сумма квадратов отклонений в выбранных точках α_{10} и α_{20} имеет все частные производные, равные нулю. Эти наблюдения являются решением системы линейных уравнений

$$F_1^T y = F_1^T f, \quad F_2^T y = F_2^T f, \quad (3.4)$$

где $F_k = F(\alpha_{k0}), f_k = f(\alpha_{k0}), k = 1, 2$. Условие (3.3) обеспечивает совместность системы (3.4), т.е. непустоту множества "неудачных" наблюдений.

Покажем теперь, что лебегова мера этого множества наблюдений больше нуля. Для этого докажем сначала, что условие (3.3) имеет место для всех α_1, α_2 соответственно из окрестностей $V(\alpha_{10}), V(\alpha_{20})$. Действительно, условие (3.3) эквивалентно существованию минора $2m \times 2m$, отличного от нуля. В силу непрерывности производных он не будет равен нулю для всех $(\alpha_1, \alpha_2) \in V(\alpha_{10}) \times V(\alpha_{20})$ (окрестности достаточно малого радиуса). Далее, как и в теореме 2.1, построим непрерывно дифференцируемое отображение из R^n в R^n по правилу

$$\psi: (y_1, \dots, y_{n-2m}, \alpha_1, \alpha_2) \rightarrow (y_1, \dots, y_n),$$

где последние $2m$ наблюдений для заданных первых $n - 2m$ наблюдений и α_1, α_2 находятся решением системы (3.4). Докажем, что это отображение обратимо в некоторой окрестности (y_1, \dots, y_n) . Для этого найдем его якобиан. Не будем утомлять читателя длинными выкладками, тем более, что они являются прямым обобщением соответствующих выкладок теоремы 2.1. Оказывается, что якобиан отображения ψ с точностью до множителей, отличных от нуля, равен $|Q''(\alpha_1; y)| \cdot |Q''(\alpha_2; y)|$. Покажем, что в условиях теоремы в некоторой точке этот якобиан можно сделать отличным от нуля. Поскольку регрессия не является гиперплоской, то, как следует из леммы 3.2, точки α_{10} и α_{20} могут быть выбраны так, чтобы для некоторых пар (i, j) и (p, r) векторы $\partial^2 f(\alpha_{10})/\partial \alpha_i \partial \alpha_j$ и $\partial^2 f(\alpha_{20})/\partial \alpha_p \partial \alpha_r$ не являлись линейными комбинациями векторов

$\partial f(\alpha_{10})/\partial \alpha_k, \partial f(\alpha_{20})/\partial \alpha_k, k = 1, \dots, m$. Тогда выбором некоторого $s \in R^1$ можно найти такие $y \in R^n$, удовлетворяющие системе (3.4), для которых $|Q''(\alpha_{10}; y)| \neq 0, |Q''(\alpha_{20}; y)| \neq 0$. Этот набор наблюдений может быть получен решением системы (3.4) с добавлением уравнения

$$\sum_i y_i \frac{\partial^2 f_i(\alpha_{10})}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} = \sum_i \left(\frac{\partial f_i(\alpha_{10})}{\partial \alpha_j} \right) \left(\frac{\partial f_i(\alpha_{10})}{\partial \alpha_k} \right) + s.$$

В силу линейной независимости $\partial^2 f(\alpha_{20})/\partial \alpha_p \partial \alpha_r, p, r = 1, \dots, m$ среди решений y этой расширенной системы линейных уравнений можно найти такое решение y_0 , для которого выполняется также второе неравенство $|Q''(\alpha_{20}; y)| \neq 0$. Отличие якобиана отображения в точке $y_0 \in R^n$ от нуля дает возможность применить теорему об обратной функции, что и доказывает теорему в рассмотренном случае.

Если в составной матрице $(F(\alpha_{10}), F(\alpha_{20}))$ имеются линейно зависимые столбцы или $2m > n$, то оставляя лишь линейно независимые столбцы составной матрицы, перейдем к матрице полного ранга, для которой все утверждения, проведенные в случае (3.3), можно повторить. Теорема доказана.

Следующая теорема является обобщением теоремы 2.3 на многомерный случай.

Теорема 3.2. *В условиях предыдущей теоремы лебегова мера наблюдений, приводящих к многоэкстремальной сумме квадратов, больше нуля.*

Идея доказательства состоит в решении системы линейных уравнений относительно y :

$$Q'(\alpha_1; y) = 0, \quad Q'(\alpha_2; y) = 0, \quad Q''(\alpha_1; y) = 2S^1, \quad Q''(\alpha_2; y) = 2S^2,$$

или

$$\begin{aligned} \sum_i y_i \frac{\partial f_i(\alpha_1)}{\partial \alpha_j} &= \sum \frac{\partial f_i(\alpha_1)}{\partial \alpha_j} f_i(\alpha_1), \\ \sum_i y_i \frac{\partial f_i(\alpha_2)}{\partial \alpha_j} &= \sum \frac{\partial f_i(\alpha_2)}{\partial \alpha_j} f_i(\alpha_2), \\ \sum_i y_i \frac{\partial^2 f_i(\alpha_1)}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} &= \sum \left(\frac{\partial f_i(\alpha_1)}{\partial \alpha_j} \right) \left(\frac{\partial f_i(\alpha_1)}{\partial \alpha_k} \right) - S_{jk}^1, \\ \sum_i y_i \frac{\partial^2 f_i(\alpha_2)}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} &= \sum \left(\frac{\partial f_i(\alpha_2)}{\partial \alpha_j} \right) \left(\frac{\partial f_i(\alpha_2)}{\partial \alpha_k} \right) - S_{jk}^2, \end{aligned} \tag{3.5}$$

$$j = 1, \dots, m, \quad k = 1, \dots, m,$$

где S^1 и S^2 — положительно определенные симметрические матрицы $m \times m$ из некоторого множества, изоморфного области пространства $R^{m(m+1)/2}$. Если векторы этой системы при наблюдениях y_1, \dots, y_n линейно независимы, то для любых S^1 и S^2 система (3.5) имеет решение. Как и при доказательстве предыдущих теорем, можно построить отображение $\psi: R^n \rightarrow R^n$. Оно является непрерывно дифференцируемым, его якобиан пропорционален произведению определителей $|S^1| |S^2| \neq 0$. По теореме

об обратной функции лебегова мера наблюдений, приводящих к много-стационарным $Q(\alpha)$, больше нуля. Если же среди векторов первых и вторых производных есть линейно зависимые, систему (3.5) можно редуцировать, т.е. свести к системе полного ранга и рассуждения повторить.

Пример. Продолжим исследование логлинейной регрессии для случая $m > 1$. Докажем, что эта регрессия не является гиперплоской. Функция регрессии логлинейной модели равна $f_i(\alpha) = \exp(\alpha^T x_i)$, $i = 1, \dots, n$, где $\alpha^T = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)^T$, $x_i^T = (x_{i1}, \dots, x_{im})^T$. Очевидно

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j} &= x_{ij} \exp(\alpha^T x_i), \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k} &= x_{ij} x_{ik} \exp(\alpha^T x_i), \\ \frac{\partial^3 f_i}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k \partial \alpha_r} &= x_{ij} x_{ik} x_{ir} \exp(\alpha^T x_i). \end{aligned}$$

Во-первых, полагая $k = j$, как и в случае $m = 1$, можно показать, что $\partial^2 f / \partial \alpha_j^2$ не является линейной комбинацией $\partial f / \partial \alpha_1, \dots, \partial f / \partial \alpha_m$. Отсюда по лемме 3.2 следует, что логлинейная регрессия не является сводимой. Во-вторых, аналогично можно показать, что $\partial^3 f / \partial \alpha_j^3$ не является линейной комбинацией $m + m^2$ векторов $\{\partial f / \partial \alpha_j, \partial^2 f / \partial \alpha_j \partial \alpha_k, j = 1, \dots, m, k = 1, \dots, m\}$ — по лемме 3.2 логлинейная регрессия не является гиперплоской. Значит, если закон распределения отклонений ϵ_i взаимно-абсолютно непрерывен с лебеговой мерой в R^n , вероятность получения наблюдений, которые в логлинейной модели приводят к многостационарным или многоэкстремальным суммам квадратов, больше нуля.

Наконец, зададимся вопросом о вероятности неединственности оценки МНК. Другими словами, какова вероятность того, что кроме найденного значения $\alpha = a$, доставляющего глобальный минимум $Q(\alpha)$, существует другое, отличное от a значение, приводящее к той же сумме квадратов? Ответ следует из следующей теоремы.

Теорема 3.3. *Лебегова мера наблюдений, для которых оценка МНК неединственна, равна нулю.*

Ограничимся лишь идейной стороной доказательства. Рассуждения будем вести для случая $m = 1$. Множество наблюдений, о которых идет речь в теореме, содержится в множестве таких $y \in R^n$, для которых существуют такие $\alpha_1 \neq \alpha_2 \in R^m$, что

$$Q'(\alpha_1; y) = 0, \quad Q'(\alpha_2; y) = 0, \quad Q(\alpha_1; y) = Q(\alpha_2; y),$$

или

$$\begin{aligned} \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_1) &= \sum f_i(\alpha_1) \dot{f}_i(\alpha_1), \\ \sum y_i \dot{f}_i(\alpha_2) &= \sum f_i(\alpha_2) \dot{f}_i(\alpha_2), \\ 2\sum (f_i(\alpha_1) - f_i(\alpha_2)) y_i &= \sum f_i^2(\alpha_1) - \sum f_i^2(\alpha_2). \end{aligned} \tag{3.6}$$

Допустим, для всех $\alpha_1 \neq \alpha_2$ тройка векторов $\dot{f}(\alpha_1)$, $\dot{f}(\alpha_2)$, $f(\alpha_1) - f(\alpha_2)$ линейно независима в R^n . Пусть линейно независимыми столбцами соот-

ветствующей матрицы являются три последних. Построим отображение из R^{n-1} в R^n :

$$\psi: (y_1, \dots, y_{n-3}, \alpha_1, \alpha_2) \rightarrow (y_1, \dots, y_n),$$

где для заданных $y_1, \dots, y_{n-3}, \alpha_1, \alpha_2$ три остальных наблюдения находятся из решения системы (3.6). Отображение ψ является непрерывно дифференцируемым. Значит, мера Лебега в R^n образа этого отображения равна нулю. Если ранг системы $f'(\alpha_1), f'(\alpha_2), f(\alpha_1) - f(\alpha_2)$ равен двум, то одно уравнение системы (3.6) выбросим и повторим рассуждение.

В заключение сделаем одно замечание качественного характера. Сумма квадратов отклонений часто имеет овражный характер: линии уровня вытянуты в одном направлении и сжаты в другом. Важно, что эти области для нелинейных регрессий существенно нелинейны. В линейной регрессии линии уровня тоже могут быть резко сжаты по одному направлению и вытянуты по другому. Однако это не мешает быстро найти минимум суммы квадратов.

Ослаблению нелинейности регрессии часто помогает операция переобозначения параметров. Очень важно бывает перед процессом минимизации суммы квадратов найти такое удачное нелинейное взаимно однозначное отображение пространства параметров на себя, которое "выпрямляет" линии уровня¹⁾. Отдавая должное подобным преобразованиям, способствующим ускорению процесса минимизации, необходимо отметить, что они все же неспособны многостационарную (многоэкстремальную) функцию сделать одностационарной (одноэкстремальной). Докажем это. Пусть $\beta = \beta(\alpha)$ — взаимно однозначное непрерывно дифференцируемое отображение из R^m в R^m . Пусть $\partial Q(\alpha_0)/\partial \alpha = 0$, т.е. α_0 — стационарная точка $Q(\alpha)$. Тогда $\beta_0 = \beta(\alpha_0)$ — стационарная точка Q в системе параметров β . Это следует из равенства $\partial Q/\partial \beta = (\partial \beta/\partial \alpha)^{-1} (\partial Q/\partial \alpha)$. Таким образом, если $\alpha_1 \neq \alpha_2$ — две стационарные точки функции Q в системе параметров α , то $\beta_1 = \beta(\alpha_1) \neq \beta(\alpha_2) = \beta_2$ в силу однозначности отображения; β_1, β_2 — две стационарные точки Q в системе параметров β . Аналогично нетрудно показать, что преобразование β локальные минимумы также переводит в локальные минимумы. Из однозначности отображения β следует, что существование двух локальных минимумов в одной системе параметров ведет к существованию двух локальных минимумов в другой.

Факт независимости существования многих стационарных (экстремальных) точек суммы квадратов от параметризации модели регрессии легко понять, прибегая к геометрической интерпретации. Репараметризация модели не изменяет образа регрессии $f(R^m)$. Существование же нескольких стационарных или экстремальных точек суммы квадратов целиком зависит от взаимного расположения векторов наблюдений $y \in R^n$ и поверхности $f(R^m)$. Вот почему число таких точек при любых переобозначениях остается инвариантным.

Преобразование "переобозначение параметров" не следует путать с преобразованием модели, например, с логарифмированием функции отклика.

¹⁾ Примеры подобных переобозначений были приведены в § 5 гл. 1 и касались производственных функций типа CES. В гл. 4 приводятся идеи отыскания подобных переобозначений.

Последняя операция меняет вид и форму поверхности регрессии, по сути дела предлагая минимизировать другую сумму квадратов. Первоначальную нелинейную модель с несколькими локальными минимумами подобными операциями можно превратить в линейную (пример – логарифмирование логлинейных моделей).

§ 4. О многостационарности математического ожидания суммы квадратов

Уравнение регрессии, как следует из введения, может быть записано в виде (здесь α_0 – истинное значение параметра α):

$$y_i = f_i(\alpha_0) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

где $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n$ – случайные величины с нулевым математическим ожиданием $E\epsilon_i = 0$ и одинаковой дисперсией $\sigma^2 = E\epsilon_i^2, i = 1, \dots, n$. Найдём сначала математическое ожидание суммы квадратов отклонений. Для этого воспользуемся следующим преобразованием:

$$\begin{aligned} (y_i - f_i(\alpha))^2 &= [(y_i - f_i(\alpha_0)) + (f_i(\alpha_0) - f_i(\alpha))]^2 = \\ &= (y_i - f_i(\alpha_0))^2 + 2(y_i - f_i(\alpha_0))(f_i(\alpha_0) - f_i(\alpha)) + (f_i(\alpha_0) - f_i(\alpha))^2. \end{aligned}$$

По определению

$$E(y_i - f_i(\alpha_0)) = 0, \quad E(y_i - f_i(\alpha_0))^2 = \sigma^2,$$

поэтому

$$EQ(\alpha) = E\Sigma(y_i - f_i(\alpha))^2 = \Sigma(f_i(\alpha_0) - f_i(\alpha))^2 + n\sigma^2. \quad (4.1)$$

В предыдущих параграфах при довольно слабых предположениях было показано, что сумма квадратов многоэкстремальна с положительной вероятностью. Верно ли это утверждение в среднем – будет ли многоэкстремальной усредненная сумма квадратов (т.е. ее математическое ожидание)? Ответ на этот вопрос, как следует из (4.1), эквивалентен вопросу о многоэкстремальности функции

$$\bar{Q}(\alpha; \alpha_0) = \sum_1^n (f_i(\alpha_0) - f_i(\alpha))^2 \quad (4.2)$$

для некоторого α_0 .

Функция (4.2) может быть получена также вне вероятностных рассуждений. Допустим, наблюдения таковы, что принадлежат образу $f(R^m)$. Другими словами, существует такое α_0 , что $y_i = f_i(\alpha_0)$. Задача заключается в нахождении этого α_0 . Естественно, глобальному минимуму \bar{Q} отвечает $\alpha = \alpha_0$; $\bar{Q}(\alpha; \alpha_0) = 0$. К тому же, если регрессия идентифицируема, то решение $\alpha = \alpha_0$ единственно. Однако на практике мы не знаем, принадлежит ли y образу регрессии или нет, поэтому, как всегда, минимизируем $Q(\alpha; y)$ некоторыми итерационными методами. Вопрос остается. Будет ли минимизируемая функция одноэкстремальной?

Разумеется, класс нелинейных регрессий с многоэкстремальной суммой (4.2) будет уже по сравнению с обычной суммой $Q(\alpha; y), y \in R^n$. Является ли он пустым? Другими словами, можно ли утверждать, что

функция $Q(\alpha; \alpha_0)$ одноэкстремальна (или одностационарна) для всех α_0 из априорного множества параметров? К сожалению, ответ отрицательный.

Рассмотрим простейшую (параболическую) нелинейную регрессию $f_i(\alpha) = \alpha x_i + \alpha^2 z_i$. В § 3 было показано, что при $\alpha > 0$ сумма квадратов для этой регрессии может быть многостационарной, но всегда является одноэкстремальной. Здесь будем предполагать, что $-\infty < \alpha < \infty$. Легко проверить, что сумма (4.2) для этой функции равна

$$\begin{aligned} \bar{Q}(\alpha; \alpha_0) &= (\alpha - \alpha_0)^2 \sum_1^n (x_i + (\alpha + \alpha_0) z_i)^2, \\ \bar{Q}'_\alpha &= 2(\alpha - \alpha_0) [\sum (x_i + (\alpha + \alpha_0) z_i)^2 + (\alpha - \alpha_0) \sum (x_i + (\alpha + \alpha_0) z_i) z_i]. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Первый корень $\bar{Q}'_\alpha = 0$ известен: $\alpha = \alpha_0$. В этой точке \bar{Q} достигает своего глобального минимума $\bar{Q} = 0$. Изучим существование корней квадратного уравнения

$$\sum_1^n (x_i + (\alpha + \alpha_0) z_i)^2 + (\alpha - \alpha_0) \sum (x_i + (\alpha + \alpha_0) z_i) z_i = 0.$$

Оно имеет два действительных корня, если его дискриминант

$$D = 4\alpha_0^2 (\sum z_i^2)^2 + 4\alpha_0 \sum z_i^2 \sum x_i^2 + 9(\sum x_i z_i)^2 - 8 \sum z_i^2 \sum x_i^2$$

положителен. Докажем, что при всех α_0 он неотрицателен. Для этого достаточно показать неотрицательность дискриминанта квадратного уравнения относительно α_0 :

$$D_{\alpha_0} = 128(\sum z_i^2)^2 [\sum z_i^2 \sum x_i^2 - (\sum x_i z_i)^2] \geq 0$$

по неравенству Коши – Буняковского, что и требовалось показать. Таким образом, можно утверждать, что если векторы $x, z \in R^n$ не коллинеарны, то для любого α_0 сумма $\bar{Q}(\alpha; \alpha_0)$ для параболической регрессии многоэкстремальна.

Теперь рассмотрим другую, более реальную регрессию, для которой ответ прямо противоположен. Итак, пусть $f_i(\alpha) = g(\alpha^T x_i)$ – квазилинейная регрессия (см. § 3, гл. 1). Рассмотрим сначала случай одного оцениваемого параметра. Будем считать g строго возрастающей, т.е. $g' > 0$. Очевидно, для нее

$$\bar{Q}(\alpha; \alpha_0) = \sum (g(\alpha_0 x_i) - g(\alpha x_i))^2,$$

а

$$\frac{1}{2} \bar{Q}'_\alpha = \sum (g(\alpha x_i) - g(\alpha_0 x_i)) g'(\alpha x_i) x_i.$$

Возможны два варианта.

А. *Последовательность x_1, \dots, x_n "одного знака"*. Пусть для определенности $x_i > 0$. Тогда если $\alpha < \alpha_0$, то $\alpha x_i < \alpha_0 x_i$ и, в силу возрастания g , $g(\alpha x_i) < g(\alpha_0 x_i)$ и $\bar{Q}'_\alpha < 0$. Если $\alpha > \alpha_0$, то $g(\alpha x_i) > g(\alpha_0 x_i)$ и $\bar{Q}'_\alpha > 0$. Но $\bar{Q}'_\alpha(\alpha_0) = 0$, значит, уравнение $\bar{Q}'_\alpha = 0$ имеет единственное решение $\alpha = \alpha_0$.

Б. Последовательность x_1, \dots, x_n "имеет разные знаки". Перенумерацией наблюдений можно добиться того, чтобы $x_1 \leq \dots \leq x_{k-1} < 0 < x_k \leq \dots \leq x_n$. Соответствующим образом разобьем $\bar{Q}_\alpha = \bar{Q}'_1 + \bar{Q}'_2$, где

$$\bar{Q}'_1 = 2 \sum_1^{k-1} (g(\alpha x_i) - g(\alpha_0 x_i)) g'(\alpha x_i) x_i,$$

$$\bar{Q}'_2 = 2 \sum_k^n (g(\alpha x_i) - g(\alpha_0 x_i)) g'(\alpha x_i) x_i.$$

Пусть $\alpha < \alpha_0$. Тогда $\alpha x_i > \alpha_0 x_i$ для $i = 1, \dots, k-1$, поэтому $\bar{Q}'_1(\alpha) < 0$. Для $x_i > 0$ имеем $\alpha x_i < \alpha_0 x_i$, и опять же $\bar{Q}'_2(\alpha) < 0$. Если $\alpha > \alpha_0$, то для $i = 1, \dots, k-1$ $\alpha x_i < \alpha_0 x_i$ и $\bar{Q}'_1(\alpha) > 0$. Для $i = k, \dots, n$ и в этом случае $\alpha x_i > \alpha_0 x_i$ и $\bar{Q}'_2(\alpha) > 0$. Таким образом, как и в случае А, $\bar{Q}'(\alpha) < 0$ при $\alpha < \alpha_0$ и $\bar{Q}'(\alpha) > 0$ при $\alpha > \alpha_0$. Следовательно, как и прежде, $\alpha = \alpha_0$ — единственный корень уравнения $\bar{Q}'(\alpha) = 0$.

Изучим теперь многомерный случай квазилинейной регрессии. Допустим, помимо корня $\alpha = \alpha_0$ система уравнений $\partial \bar{Q} / \partial \alpha = 0$ имеет другой $\alpha = \alpha_1$. Соединим точки α_0 и α_1 прямой $\lambda \alpha_0 + (1 - \lambda) \alpha_1$, $-\infty < \lambda < \infty$, и рассмотрим функцию

$$\bar{Q}(\lambda) = \bar{Q}(\lambda \alpha_0 + (1 - \lambda) \alpha_1).$$

Очевидно тогда $\bar{Q}'(0) = \bar{Q}'(1) = 0$. Таким образом, для того чтобы \bar{Q} была одностационарной, достаточно, чтобы она была таковой на любом луче, исходящем из α_0 . Но на луче $\lambda \alpha_0 + (1 - \lambda) \alpha_1$ многомерная квазилинейная регрессия превращается в одномерную $g((\lambda \alpha_0 + (1 - \lambda) \alpha_1), x_i) = g(\lambda w_i + v_i)$, $w_i = ((\alpha_0 - \alpha_1), x_i)$, $v_i = (\alpha_1, x_i)$, для которой одностационарность \bar{Q} была доказана ранее.

Итак, для квазилинейной регрессии математическое ожидание суммы квадратов (4.2) является всегда одностационарным (одноэкстремальным)¹⁾.

Свойство одностационарности или многостационарности математического ожидания суммы квадратов — свойство самой модели регрессии. Понятно, что чем адекватнее модель, тем меньшее количество локальных минимумов будет иметь соответствующая минимизируемая функция. Хотелось бы, чтобы в пределе, т.е. в том случае, когда данные в точности "ложатся" на модель, сумма квадратов была бы одностационарной (в частности, многоэкстремальной). Собственно, это и означает одностационарность функции (4.2). Если для любого α_0 функция (4.2) многостационарна по α , то какова бы ни была высокой степень адекватности модели (которую измеряем величиной $\inf_{\alpha} Q(\alpha; y)$), для некоторых наблюдений сумма квадратов будет многостационарной. Это означает, что одностационарность (4.2) в некотором смысле — условие "правильности" (адекватности) модели.

¹⁾ Фактически доказано большее: линейная одностационарность \bar{Q} , т.е. одностационарность на любом отрезке прямой.

Существует наглядное условие, практически эквивалентное условию одностационарности математического ожидания суммы квадратов. Для простоты ограничимся случаем одного оцениваемого параметра.

Определение. Кривую регрессии $f(\alpha)$, $\alpha \in R^1$, называем *однонаправленной*, если для любого $\alpha_0 \in R^1$

$$(f(\alpha) - f(\alpha_0)) \dot{f}(\alpha) > 0, \quad \alpha > \alpha_0,$$

и

$$(f(\alpha) - f(\alpha_0)) \dot{f}(\alpha) < 0, \quad \alpha < \alpha_0. \tag{4.4}$$

Легко видеть, что левые части неравенств в определении совпадают с производной функции $\frac{1}{2} \bar{Q}(\alpha; \alpha_0)$. Поэтому если кривая регрессии является однонаправленной, то функция $\bar{Q}(\alpha; \alpha_0)$ будет одностационарной¹⁾.

Однонаправленность кривой будет существенно использоваться в следующих главах при построении критериев одностационарности суммы квадратов. Там же будут приведены достаточные условия однонаправленности.

¹⁾ Можно показать, что квазилинейные регрессии являются однонаправленными (см. § 3 гл. 4).

КРИТЕРИИ ЛОКАЛЬНОЙ ВЫПУКЛОСТИ

Понятие выпуклой функции является центральным в теории оптимизации. В зависимости от того, является ли минимизируемая функция выпуклой или нет, можно говорить о применении тех или иных методов минимизации, их сходимости и скорости сходимости. Выпуклая функция определяется на выпуклом множестве: Говорят, что $F(x)$, $x \in R^m$ *выпукла* на выпуклом множестве $S \subset R^m$, если для любых $x_1, x_2 \in S$ и любых $0 \leq \lambda \leq 1$ имеет место неравенство $F(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda F(x_1) + (1 - \lambda)F(x_2)$, и *строго выпукла*, если неравенство является строгим при $0 < \lambda < 1$, $x_1 \neq x_2$.

К сожалению, на практике минимизируемые функции редко оказываются выпуклыми. К подобного рода функциям относится и сумма квадратов отклонений. Как следует из предыдущей главы, она, вообще говоря, является не только невыпуклой, но, больше того, многоэкстремальной. Поэтому можно говорить лишь о ее локальной выпуклости. Дадим четкое определение этому понятию.

Пусть $F(x)$ — достаточное число раз непрерывно дифференцируемая функция, ограниченная снизу на R^m . Говорим, что эта функция (*строго*) *локально выпукла в точке* $x_0 \in R^m$, если найдется окрестность этой точки ненулевого радиуса, в которой $F(x)$ (*строго*) выпукла. Говорим, что $F(x)$ (*строго*) *локально выпукла на открытом (не обязательно выпуклом) множестве* $S \subset R^m$, если она (*строго*) локально выпукла в каждой точке этого множества. Говорим, что $F(x)$ (*строго*) *локально выпукла на множестве* S (не обязательно открытом) с непустой внутренностью $\overset{\circ}{S}$, если эта функция (*строго*) локально выпукла на $\overset{\circ}{S}$.

Для строгой локальной выпуклости функции $F(x)$ в точке x_0 достаточно, чтобы гессиан $\partial^2 F(x_0)/\partial x^2$ был положительно определен. Это следует из непрерывности гессиана и непрерывности минимального собственного числа как функции элементов матрицы.

В данной главе строятся критерии локальной выпуклости суммы квадратов, причем в качестве множества S берется множество уровня. Соответствующие формулы иллюстрируются на некоторых классах нелинейных регрессий в § 3. Последний параграф этой главы посвящен проблеме сужения априорного множества параметров, которое в контексте рассматриваемых проблем можно понимать как область минимизации суммы квадратов.

§ 1. Критерий локальной выпуклости суммы квадратов

Итак, рассмотрим сумму квадратов отклонений как функцию параметра $\alpha \in R^m$:

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\alpha))^2.$$

Для простоты будем считать, что априорное множество параметров Λ совпадает со всем пространством. Задача состоит в том, чтобы найти такие подмножества пространства R^m , на которых $Q(\alpha)$ была бы локально выпуклой функцией, т.е. на которых гессиан $Q(\alpha)$ был бы положительно определен. Для исследуемой функции эти множества удобно искать в классе множеств уровня.

Как легко проверить,

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} = F^T(\alpha)F(\alpha) - \sum (y_i - f_i(\alpha))H_i(\alpha); \quad (1.1)$$

здесь и далее

$$F(\alpha) = \frac{\partial f}{\partial \alpha}, \quad H_i(\alpha) = \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha^2}, \quad i = 1, \dots, n,$$

— соответственно матрица первых производных порядка $n \times m$ полного ранга и матрица вторых производных порядка $m \times m$ функции регрессии. Предположим для простоты $\alpha \in R^1$; тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d^2 Q}{d\alpha^2} &= \sum \dot{f}_i^2(\alpha) - \sum (y_i - f_i(\alpha))\ddot{f}_i(\alpha) = \\ &= \|\dot{f}(\alpha)\|^2 - (y - f(\alpha), \ddot{f}(\alpha)), \end{aligned} \quad (1.2)$$

где $\dot{f}(\alpha)$ — вектор $n \times 1$ первой производной, $\ddot{f}(\alpha)$ — вектор $n \times 1$ второй производной функции регрессии $f(\alpha)$ из R^n . Применим к (1.2) неравенство Коши—Буняковского:

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 Q}{d\alpha^2} \geq \|\dot{f}(\alpha)\|^2 - \|y - f(\alpha)\| \|\ddot{f}(\alpha)\|; \quad (1.3)$$

поэтому, если обозначить

$$\bar{Q}_{LC} = \inf_{\alpha \in R^1} \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^4}{\|\ddot{f}(\alpha)\|^2}, \quad (1.4)$$

то, как следует из (1.3), для всех α таких, что $Q(\alpha) < \bar{Q}_{LC}$, имеем $d^2 Q/d\alpha^2 > 0$. Таким образом, нами установлено, что на множестве уровня

$$S(\bar{Q}_{LC}) = \{\alpha \in R^m : Q(\alpha) < \bar{Q}_{LC}\} \quad (1.5)$$

сумма квадратов (строго) локально выпукла¹⁾. Нетрудно обобщить этот результат на многомерный случай (рис. 11).

¹⁾ Нижний индекс LC — первые буквы от английского Local Convex — локально выпукла, смысл верхней черты у \bar{Q}_{LC} будет объяснен ниже.

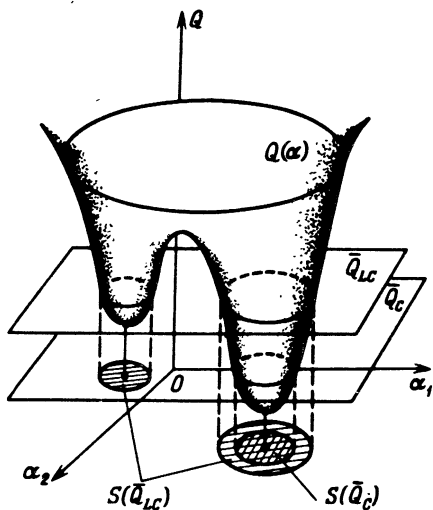


Рис. 11. Множества уровней локальной и глобальной выпуклости суммы квадратов

Теорема 1.1 (критерий локальной выпуклости). Обозначим

$$\bar{Q}_{LC} = \inf_{\alpha \in R^m} \min_{\nu \in R^m} \frac{(\nu^T F^T(\alpha) F(\alpha) \nu)^2}{\sum (\nu^T H_i(\alpha) \nu)^2}. \quad (1.6)$$

Тогда на множестве уровня (1.5) сумма квадратов локально выпукла (гессиан положительно определен)¹⁾.

Доказательство. Для того чтобы гессиан $Q(\alpha)$ был положительно определен, необходимо и достаточно, чтобы для любого $\nu \neq 0$

$$\nu^T F^T(\alpha) F(\alpha) \nu - \sum (y_i - f_i(\alpha)) \nu^T H_i(\alpha) \nu > 0.$$

Применяя неравенство Коши–Буняковского, получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \nu^T \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \nu &\geq \\ &\geq \nu^T F^T(\alpha) F(\alpha) \nu - [\sum (y_i - f_i(\alpha))^2]^{1/2} [\sum (\nu^T H_i(\alpha) \nu)^2]^{1/2}, \end{aligned}$$

откуда и следует утверждение теоремы.

В некотором смысле значение (1.6) для данной нелинейной модели регрессии является верхней гранью значений сумм квадратов, при которых гессиан $\partial^2 Q / \partial \alpha^2$ положительно определен. Этим объясняется верхняя черта в (1.6). В последнее утверждение вкладываем следующий смысл: пусть $Q^* > \bar{Q}_{LC}$, тогда для данных функций $f_i(\alpha)$, $i = 1, \dots, n$, можно подобрать такие наблюдения y_1, \dots, y_n и $\alpha_0 \in R^m$, что $Q(\alpha_0; y) = Q^*$, а $\partial^2 Q(\alpha_0; y) / \partial \alpha^2$ не является неотрицательно определенной матрицей. Доказательство этого факта следует из достижимости неравенства Коши–Буняковского. В связи с этим значения суммы квадратов, меньшие \bar{Q}_{LC} , будем обозначать Q_{LC} . Тогда для всех α : $Q(\alpha) < Q_{LC}$ сумма квадратов локально выпукла. Значение уровня суммы квадратов (1.6), задающее локальную выпуклость, не зависит от наблюдений y_1, \dots, y_n . Иногда, используя специфику конкретной нелинейной регрессии, удается найти более высокое значение уровня, не зависящее от наблюдений. Это возможно, в частности, для логлинейных и степенных регрессий (см. § 3).

Вычисление значения \bar{Q}_{LC} по формуле (1.6) в многомерном случае связано с неудобством рассмотрения двух минимумов. Ниже будет показано, как за счет некоторого понижения \bar{Q}_{LC} в (1.6) можно снять минимум по ν .

¹⁾ Если знаменатель дроби равен нулю, значение дроби полагаем равным $+\infty$.

Предварительно сделаем несколько замечаний по поводу обозначений. На протяжении этой книги запись $A \leq B$ ($A < B$) для двух симметрических матриц одного порядка будет означать, что матрица $B - A$ неотрицательно (положительно) определена. Если A — симметрическая матрица, то под $\lambda_{\min}(A)$ понимаем минимальное собственное число этой матрицы. Напомним, что если A — симметрическая матрица, то все ее собственные числа действительны; если $A > 0$ ($A \geq 0$), то $\lambda_{\min}(A) > 0$ ($\lambda_{\min}(A) \geq 0$). Минимальным обобщенным собственным числом симметрических квадратных матриц A и B одного порядка называется минимальный корень алгебраического уравнения $|A - \lambda B| = 0$. Если A и B положительно определены, то это значение положительно. Можно показать, что оно равно минимальному собственному числу матрицы AB^{-1} , которое, как и в случае симметрической матрицы, будем обозначать $\lambda_{\min}(AB^{-1})$. Если минимальное обобщенное собственное число матриц A и B обозначить через λ_* , то для всех $\lambda < \lambda_*$ матрица $A - \lambda B$ является положительно определенной.

Воспользуемся следующим матричным неравенством, которое можно рассматривать как обобщение неравенства Коши—Буняковского.

Лемма 1.1. Пусть e_i — действительные числа, H_i — симметрические матрицы $m \times m$, $i = 1, \dots, n$. Тогда

$$(\sum e_i H_i)^2 \leq \sum e_i^2 \sum H_i^2. \quad (1.7)$$

*Доказательство*¹⁾. Обозначим через L диагональную матрицу $m \times m$ с i -м диагональным элементом λ_i . Очевидно, что

$$P(\lambda_1, \dots, \lambda_m) = P(L) = \sum (H_i + e_i L)^2 \geq 0. \quad (1.8)$$

Раскроем скобки:

$$\begin{aligned} P(L) &= \sum (H_i^2 + e_i H_i L + e_i L H_i + e_i^2 L^2) = \\ &= \sum e_i^2 \left[\left(L^2 + \frac{1}{\sum e_i^2} \sum e_i H_i L + L \frac{1}{\sum e_i^2} \sum e_i H_i + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{(\sum e_i^2)^2} (\sum e_i H_i)^2 \right) + \frac{1}{\sum e_i^2} \sum H_i^2 - \frac{1}{(\sum e_i^2)^2} (\sum e_i H_i)^2 \right] = \\ &= \sum e_i^2 \left(L + \frac{1}{\sum e_i^2} \sum e_i H_i \right)^2 + \frac{1}{\sum e_i^2} (\sum e_i^2 \sum H_i^2 - (\sum e_i H_i)^2). \end{aligned} \quad (1.9)$$

Допустим, что (1.7) не верно. Тогда найдется такой вектор $s \in R^m$, что

$$s^x (\sum e_i^2 \sum H_i^2 - (\sum e_i H_i)^2) s < 0. \quad (1.10)$$

Положим для $j = 1, \dots, m$

$$\lambda_j^* = \begin{cases} \text{любое, если } s_j = 0, \\ -(\sum e_i H_i s)_j / \sum e_i^2 / s_j, \text{ если } s_j \neq 0. \end{cases}$$

¹⁾ В следующем параграфе будет дано другое доказательство этого неравенства.

Тогда для соответствующей диагональной матрицы L^* имеем

$$\left(L^* + \frac{1}{\sum e_i^2} \sum e_i H_i \right) s = 0. \quad (1.11)$$

Поэтому, домножая (1.9) слева на s^T и справа на s , получим

$$s^T P(L^*) s = -s^T [\sum e_i^2 \sum H_i^2 - (\sum e_i H_i)^2] s < 0,$$

что противоречит (1.8). Лемма доказана.

Теорема 1.2. *Обозначим через Q_{LC} верхнюю грань значений Q , при которых*

$$F^T(\alpha)F(\alpha) - \sqrt{Q} (\sum H_i^2(\alpha))^{1/2} \geq 0 \quad \forall \alpha \in R^m,$$

т.е.

$$Q_{LC} = \inf_{\alpha \in R^m} \lambda_{\min}^2 [F^T(\alpha)F(\alpha) (\sum H_i^2(\alpha))^{-1/2}]. \quad (1.12)$$

Тогда на множестве уровня

$$S(Q_{LC}) = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) < Q_{LC} \} \quad (1.13)$$

сумма квадратов $Q(\alpha)$ строго локально выпукла (в каждой точке $S(Q_{LC})$ гессиан $Q(\alpha)$ положительно определен)¹⁾.

Доказательство. В принятых обозначениях, как следует из предыдущей леммы,

$$\begin{aligned} \sum (y_i - f_i(\alpha)) H_i(\alpha) &\leq (\sum (y_i - f_i(\alpha))^2)^{1/2} (\sum H_i^2(\alpha))^{1/2} = \\ &= Q^{1/2}(\alpha) (\sum H_i^2(\alpha))^{1/2}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \geq F^T(\alpha)F(\alpha) - Q^{1/2}(\alpha) (\sum H_i^2(\alpha))^{1/2},$$

откуда и следует утверждение теоремы.

Пример вычисления \bar{Q}_{LC} , $m = 1$. Рассмотрим простейший вид нелинейной регрессии с одним оцениваемым параметром (параболическая регрессия) $f_i(\alpha) = \alpha x_i + \alpha^2 z_i$, $i = 1, \dots, n$. Эта регрессия уже была рассмотрена ранее в предыдущей главе. Как следует из второй главы, при некоторых наблюдениях сумма квадратов этой регрессии может быть бимодальной, в том числе невыпуклой. Введем векторные обозначения: $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, $z = (z_1, \dots, z_n)^T$ (считаем, что x и z не коллинеарны). Тогда

$$\begin{aligned} f(\alpha) &= \alpha x + \alpha^2 z, & \dot{f}(\alpha) &= x + 2\alpha z, & \ddot{f}(\alpha) &= 2z, \\ \|\ddot{f}(\alpha)\|^2 &= 4\|z\|^2, & \|\dot{f}(\alpha)\|^2 &= \|x + 2\alpha z\|^2. \end{aligned}$$

Легко проверить, что

$$\min_{\alpha} \|x + 2\alpha z\|^2 = \frac{1}{\|z\|^2} (\|x\|^2 \|z\|^2 - (x, z)^2).$$

¹⁾ Если матрица $\sum H_i^2(\alpha)$ вырождена, то обратную матрицу в (1.12) необходимо заменить на обобщенную обратную (см., например, [8]).

Поэтому для параболической регрессии по формуле (1.4)

$$\bar{Q}_{LC} = \frac{1}{4\|z\|^6} (\|x\|^2 \|z\|^2 - (x, z)^2)^2 = \frac{\sin^4(\widehat{x, z}) \|x\|^4}{4\|z\|^2}. \quad (1.14)$$

Таким образом, можно утверждать, что для всех $\alpha \in R^1$ таких, что $Q(\alpha) < \bar{Q}_{LC}$, имеем $d^2 Q/d\alpha^2 > 0$.

Для параболической регрессии можно непосредственно найти условие выпуклости суммы квадратов. Действительно, как нетрудно убедиться, для этой регрессии

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d^2 Q}{d\alpha^2} &= \Sigma [6\alpha^2 z_i^2 + 6\alpha x_i z_i + (x_i^2 - 2z_i y_i)] = \\ &= 6\alpha^2 \Sigma z_i^2 + 6\alpha \Sigma x_i z_i + \Sigma (x_i^2 - 2z_i y_i). \end{aligned}$$

Поэтому $d^2 Q/d\alpha^2 > 0$ для всех $\alpha \in R^1$ тогда и только тогда, когда дискриминант соответствующего квадратного трехчлена меньше нуля, другими словами, когда

$$D = 36(\Sigma x_i z_i)^2 - 24 \Sigma z_i^2 \Sigma (x_i^2 - 2z_i y_i) < 0.$$

Последнее неравенство в векторной форме эквивалентно

$$4\|z\|^2 (z, y) + 3(x, z)^2 < 2\|x\|^2 \|z\|^2,$$

или

$$\cos^2(\widehat{x, z}) \leq \frac{2}{3} - \frac{4}{3} \frac{(x, y)}{\|x\|^2}.$$

Последнее неравенство определяет верхнюю границу степени коллинеарности векторов x и z . В другой записи, относительно вектора наблюдений y , оно имеет вид

$$(z, y) < \|x\|^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{4} \cos^2(\widehat{x, z}) \right)$$

и определяет в R^n некоторое полупространство, ограниченное гиперплоскостью с направляющим вектором z . Таким образом, если последнее неравенство для данного набора наблюдений имеет место, то сумма квадратов параболической регрессии выпукла для всех $-\infty < \alpha < \infty$.

Задача нахождения оценки снизу для \bar{Q}_{LC} является в общем случае многомерной. Ее можно свести к одномерной, рассматривая всевозможные прямые в пространстве параметров R^m и соответствующие им нелинейные регрессии с одним оцениваемым параметром.

Итак, рассмотрим множество всех прямых в R^m . Их, очевидно, можно описать как $\alpha = \lambda v + s$, где $s \in R^m$, $v \in R^m$, $-\infty < \lambda < \infty$. Фиксируем эту прямую выбором некоторых $v, s \in R^m$. Соответствующая функция регрессии есть $\varphi(\lambda) = f(\lambda v + s)$, где $f: R^m \rightarrow R^n$ — исходная функция регрессии. Очевидно

$$\dot{\varphi}(\lambda) = F(\lambda v + s)v, \quad \ddot{\varphi}_i(\lambda) = v^T H_i(\lambda v + s)v.$$

Вычислим для функции регрессии $\varphi(\lambda)$ значение \bar{Q}_{LC} по формуле (1.4). Тогда

$$\bar{Q}_{LC}(v, s) = \inf_{\lambda} \frac{(v^T F^T(\lambda v + s) F(\lambda v + s) v)^2}{\Sigma (v^T H_i(\lambda v + s) v)^2}.$$

Покажем, что

$$\bar{Q}_{LC} = \inf_{v, s \in R^m} \bar{Q}_{LC}(v, s),$$

где слева стоит значение, вычисленное по формуле (1.6). Это следует из

того, что если λ пробегает значения из R^1 , s из R^m , то при фиксированном ν значение $\lambda\nu + s$ "покрывает" все пространство R^m ; формально

$$\begin{aligned} \inf_{\lambda, \nu, s} \bar{Q}_{LC}(\nu, s) &= \inf_{\nu} \inf_{\lambda, s} \frac{(\nu^T F^T(\lambda\nu + s)F(\lambda\nu + s)\nu)^2}{\sum (\nu^T H_i(\lambda\nu + s)\nu)^2} = \\ &= \inf_{\nu, \alpha} \frac{(\nu^T F^T(\alpha)F(\alpha)\nu)^2}{\sum (\nu^T H_i(\alpha)\nu)^2} = \bar{Q}_{LC}. \end{aligned}$$

§ 2. Один общий метод получения числовых неравенств

В этом параграфе мы сделаем небольшое отступление от развиваемого подхода построения критериев проверки совпадения данного локального минимума суммы квадратов с глобальным. Здесь будет изложена одна идея получения и доказательства числовых неравенств достаточно широкого класса. Представляется, что предлагаемый метод может иметь общий интерес. С помощью этого метода далее будут строиться неравенства, необходимые для исследования суммы квадратов нелинейной регрессии. Излагаемый метод будем называть *оптимизационным методом получения числовых неравенств*.

Суть этого метода такова. Пусть $S(a_1, a_2, \dots, a_n)$ — непрерывная функция на R^n , относительно которой необходимо установить некоторое неравенство (функция S формально может зависеть и от других переменных, однако их для простоты во внимание не принимаем). *Базой неравенства* называем множество $B \subset R^n$. Требуем от базы, чтобы она была компактом. Оптимизационный метод будет предложен в случае, когда база задается через *функцию базы неравенства* (корогокко: *функцию базы*); это есть непрерывная функция $p(a_1, a_2, \dots, a_n)$. Тогда за базу неравенства можно взять

$$B(\varphi) = \{a \in R^n: p(a) = \varphi\}, \quad \varphi \in R^1, \quad (2.1)$$

причем φ таково, что $B(\varphi) \neq \emptyset$. Замкнутость $B(\varphi)$ гарантируется непрерывностью p . Для того чтобы получить вдобавок и ограниченность базы, достаточно, например, потребовать, чтобы "на бесконечности p было равно бесконечности", более точно, чтобы

$$|p(a)| \rightarrow \infty, \quad \|a\| \rightarrow \infty. \quad (2.2)$$

Функция базы может быть и векторнозначной, это не принципиально.

Далее, поскольку $B(\varphi)$ — компакт для любого φ , то на нем $S(a)$ достигает своей нижней и верхней границы. Для простоты речь будем вести о верхней границе. Пусть для данного φ вектор $\hat{a}(\varphi)$ дает максимум функции $S(a)$ на (2.1). Тогда по определению

$$S(a) \leq S(\hat{a}(\varphi)) = R(\varphi), \quad a \in B(\varphi), \quad \varphi \in R^1,$$

где обозначено $S(\hat{a}(\varphi)) = R(\varphi)$. Но принимая во внимание, что $\varphi = p(a)$, приходим к окончательному неравенству

$$S(a) \leq R(p(a)), \quad a \in R^n.$$

При нахождении оптимума функции $S(a)$ на $B(\varphi)$ можно пользоваться методом множителей Лагранжа.

Предлагаемый метод может быть использован и тогда, когда множество (2.1) не является компактом (как правило, это будет иметь место, если $p(a)$ "не уходит в бесконечность", т.е. не выполняется (2.2)). Тогда необходимо требовать, чтобы для любого φ функция $S(a)$ была ограничена сверху (или снизу) на $B(\varphi)$. Поясним предлагаемый метод на примерах.

1. **Неравенство Коши—Буняковского.** Оно, как известно, имеет вид

$$\sum_1^n a_i b_i \leq \sqrt{\sum_1^n a_i^2} \sqrt{\sum_1^n b_i^2}. \quad (2.3)$$

Допустим, нам неизвестно неравенство (2.3), но мы хотим оценить сверху величину $\sum a_i b_i$. Разумеется, не делая других предположений, функцию

$$S(a_1, \dots, a_n) = \sum a_i b_i$$

оценить сверху нельзя, поскольку она неограниченная. Однако это можно сделать на компакте. Одним из простейших компактов является сфера в R^n :

$$B(\varphi) = \{a \in R^n: \|a\|^2 = \varphi\}, \quad \varphi \geq 0.$$

Итак, найдем

$$\max_{a \in B(\varphi)} S(a_1, \dots, a_n) = \max_{\sum a_i^2 = \varphi} \sum a_i b_i.$$

Введем функцию и множитель Лагранжа:

$$L(a_1, \dots, a_n; \lambda) = \sum a_i b_i - \lambda(\sum a_i^2 - \varphi).$$

Необходимое условие экстремума имеет вид

$$\frac{\partial L}{\partial a_i} = b_i - 2\lambda a_i = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

откуда, подставляя $\sum a_i^2 = \varphi$, находим

$$2\lambda = \pm \left(\frac{\varphi}{\sum b_i^2} \right)^{1/2}.$$

Таким образом, имеем два решения. Первое соответствует положительному значению λ , второе — отрицательному. На основе проведенного анализа можно убедиться, что

$$\max_{\sum a_i^2 = \varphi} \sum a_i b_i = \sqrt{\varphi} \sqrt{\sum b_i^2}, \quad (2.4)$$

$$\min_{\sum a_i^2 = \varphi} \sum a_i b_i = -\sqrt{\varphi} \sqrt{\sum b_i^2}. \quad (2.5)$$

То, что эти значения соответствуют локальным максимуму и минимуму, следует из того, что $\partial^2 L / \partial a^2 = -2\lambda$ (при $\lambda > 0$ гессиан L отрицательно определен, при $\lambda < 0$ положительно определен). Но других стационарных точек L не имеет, значит, локальные экстремумы совпадают с глобальными. Итак, подставляя в (2.4) и (2.5) $\varphi = \sum a_i^2$, получаем требуемое неравенство:

$$-\sqrt{\sum a_i^2} \sqrt{\sum b_i^2} \leq \sum a_i b_i \leq \sqrt{\sum a_i^2} \sqrt{\sum b_i^2}.$$

2. Неравенство Гёльдера:

$$\sum a_i b_i \leq (\sum |a_i|^p)^{1/p} (\sum |b_i|^q)^{1/q}, \quad (2.6)$$

где $p \geq 1$, $q \geq 1$, $1/p + 1/q = 1$.

С точки зрения рассматриваемого оптимизационного метода неравенство Гёльдера отличается от неравенства Коши–Буняковского базой. А именно, в (2.6) за базу примем компакт

$$B(\varphi) = \{a \in R^n: \sum |a_i|^p = \varphi\},$$

который при $p > 1$ является дифференцируемым многообразием. Заметим прежде всего, что для доказательства (2.6) достаточно считать $a_i > 0$, $b_i > 0$. Функция Лагранжа равна

$$L(a_1, \dots, a_n; \lambda) = \sum a_i b_i - \lambda (\sum a_i^p - \varphi), \quad a_i \geq 0.$$

Необходимое условие экстремума (не теряя в общности можно считать $b_i > 0$, $p > 1$):

$$\frac{\partial L}{\partial a_i} = b_i - p \lambda a_i^{p-1} = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Как и в случае неравенства Коши–Буняковского, последняя система имеет два решения в зависимости от знака λ . Положительное, нетрудно убедиться, приводит к максимуму, отрицательное – к минимуму. Таким образом,

$$|\sum a_i b_i| \leq \varphi^{1/p} (\sum |b_i|^q)^{1/q}$$

или

$$|\sum a_i b_i| \leq (\sum |a_i|^p)^{1/p} (\sum |b_i|^q)^{1/q}.$$

3. Неравенство между средним арифметическим и средним квадратическим:

$$\left(\frac{1}{n} \sum a_i\right)^2 \leq \frac{1}{n} \sum a_i^2. \quad (2.7)$$

Положим

$$S(a_1, \dots, a_n) = \sum a_i, \quad B(\varphi) = \{a \in R^n: \sum a_i^2 = \varphi\}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} L(a_1, \dots, a_n; \lambda) &= \\ &= \sum a_i - \lambda (\sum a_i^2 - \varphi); \quad \frac{\partial L}{\partial a_i} = 1 - 2\lambda a_i = 0, \quad i = 1, \dots, n, \end{aligned}$$

откуда следует, что $a_i = \text{const} = 1/2\lambda = \pm(\varphi/n)^{1/2}$. Положительное значение корня соответствует максимуму S , отрицательное – минимуму. Итак,

$$-\sqrt{n} (\sum a_i^2)^{1/2} \leq \sum a_i \leq \sqrt{n} (\sum a_i^2)^{1/2},$$

что эквивалентно (2.7).

Нетрудно доказать обобщение неравенства (2.7):

$$\left(\frac{1}{n} \sum a_i^p\right)^{1/p} \leq \left(\frac{1}{n} \sum a_i^q\right)^{1/q}, \quad a_i > 0, \quad q \geq p > 0. \quad (2.8)$$

В этом случае следует положить

$$S(a_1, \dots, a_n) = \sum a_i^p, \quad p(a_1, \dots, a_n) = \sum a_i^q.$$

4. Неравенство между средним геометрическим и обобщенным средним арифметическим. Положим

$$S(a_1, \dots, a_n) = \prod_{i=1}^n a_i,$$

а за функцию базы неравенства возьмем

$$p(a_1, \dots, a_n) = \sum_1^n |a_i|^p, \quad p \geq 1.$$

Найдем

$$\max_{p(a_1, \dots, a_n) = \varphi} S(a_1, \dots, a_n).$$

Составим функцию Лагранжа:

$$L(a_1, \dots, a_n; \lambda) = \prod_1^n a_i - \lambda(\sum_1^n |a_i|^p - \varphi).$$

Пусть $a_i > 0$, тогда

$$\frac{\partial L}{\partial a_i} = \prod_{j \neq i} a_j - p \lambda a_i^{p-1} = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Допножим каждое из предыдущих равенств на соответствующее $a_i > 0$. Тогда

$$\prod_1^n a_j - p \lambda a_i^p = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

т.е. $a_i = \text{const} = (\varphi/n)^{1/p}$, поэтому ($a_i > 0$)

$$\max_{\sum a_i^p = \varphi} \prod_1^n a_i = \left(\frac{\varphi}{n}\right)^{n/p},$$

а значит, при $a_i > 0$

$$\prod_1^n a_i \leq \left(\frac{1}{n} \sum_1^n a_i^p\right)^{n/p},$$

или

$$\left(\prod_1^n a_i\right)^{1/n} \leq \left(\frac{1}{n} \sum_1^n a_i^p\right)^{1/p}. \quad (2.9)$$

В частности, при $p = n$ получим следующее неравенство:

$$\prod_i^n a_i \leq \frac{1}{n} \sum_i^n a_i^n. \quad (2.10)$$

Полагая $a_i = \exp(\alpha x_i/n)$, из последнего неравенства получим

$$\exp(\alpha \bar{x}) \leq \frac{1}{n} \sum_1^n \exp(\alpha x_i). \quad (2.11)$$

Оно, кстати, является следствием выпуклости функции \exp . Этим неравенством мы воспользуемся в дальнейшем.

5. Установим с помощью оптимизационного метода еще одно интересное неравенство:

$$\sum_1^{n-1} (a_{i+1} - a_i)^2 \leq 4 \cos^2 \frac{\pi}{2n} \sum_1^n a_i^2. \quad (2.12)$$

Положим здесь

$$S(a_1, \dots, a_n) = \sum_1^{n-1} (a_{i+1} - a_i)^2, \quad p(a_1, \dots, a_n) = \sum_1^n a_i^2.$$

Грубая верхняя граница для $S(a_1, \dots, a_n)$, выраженная через $p(a_1, \dots, a_n)$, устанавливается элементарно:

$$\begin{aligned} S(a_1, \dots, a_n) &= \sum_1^{n-1} a_{i+1}^2 - 2 \sum_1^{n-1} a_{i+1} a_i + \sum_1^{n-1} a_i^2 \leq \\ &\leq \sum_1^n a_i^2 + 2 \left(\sum_2^n a_i^2 \right)^{1/2} \left(\sum_1^{n-1} a_i^2 \right)^{1/2} + \sum_1^n a_i^2 \leq 4 \sum_1^n a_i^2. \end{aligned}$$

Найдем более точное неравенство. Составим функцию Лагранжа

$$L(a_1, \dots, a_n; \lambda) = \sum_1^{n-1} (a_{i+1} - a_i)^2 - \lambda \left(\sum_1^n a_i^2 - \varphi \right).$$

Необходимое условие экстремума имеет вид системы уравнений:

$$\frac{\partial L}{\partial a_1} = 2(a_1 - a_2) - 2\lambda a_1 = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_i} = 2(a_i - a_{i-1}) + 2(a_i - a_{i+1}) - 2\lambda a_i = 0, \quad 2 \leq i \leq n-1,$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_n} = 2(a_n - a_{n-1}) - 2\lambda a_n = 0.$$

Эта система в матричном виде может быть переписана как

$$(H - \lambda I) \bar{a} = 0, \quad \bar{a} = (a_1, \dots, a_n)^T, \quad (2.13)$$

нетрудно доказать, что

$$\sum_1^n \cos \frac{2i-1}{n} \pi = \sum_1^n \cos \frac{2\pi}{n} i = 0.$$

Поэтому для вектора \bar{a}_{n-1}

$$\sum_1^n a_i^2 = \sum_1^n \sin^2 \frac{(2i-1)}{2n} \pi = \frac{1}{2} \sum_1^n \left(1 - \cos \frac{2i-1}{n} \pi\right) = \frac{n}{2},$$

$$\begin{aligned} \sum_1^{n-1} (a_{i+1} - a_i)^2 &= \sum_1^{n-1} \left(\sin \frac{2i-1}{2n} \pi + \sin \frac{2i+1}{2n} \pi \right)^2 = \\ &= 2 \cos^2 \frac{\pi}{2n} \sum_1^{n-1} \left(1 - \cos \frac{2\pi}{n} i\right). \end{aligned}$$

Но

$$\begin{aligned} \sum_1^{n-1} \left(1 - \cos \frac{2\pi}{n} i\right) &= (n-1) - \sum_1^{n-1} \cos \frac{2\pi}{n} i = \\ &= (n-1) - \sum_1^n \cos \frac{2\pi}{n} i + \cos \frac{2\pi}{n} n = n. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\sum_1^{n-1} (a_{i+1} - a_i)^2 = 2n \cos^2 \frac{\pi}{2n}.$$

Подставляя полученные значения в $S(a_1, \dots, a_n)$, приходим к неравенству (2.12). Напомним, что оно достигается на векторах $a = (a_1, \dots, a_n)$, коллинеарных \bar{a}_{n-1} . Заметим также, что

$$\sum_1^{n-1} (a_{i+1} - a_i)^2 / \sum_1^n a_i^2 \leq 4 \cos^2 \frac{\pi}{2n} \uparrow 4, \quad n \rightarrow \infty.$$

Предлагаемый метод позволяет получать неравенства в условиях ограничений, что классическими методами бывает сделать не всегда просто. Рассмотрим, в частности, следующий пример.

6. Неравенство Коши – Буняковского в условиях линейного ограничения. Допустим, необходимо оценить сверху сумму $\sum_1^n a_i b_i$ при условии, что

$$\sum_1^n a_i g_i = 0. \tag{2.15}$$

Базой неравенства, очевидно, будет

$$B(\varphi) = \{a \in R^n : \|a\|^2 = \varphi, (a, g) = 0\}.$$

Составляем функцию Лагранжа:

$$L(a_1, \dots, a_n; \lambda_1, \lambda_2) = \sum a_i b_i - \lambda_1 (\sum a_i^2 - \varphi) - \lambda_2 \sum a_i g_i.$$

Необходимое условие экстремума:

$$\frac{\partial L}{\partial a_i} = b_i - 2\lambda_1 a_i - \lambda_2 g_i = 0, \quad i = 1, \dots, n;$$

отсюда

$$a_i = \frac{1}{2\lambda_1} (b_i - \lambda_2 g_i). \quad (2.16)$$

Из условия (2.15) очевидно следует, что

$$\lambda_2 = \Sigma b_i g_i / \Sigma g_i^2.$$

Значение $2\lambda_1$ найдем из условия $\Sigma a_i^2 = \varphi$:

$$2\lambda_1 = [\Sigma (b_i - \lambda_2 g_i)^2 / \varphi]^{1/2}.$$

Подставляя найденные значения для λ_2 и λ_1 в (2.16), получим

$$\Sigma a_i b_i \leq \frac{\varphi^{1/2}}{[\Sigma (b_i - \lambda_2 g_i)^2]^{1/2}} \Sigma (b_i - \lambda_2 g_i) b_i, \quad \Sigma a_i g_i = 0.$$

Однако нетрудно проверить, что при найденном значении

$$\begin{aligned} \Sigma (b_i - \lambda_2 g_i)^2 &= \Sigma (b_i - \lambda_2 g_i) b_i = \\ &= [\Sigma b_i^2 \Sigma g_i^2 - (\Sigma b_i g_i)^2] / \Sigma g_i^2. \end{aligned}$$

Поэтому окончательно

$$\Sigma a_i b_i \leq (\Sigma a_i^2)^{1/2} \left[\frac{\Sigma b_i^2 \Sigma g_i^2 - (\Sigma b_i g_i)^2}{\Sigma g_i^2} \right]^{1/2} \quad (2.17)$$

при условии (2.15), или

$$(\Sigma a_i b_i)^2 \leq (\Sigma a_i^2) \left(\Sigma b_i^2 - \frac{(\Sigma b_i g_i)^2}{\Sigma g_i^2} \right).$$

Последнее неравенство в скалярной форме после элементарных преобразований может быть переписано как

$$\cos^2(\hat{a}, \hat{b}) \leq \sin^2(\hat{g}, \hat{b}), \quad \hat{g} \perp \hat{a}.$$

Неравенство (2.17) будет существенно использовано нами в следующей главе.

Заметим, что неравенство (2.17) может быть доказано другим, более элегантно способом. Из (2.15) при любом $k \in R^1$ по неравенству Коши – Буняковского

$$\begin{aligned} (\Sigma a_i b_i)^2 &= (\Sigma a_i b_i - k \Sigma a_i g_i)^2 = \\ &= [\Sigma a_i (b_i - k g_i)]^2 \leq \Sigma a_i^2 \Sigma (b_i - k g_i)^2, \end{aligned}$$

но

$$\min_k \Sigma (b_i - k g_i)^2 = \frac{\Sigma b_i^2 \Sigma g_i^2 - (\Sigma b_i g_i)^2}{\Sigma g_i^2},$$

откуда и следует (2.17).

7. Предлагаемый метод получения неравенств очень удобен в том случае, когда необходимо оценить некоторое выражение сверху или снизу в терминах другого выражения. Разумеется, можно попытаться приспособить для этих целей другие известные неравенства, воспользоваться выпуклостью или вогнутостью функций; оптимизационный же метод сразу приводит к решению. Так, допустим, необходимо оценить снизу выражение

$$\sum a_i(b_i + c_i a_i) \quad (2.18)$$

в терминах $\sum a_i$ при условии, что $c_i > 0$. Составляем функцию Лагранжа

$$L(a_1, \dots, a_n; \lambda) = \sum a_i(b_i + c_i a_i) - \lambda(\sum a_i - \varphi)$$

и находим ее экстремальные точки:

$$\frac{\partial L}{\partial a_i} = b_i + 2c_i a_i - \lambda = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

откуда $a_i = (\lambda - b_i)/2c_i$. Принимая во внимание, что $\sum a_i = \varphi$, находим $\lambda = (2\varphi + \sum b_i c_i^{-1})/\sum c_i^{-1}$. Подставляя в L найденные значения a_i и λ , определяем экстремальное значение функционала (2.18), оно соответствует минимуму, поскольку $\partial^2 L/\partial a_i^2 = 2c_i > 0$. Таким образом, приходим к неравенству

$$\sum a_i(b_i + c_i a_i) \geq \frac{1}{4} \left[\frac{(2 \sum a_i + \sum b_i c_i^{-1})^2}{\sum c_i^{-1}} - \sum b_i^2 c_i^{-1} \right], \quad c_i > 0.$$

Читатель, видимо, согласится с тем, что получить это неравенство (именно получить, а не доказать) стандартными методами весьма трудно.

До сих пор техника предлагаемого метода была продемонстрирована на достижимых неравенствах. Покажем, как строить недостижимые неравенства. Так, допустим, необходимо построить оценку сверху для выражения (2.18) в терминах $\sum a_i^2$ при условии $c_i > 0$, $i = 1, \dots, n$. Составляем функцию Лагранжа

$$L(a_1, \dots, a_n; \lambda) = \sum a_i(b_i + c_i a_i) - \lambda(\sum a_i^2 - \varphi).$$

Находим экстремальные точки этого функционала $a_i = b_i/(\lambda - c_i)/2$, где λ — корень уравнения

$$\frac{1}{4} \sum \frac{b_i^2}{(\lambda - c_i)^2} = \varphi. \quad (2.19)$$

Экстремальное значение L равно

$$L_e = L_e(\lambda) = \frac{1}{4} \sum \frac{b_i^2(2\lambda - c_i)}{(\lambda - c_i)^2}, \quad (2.20)$$

причем

$$\frac{dL_e}{d\lambda} = -\frac{\lambda}{2} \sum \frac{b_i^2}{(\lambda - c_i)^3}.$$

В условиях максимума $\partial^2 L / \partial a_i^2 = 2(c_i - \lambda) < 0$, поэтому $\lambda > c_i$. Не теряя общности можно считать

$$\lambda > c_n = \max_i c_i. \quad (2.21)$$

Таким образом, получаем следующее неравенство:

$$\sum a_i(b_i + c_i a_i) \leq \frac{1}{4} \sum \frac{b_i^2 (2\lambda(\varphi) - c_i)}{(\lambda - c_i)^2}, \quad (2.22)$$

где $\lambda = \lambda(\varphi)$ – корень уравнения (2.19), $\varphi = \sum a_i^2$ на множестве (2.21). Неравенство (2.22) неявное, поскольку содержит неявно определяемый параметр $\lambda(\varphi)$. На его основе мы построим сейчас более грубое (уже не достижимое), но явное неравенство. Применим к левой части (2.19) элементарное неравенство $\sum r_i^{-1} \geq n^2 / \sum r_i$. Получим

$$\frac{1}{4} \sum \frac{b_i^2}{(\lambda - c_i)^2} \geq \frac{n^2}{4 \sum (\lambda - c_i)^2 / b_i^2}. \quad (2.23)$$

Поэтому корнем уравнения (2.19) с недостатком будет корень уравнения

$$\frac{n^2}{4 \sum (\lambda - c_i)^2 / b_i^2} = \varphi,$$

откуда

$$\lambda_1 = \frac{\sum c_i b_i^2 + \sqrt{D}}{\sum b_i^{-2}}, \quad (2.24)$$

где

$$D = (\sum c_i b_i^{-2})^2 - \sum b_i^{-2} \left(\sum c_i^2 b_i^{-2} - \frac{n^2}{4\varphi} \right).$$

Теперь замечаем, что на множестве (2.21) $dL_e/d\lambda < 0$, поэтому значения λ с недостатком увеличивают значения L_e . Итак, окончательно

$$\sum a_i(b_i + c_i a_i) \leq \frac{1}{4} \sum \frac{b_i^2 (2\lambda_1 - c_i)}{(\lambda_1 - c_i)^2}, \quad (2.25)$$

где λ_1 дается выражением (2.24). Очевидно, последнее неравенство имеет смысл, если $D \geq 0$ и $\lambda_1 > c_n$.

При построении недостижимого неравенства (2.25) было использовано неравенство (2.23), на основе которого была затем найдена оценка снизу $\lambda(\varphi)$. Вместо (2.23) можно взять другое, более простое неравенство

$$\frac{1}{4} \sum \frac{b_i^2}{(\lambda - c_i)^2} \geq \frac{1}{4} \frac{b_n^2}{(\lambda - c_n)^2},$$

откуда оценкой снизу для $\lambda(\varphi)$ будет $\lambda_2 = c_n + 4\varphi / |b_n|$. Таким образом, вместо ранее полученного неравенства (2.25) получаем еще одно:

$$\sum_{i=1}^n a_i(b_i + c_i a_i) \leq \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2(c_n + 8 \sum_{j=1}^n a_j^2 / |b_n| + \delta_i)}{(\delta_i + 4 \sum_{j=1}^n a_j^2 / |b_n|)^2},$$

где $\delta_i = c_n - c_i \geq 0$.

8. Матричные обобщения некоторых классических неравенств. В дальнейшем мы неоднократно будем использовать некоторые матричные неравенства, являющиеся обобщениями некоторых классических неравенств. Займемся обобщением наиболее известного классического неравенства — неравенства Гельдера (2.6), частным случаем которого является неравенство Коши — Буняковского. Обозначим в (2.6) $\theta = 1/p$, тогда оно переписывается как

$$\sum a_i b_i \leq (\sum a_i^{1/\theta})^\theta (\sum b_i^{1/(1-\theta)})^{1-\theta}, \quad 0 < \theta < 1,$$

где не теряя общности можно считать a_i и b_i неотрицательными числами.

Менее известно неравенство для значений θ , лежащих вне интервала $[0, 1]^1$:

$$\sum a_i b_i \geq (\sum a_i^{1/\theta})^\theta (\sum b_i^{1/(1-\theta)})^{1-\theta}, \quad \theta < 0 \text{ или } \theta > 1,$$

где $a_i > 0$, $b_i > 0$, $i = 1, \dots, n$.

Найдем для этих неравенств матричный аналог. Начнем со случая $0 < \theta < 1$. Итак, пусть $a_i \geq 0$, B_i — неотрицательно определенная симметрическая матрица порядка $m \times m$. Тогда утверждаем, что

$$\sum a_i B_i \leq (\sum a_i^{1/\theta})^\theta (\sum B_i^{1/(1-\theta)})^{1-\theta}, \quad 0 < \theta < 1, \quad (2.26)$$

где знак неравенства между двумя симметрическими матрицами, как и ранее, понимаем в том смысле, что разность между правой и левой частями есть неотрицательно определенная матрица.

Доказательство (2.26). Докажем сначала, что

$$a^\theta B^{1-\theta} \leq \theta a I + (1-\theta) B \quad (2.27)$$

для произвольных $a \geq 0$, $0 < \theta < 1$, B — неотрицательно определенная симметрическая матрица $m \times m$. Для диагональной B неравенство следует из "поддиагонального" применения элементарного неравенства $x^\theta \leq 1 + \theta(x - 1)$, где $x \geq 0$. Для любой симметрической матрицы B возможно представление $B = P \Lambda P^T$, где P — ортогональная матрица, Λ — диагональная матрица, составленная из собственных чисел матрицы B , "т" — знак транспонирования. Тогда $B^{1-\theta} = P \Lambda^{1-\theta} P^T$, где $(\Lambda^{1-\theta})_{jj} = \Lambda_{jj}^{1-\theta}$, $j = 1, \dots, m$. Теперь заметим, что $A \leq B$ тогда и только тогда, когда $D^T A D \leq D^T B D$, где D — невырожденная матрица того же порядка. Поэтому домно-

¹⁾ Это неравенство также может быть доказано оптимизационным методом.

жая (2.27) слева на P^T и справа на P , придем к эквивалентному неравенству с диагональной матрицей, что доказывает (2.27).

Положим теперь в (2.27)

$$a = \frac{a_i^{1/\theta}}{\sum_k a_k^{1/\theta}}, \quad B = M^{-1/2} B_i^{1/(1-\theta)} M^{-1/2}, \quad i = 1, \dots, n,$$

где $M = \sum B_i^{1/(1-\theta)}$ – невырожденная матрица, $B_i \geq 0$, $a_i \geq 0$. Суммируя, таким образом, n полученных неравенств и применяя для каждого из них неравенство (2.27), получаем

$$\begin{aligned} & \sum_i \left(\frac{a_i^{1/\theta}}{\sum_k a_k^{1/\theta}} \right)^\theta (M^{-1/2} B_i^{1/(1-\theta)} M^{-1/2})^{1-\theta} \leq \\ & \leq \sum_i \left(\theta \frac{a_i^{1/\theta}}{\sum_k a_k^{1/\theta}} I + (1-\theta) M^{-1/2} B_i^{1/(1-\theta)} M^{-1/2} \right) = \theta I + (1-\theta) I = I. \end{aligned}$$

Но, с другой стороны, левая часть этого неравенства есть

$$\frac{1}{(\sum a_i^{1/\theta})^\theta} M^{-\frac{1}{2(1-\theta)}} \sum a_i B_i M^{-\frac{1}{2(1-\theta)}}.$$

Поэтому, домножая последнее неравенство слева и справа на $M^{\frac{1}{2(1-\theta)}}$, придем к (2.26).

Аналогично доказывается неравенство

$$\sum a_i B_i \geq (\sum a_i^{1/\theta})^\theta (\sum B_i^{1/(1-\theta)})^{1-\theta}, \quad \theta < 0 \text{ или } \theta > 1, \quad (2.28)$$

где $a_i > 0$, B_i – положительно определенная симметрическая матрица, $i = 1, \dots, n$. Для этого сначала необходимо доказать неравенство

$$a^\theta \Lambda^{1-\theta} \geq \theta a I + (1-\theta) \Lambda, \quad \theta < 0 \text{ или } \theta > 1,$$

где Λ – диагональная матрица с положительными элементами на диагонали, $a > 0$. Последнее неравенство есть следствие выпуклости функции x^θ , $x > 0$ при $\theta < 0$ или $\theta > 1$.

Матричные обобщения неравенства Гельдера – неравенства (2.26) и (2.28) – имеют многочисленные следствия. Так, полагая в (2.28) $\theta = 2$, $a_i = 1/n$, получим матричный аналог неравенства между средним арифметическим и средним гармоническим:

$$\frac{1}{n} \sum B_i \geq n (\sum B_i^{-1})^{-1},$$

где B_i – положительно определенная симметрическая матрица, $i = 1, \dots, n$.

Подставляя в (2.26) $B_i = A_i^p$, $1 - \theta = p/q$, $0 < p < q$, $a_i = 1/n$, приходим к неравенству

$$\frac{1}{n} \sum A_i^p \leq \left(\frac{1}{n} \sum A_i^q \right)^{p/q}, \quad 0 < p < q.$$

Возведение в степень с показателем $|r| \leq 1$ является функцией, матрично-монотонной [32, с. 468], поэтому

$$\left(\frac{1}{n} \sum A_i^p\right)^{1/p} \leq \left(\frac{1}{n} \sum A_i^q\right)^{1/q}, \quad 1 \leq p \leq q,$$

– монотонность матричных степенных средних (A_i – неотрицательно определенная симметрическая матрица).

Полагая в (2.26) $\theta = 1/2$, приходим к матричному аналогу неравенства Коши – Буняковского

$$\sum a_i B_i \leq (\sum a_i^2)^{1/2} (\sum B_i^2)^{1/2}, \quad (2.29)$$

которое было доказано ранее (см. лемму 1.1). Известны и другие формы этого неравенства. Так, в [40] доказано неравенство

$$\sum F_i F_i^T \geq \sum F_i G_i^T (\sum G_i G_i^T)^+ \sum G_i F_i^T, \quad (2.30)$$

где F_i и G_i – матрицы соответствующих порядков, $+$ – символ обобщенного обращения матрицы.

Теперь перейдем к неравенствам в условиях линейных ограничений. Итак, пусть a_i, b_i – действительные числа, причем на n чисел a_1, \dots, a_n наложено $m < n$ независимых линейных ограничений, которые в векторной форме запишем как $\sum a_i g_i = 0$, где $g_i \in R^m$. Образует из векторов $\{g_i\}$ матрицу G порядка $n \times m$. По условию $\text{rank } G = m$. Задача стоит в оценивании скалярного произведения (a, b) сверху в терминах евклидовой нормы $\|a\|$, где a и b – вектор-столбцы, составленные соответственно из a_i и b_i . Докажем, что имеет место следующее неравенство:

$$(a, b) \leq \|a\| [b^T (I - G(G^T G)^{-1} G^T) b]^{1/2}, \quad G^T a = 0. \quad (2.31)$$

Действительно, пусть $\lambda \in R^m$, тогда по неравенству Коши – Буняковского

$$(a, b) = (a, b) - (G^T a, \lambda) = (a, b - G\lambda) \leq \|a\| \|b - G\lambda\|.$$

Но нетрудно показать, что

$$\min_{\lambda \in R^m} \|b - G\lambda\| = [b^T (I - G(G^T G)^{-1} G^T) b]^{1/2},$$

откуда и следует (2.31), которое можно назвать обобщением неравенства Коши – Буняковского на случай линейных ограничений. В частном случае, когда g_i – числа, неравенство (2.31) превращается в неравенство (2.17).

Найдем теперь матричное обобщение неравенства (2.31). Итак, пусть B_i – неотрицательно определенная симметрическая матрица $m \times m$, g_i – вектор-столбец $m \times 1$, $\sum a_i g_i = 0$. Как следует из неравенства (2.30), при $G_i = a_i \in R^1$

$$(\sum a_i F_i) (\sum a_i F_i)^T \leq \sum a_i^2 \sum F_i F_i^T.$$

В условиях ограничения $\sum a_i g_i = 0$ для любого $\lambda \in R^m$

$$\begin{aligned} (\sum a_i B_i)^2 &= [\sum a_i (B_i - \lambda g_i^T)] [\sum a_i (B_i - \lambda g_i^T)]^T \leq \\ &\leq \sum a_i^2 \sum (B_i - \lambda g_i^T) (B_i - \lambda g_i^T)^T. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Покажем теперь, что для любого $\lambda \in R^m$

$$\begin{aligned} & \Sigma (B_i - \lambda g_i^T) (B_i - g_i \lambda^T) \geq \\ & \geq \Sigma B_i^2 - (\Sigma \|g_i\|^2)^{-1} \Sigma B_i g_i \Sigma g_i^T B_i, \end{aligned} \quad (2.33)$$

причем неравенство превращается в равенство при $\lambda = \lambda_* = \Sigma B_i g_i / \Sigma \|g_i\|^2$. Действительно, пусть $\nu \in R^m$. Тогда для функции

$$\begin{aligned} P_\nu(\lambda) &= \nu^T \Sigma (B_i - \lambda g_i^T) (B_i - g_i \lambda^T) \nu = \\ &= \Sigma \|B_i \nu - g_i(\lambda, \nu)\|^2 \geq P_\lambda(\lambda_*), \end{aligned}$$

что доказывает (2.33). Окончательно, с учетом (2.32) и (2.33) получаем следующее обобщение неравенства Коши – Буняковского в условиях линейного ограничения:

$$\begin{aligned} (\Sigma a_i B_i)^2 &\leq \|a\|^2 \left[\Sigma B_i^2 - \frac{\Sigma B_i g_i \Sigma g_i^T B_i}{\Sigma \|g_i\|^2} \right], \\ \Sigma a_i g_i &= 0. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Приведенные в этом параграфе неравенства и описанный метод получения числовых неравенств будут в дальнейшем неоднократно нами использоваться для построения аналитических оценок в конкретных нелинейных регрессиях.

§ 3. Примеры вычисления Q_{LC}

Начнем с простых нелинейных регрессий, в которых уровень локальной выпуклости находится достаточно точно. Введем класс полилинейных регрессий, в некотором роде обобщающих параболическую регрессию, рассмотренную ранее. Такие регрессии встречаются, например, в практике эконометрического моделирования. Так, допустим,

$$y_t = (\alpha, x_t) + \epsilon_t, \quad t = 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

– некоторая динамическая линейная регрессия, т.е. t – момент времени. При этом часто отклонения являются автокоррелированными, т.е. не независимыми. Простейшая гипотеза автокорреляции – авторегрессия отклонений первого порядка $\epsilon_t = \rho \epsilon_{t-1} + \xi_t$, где ρ – некоторый неизвестный коэффициент, ξ_1, \dots, ξ_n – некоррелируемые случайные отклонения. Задача заключается в синхронной оценке m параметров α и параметра ρ .

Дарбиным [58] была предложена следующая простая процедура. Вычтем из каждого последующего уравнения регрессии (3.1) предыдущее, домноженное на ρ , получим

$$y_t - \rho y_{t-1} = (\alpha, x_t) - \rho(\alpha, x_{t-1}) + \epsilon_t - \rho \epsilon_{t-1};$$

тогда, очевидно, можно записать

$$y_t = (\alpha, x_t) + \rho y_{t-1} - \rho(\alpha, x_{t-1}) + \xi_t, \quad (3.2)$$

в котором участвующие отклонения являются некоррелируемыми и возможно применение стандартного МНК. Теперь, однако, регрессия (3.2)

будет нелинейной по оцениваемым параметрам; ее перепишем в следующем виде¹⁾:

$$y_i = f_i(\theta) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

где

$$f(\theta) = X\alpha + \rho u - \rho Z\alpha, \quad (3.3)$$

где X — матрица $n \times m$, i -й вектор-строкой которой является x_{i+1}^T , $u \in R^n$, $u_i = y_{i-1}$, Z — матрица $n \times m$, i -й вектор-строкой которой является x_i , $i = 1, \dots, n$. Регрессию вида (3.3) называем *полилинейной*. В такой регрессии при фиксировании одной части параметров другая часть является линейной (ср. с регрессиями с линейной частью — § 5, гл. 1). Характерной особенностью таких регрессий является то, что матрица вторых производных $\partial^2 f / \partial \theta^2$ не зависит от параметров.

Найдем для регрессии (3.3) значение Q_{LC} . Имеем

$$F = \frac{\partial f}{\partial \theta} = [X - \rho Z, u - Z\alpha],$$

$$H_i = \frac{\partial^2 f_i}{\partial \theta^2} = \begin{bmatrix} 0 & -z_i \\ -z_i^T & 0 \end{bmatrix}, \quad \Sigma H_i^2 = \begin{bmatrix} Z^T Z & 0 \\ 0 & \text{tr}(Z^T Z) \end{bmatrix}.$$

Найдем значение Q_{LC} по формуле (1.12). По определению Q_{LC} — такое максимальное число Q , что

$$F^T F - \sqrt{Q} (\Sigma H_i^2)^{1/2} \geq 0, \quad \alpha \in R^m, \quad \rho \in R^1. \quad (3.4)$$

Нормируем неравенство (3.4) следующим образом. Слева и справа домножим его на $(\Sigma H_i^2)^{-1/4}$, тогда

$$\begin{aligned} & (\Sigma H_i^2)^{-1/4} F^T F (\Sigma H_i^2)^{-1/4} - \sqrt{Q} I = \\ & = (F (\Sigma H_i^2)^{-1/4})^T (F (\Sigma H_i^2)^{-1/4}) - \sqrt{Q} I \geq 0. \end{aligned}$$

С учетом того, что

$$(\Sigma H_i^2)^{-1/4} = \begin{bmatrix} (Z^T Z)^{-1/4} & 0 \\ 0 & (\text{tr } Z^T Z)^{-1/4} \end{bmatrix},$$

введем следующие матрицы:

$$X_0 = X(Z^T Z)^{-1/4}, \quad Z_0 = Z(Z^T Z)^{-1/4}, \quad u_0 = \frac{u}{[\text{tr}(Z^T Z)]^{1/4}}.$$

Тогда неравенство (3.4) будет эквивалентно

$$F_0^T F_0 - \sqrt{Q} I \geq 0, \quad (3.5)$$

где

$$F_0 = [X_0 - \rho Z_0; u_0 - Z_0 \alpha].$$

¹⁾ Далее для единообразия индекс t заменен на стандартный индекс i .

Итак, искомое значение Q_{LC} , как следует из (3.5) и теоремы 1.2, равно

$$Q_{LC} = \min_{\theta} \lambda_{\min}^2(F_0^T F_0).$$

Найдем это значение. Пусть $\gamma = (\nu, \beta) \in R^{m+1}$, $\|\gamma\|^2 = \|\nu\|^2 + \beta^2 = 1$. По определению

$$\sqrt{Q_{LC}} = \min_{\nu, \beta, \rho, \alpha} \|(X_0 - \rho Z_0)\nu + (u_0 - Z_0\alpha)\beta\|^2,$$

где минимизация производится по следующему множеству: $\{\alpha \in R^m, \rho \in R^1, \|\nu\|^2 + \beta^2 = 1\}$. Перегруппируем слагаемые следующим образом:

$$\begin{aligned} \sqrt{Q_{LC}} &= \min_{\nu, \beta, \rho, \alpha} \|X_0\nu + u_0\beta - Z_0(\rho\nu + \alpha\beta)\|^2 = \\ &= \min_{\nu, \beta} \min_{\theta} \|X_0\nu + u_0\beta - Z_0\theta\|^2. \end{aligned}$$

Последняя операция редукции пространства параметров возможна, поскольку, как легко заметить, на параметр $\theta = \rho\nu + \alpha\beta$ не накладывается ограничений. Далее введем составную матрицу $W_0 = (X_0, u_0)$. Тогда

$$\sqrt{Q_{LC}} = \min_{\|\gamma\|=1} \min_{\theta \in R^m} \|W_0\gamma - Z_0\theta\|^2.$$

Найдем минимум при фиксированном γ . Легко видеть, что эта задача сводится к линейной регрессии вектора $W_0\gamma$ на Z_0 :

$$\begin{aligned} \min_{\theta} \|W_0\gamma - Z_0\theta\|^2 &= \|W_0\gamma - Z_0\hat{\theta}\|^2 = \\ &= \gamma^T W_0^T (I - Z_0(Z_0^T Z_0)^{-1} Z_0^T) W_0 \gamma = \\ &= \gamma^T [(I - Z_0(Z_0^T Z_0)^{-1} Z_0^T) W_0]^T [(I - Z_0(Z_0^T Z_0)^{-1} Z_0^T) W_0] \gamma = \\ &= \gamma^T \bar{W}_0^T \bar{W}_0 \gamma. \end{aligned}$$

Вектор-столбцы матрицы

$$\bar{W}_0 = (I - Z_0(Z_0^T Z_0)^{-1} Z_0^T) W_0,$$

как можно показать, представляют собой вектор-столбцы отклонений в регрессии i -го вектор-столбца матрицы W_0 на матрицу Z_0 . Таким образом, окончательно можно считать

$$Q_{LC} = \lambda_{\min}^2(\bar{W}_0^T \bar{W}_0). \quad (3.6)$$

Введем теперь еще один достаточно широкий класс нелинейных регрессий. Говорим, что нелинейная регрессия является *связной порядка (m, k)* , если ее функция имеет вид

$$f_i(\alpha) = g_1(\alpha)x_{i1} + \dots + g_k(\alpha)x_{ik}, \quad i = 1, \dots, n,$$

где $\alpha \in R^m$, $g_j(\alpha)$ — действительные непрерывные функции, $j = 1, 2, \dots, k$. Коротко соответствующую регрессию называем (m, k) -связной. В векторном виде (m, k) -связную регрессию можно записать как

$$f(\alpha) = g_1(\alpha)x_1 + \dots + g_k(\alpha)x_k, \quad (3.7)$$

где векторы $x_1, \dots, x_k \in R^n$ называем *несущими векторами*. Не теряя

общности можно считать их линейно независимыми (в противном случае можно линейно зависимые векторы выразить через линейно независимые и редуцировать регрессию). Очевидно, $f(\alpha) \in L(x_1, \dots, x_k)$ — линейное подпространство, натянутое на векторы x_1, \dots, x_k ; этим и объясняется название "несущие". В матричной форме (3.7) представимо как

$$f(\alpha) = Xg(\alpha),$$

где X — матрица $n \times k$ (j -й вектор-столбец есть x_j), $g: R^m \rightarrow R^k$, т.е. $g(\alpha)$ имеет размерность $k \times 1$. По условию считаем матрицу X матрицей полного ранга.

Очевидно, чтобы (m, k) -связная регрессия была идентифицируемой, необходимо, чтобы $k \geq m$, что в дальнейшем и будем предполагать. При $m = k$ (m, k) -связная регрессия сводится к линейной переобозначением $\beta_j = g_j(\alpha)$, $j = 1, \dots, m$ (см. предыдущую главу). Наиболее интересны случаи, когда $k > m$. В частности, самый простой из этого класса вариант $k = m + 1$ будет изучен нами более подробно далее.

Нетрудно доказать, что если в (m, k) -связной регрессии

$$\|g(\alpha)\| \rightarrow \infty, \quad \|\alpha\| \rightarrow \infty, \quad (3.8)$$

то $\bar{Q}_E = \infty$ (предполагаем, что априорное множество параметров $\Lambda = R^m$). Действительно, используя неравенство $\|u - v\| \geq \|u\| - \|v\|$, можно заметить, что

$$\|y - Xg(\alpha)\| \geq \|Xg(\alpha)\| - \|y\|.$$

Но

$$\|Xg(\alpha)\|^2 = g^T(\alpha)X^T Xg(\alpha) \geq \|g(\alpha)\|^2 \lambda_{\min}(X^T X),$$

поэтому в условиях полного ранга матрицы X имеем $\lambda_{\min}(X^T X) > 0$, откуда следует, что $\|Xg(\alpha)\| \rightarrow \infty$ при $\|\alpha\| \rightarrow \infty$, а значит, $\bar{Q}_E = \infty$. Таким образом, в условиях (3.8) нижняя грань $Q(\alpha)$ для (m, k) -связной регрессии достижима на R^m , т.е. оценка МНК существует.

В (m, k) -связной регрессии удобно прибегнуть к переобозначению параметров (см. § 1, гл. 1). Допустим, среди k функций $\{g_j(\alpha), j = 1, \dots, k\}$ найдутся такие, которые отображают R^m на R^m взаимно однозначно.

Пусть ими являются m первых функций. Итак, обозначим

$$\beta_1 = g_1(\alpha), \dots, \beta_m = g_m(\alpha), \quad \alpha \in R^m.$$

В силу однозначности можно определить

$$\alpha = g^{-1}(\beta).$$

Тогда остальные $k - m$ функций g_j могут быть выражены через новые координаты как

$$g_j(\alpha) = g_j(g^{-1}(\beta)) = h_{j-m}(\beta), \quad j = m + 1, \dots, k.$$

Итак, переобозначением параметров (m, k) -связную регрессию (3.7) можно свести к виду

$$f(\beta) = \beta_1 x_1 + \dots + \beta_m x_m + h_1(\beta) x_{m+1} + \dots + h_{k-m}(\beta) x_k, \quad \beta \in R^m. \quad (3.9)$$

Представление (3.9) называем *каноническим*. Название "связная регрессия" объясняем тем, что в регрессии (3.9) на параметры $\theta_1 = \beta_1, \dots, \theta_m = \beta_1, \dots, \theta_{m-1} = h_1(\beta), \dots, \theta_k = h_{k-m}(\beta)$ наложено $k - m$ связей вида $h_j(\tilde{\theta}) = \theta_{j+m}, j = 1, \dots, k - m, \tilde{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_m)$.

Класс (m, k) -связных регрессий весьма широк. Достаточно заметить, что любую нелинейную регрессию можно считать (m, n) -связной. Действительно, обозначим $x_1 = (1, 0, \dots, 0), \dots, x_n = (0, \dots, 0, 1)$ – орт-базис пространства R^n . Тогда

$$f(\alpha) = f_1(\alpha)x_1 + f_2(\alpha)x_2 + \dots + f_n(\alpha)x_n,$$

что и означает (m, n) -связность исходной регрессии. Сложность регрессии можно характеризовать разностью $k - m$: при $k - m = 0$ регрессия сводится к линейной, при $k - m = n - m$ регрессия имеет общий вид.

Остановимся подробнее на наиболее простом случае $k - m = 1$. В каноническом представлении $(m, m + 1)$ -связная регрессия имеет вид

$$f(\alpha) = \alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_m x_m + v(\alpha)z, \quad \alpha \in R^m. \quad (3.10)$$

Будем предполагать, что априорное множество параметров для (3.10) есть $\Lambda = R^m$; несущие векторы $x_1, \dots, x_m, z \in R^n$ считаем линейно независимыми; функция $v(\alpha)$ непрерывна и достаточное число раз дифференцируема.

Прежде всего заметим, что если (m, k) -связная регрессия допускает каноническое представление (3.9), то $\bar{Q}_E = \infty$, поскольку в условиях (3.9)

$$\|g(\beta)\|^2 = \|\beta\|^2 + \|h(\beta)\|^2 \geq \|\beta\|^2 \rightarrow \infty, \quad \|\beta\| \rightarrow \infty.$$

Таким образом, для (3.9) нижняя грань суммы квадратов достигается на R^m (условие (3.8) для нее выполнено).

Найдем для регрессии (3.10) значение Q_{LC} . Нетрудно видеть, что для этой регрессии

$$\frac{\partial f_i}{\partial \alpha} = \kappa_i + z_i q(\alpha), \quad \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha^2} = z_i h(\alpha),$$

где $\kappa_i^T \in R^m$ есть i -я вектор-строка матрицы X , т.е. $\kappa_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im})^T$, $q(\alpha) = \partial v / \partial \alpha \in R^m$, $h(\alpha) = \partial^2 v / \partial \alpha^2$ – симметрическая матрица $m \times m$. Поэтому в ранее принятых обозначениях

$$F^T(\alpha)F(\alpha) = \sum_1^n (\kappa_i + z_i q(\alpha)) (\kappa_i + z_i q(\alpha))^T,$$

$$\Sigma H_i^2(\alpha) = h^2(\alpha) \|z\|^2.$$

Положим $h_+(\alpha) = (h^2(\alpha))^{1/2}$ и заметим, что в данном случае $H_i(\alpha) = z_i h(\alpha)$, поэтому значение (1.12) совпадает с \bar{Q}_{LC} . Как следует из теоремы 1.1, тогда

$$\sqrt{\bar{Q}_{LC}} = \inf_{\alpha} \min_{\nu} \frac{\nu^T \Sigma (\kappa_i + z_i q(\alpha)) (\kappa_i + z_i q(\alpha))^T \nu}{\|z\| \nu^T h_+(\alpha) \nu}.$$

Относительно матрицы $h(\alpha)$ рассмотрим два варианта; будем сначала считать, что

$$h_+(\alpha) \leq U, \quad \alpha \in R^m, \quad (3.11)$$

где U — известная симметрическая положительно определенная матрица $m \times m$. Тогда

$$\nu^T h_+(\alpha) \nu \leq \nu^T U \nu.$$

Покажем далее, что

$$\Sigma (\kappa_i + z_i \gamma) (\kappa_i + z_i \gamma)^T \geq X_z^T X_z, \quad \gamma \in R^m, \quad (3.12)$$

где X_z — матрица, j -я вектор-строка которой представляет собой остатки от регрессии x_j на $z \in R^n$, другими словами,

$$X_z = \left(I - \frac{1}{\|z\|^2} z z^T \right) X.$$

Неравенство (3.12) устанавливается методами линейного регрессионного анализа. Для доказательства сначала найдем минимум по $\gamma \in R^1$ выражения

$$\nu^T \Sigma (\kappa_i + z_i \gamma) (\kappa_i + z_i \gamma)^T \nu = \Sigma [(k_i, \nu) + z_i(\nu, \gamma)]^2$$

при фиксированном $\nu \in R^m$. Этот минимум равен

$$\nu^T X^T \left(I - \frac{1}{\|z\|^2} z z^T \right) X \nu,$$

а это ведет к неравенству (3.12). Итак, с учетом (3.11) и (3.12) получим окончательную оценку снизу величины \bar{Q}_{LC} для $(m, m+1)$ -связной регрессии:

$$\bar{Q}_{LC} \geq \frac{1}{\|z\|^2} \lambda_{\min}^2 (X_z^T X_z U^{-1}) = Q_{LC}. \quad (3.13)$$

Теперь построим оценку снизу для \bar{Q}_{LC} в рамках иного предположения о гессии $h(\alpha)$, а именно предположим, что

$$h_+(\alpha) \leq c q(\alpha) q^T(\alpha), \quad \alpha \in R^m,$$

где $c > 0$ известно. Обозначим $q(\alpha) = \gamma \in R^m$ и найдем

$$\begin{aligned} \min_{\nu, \gamma} \frac{\nu^T \Sigma (\kappa_i + z_i \gamma) (\kappa_i + z_i \gamma) \nu}{(\nu, \gamma)^2} &= \\ &= \min_{\nu} \min_{\theta} \frac{\Sigma ((k_i, \nu) + \theta z_i)^2}{\theta^2} \end{aligned}$$

Элементарными средствами можно показать, что последний минимум по θ при фиксированном ν равен

$$\frac{\Sigma (z_i (k_i, \nu))^2}{\Sigma (k_i, \nu)^2} - \|z\|^2 = \frac{\nu^T X^T Z^2 X \nu}{\nu^T X^T X \nu} - \|z\|^2,$$

где Z — диагональная матрица, $Z_{ii} = z_i, i = 1, \dots, n$; окончательно в усло-

виях принятого предположения можно записать следующую оценку снизу:

$$\bar{Q}_{LC} \geq Q_{LC} = \frac{1}{c^2} \left\{ \frac{1}{\|z\|^2} \lambda_{\min}^2 [X^T Z^2 X (X^T X)^{-1}] - 1 \right\}. \quad (3.14)$$

Рассмотрим теперь некоторые примеры квазилинейных регрессий (см. § 3, гл. 1). Начнем с логлинейных; в этом случае

$$f_i(\alpha) = \exp(\alpha^T x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Легко проверить, что

$$\frac{\partial f_i}{\partial \alpha} = x_i f_i, \quad \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha^2} = x_i x_i^T f_i,$$

где $f_i = f_i(\alpha)$. Регрессию считаем идентифицируемой, что эквивалентно линейной независимости вектор-столбцов матрицы X порядка $n \times m$, вектор-строками которой служат x_i^T .

Для простоты изучим пока случай $m = 1$. Тогда для логлинейной регрессии с одним оцениваемым параметром

$$\bar{Q}_{LC} = \inf_{\alpha} \frac{(\sum x_i^2 e^{2\alpha x_i})^2}{\sum x_i^4 e^{2\alpha x_i}}. \quad (3.15)$$

К сожалению, если x_1, \dots, x_n — последовательность одного знака и на α не наложено ограничений, то $\bar{Q}_{LC} = 0$. Действительно, пусть, не теряя общности, $x_i > 0$, $i = 1, \dots, n$ (наблюдения с нулевыми x_i можно исключить из анализа). Устремим в дроби правой части (3.15) $\alpha \rightarrow -\infty$. Числитель имеет порядок $x_{\min}^4 \exp(4\alpha x_{\min})$, а знаменатель $x_{\min}^4 \exp(2\alpha x_{\min})$, поэтому вся дробь при $\alpha \rightarrow -\infty$ эквивалентна $\exp(2\alpha x_{\min}) \rightarrow 0$. Таким образом, наш анализ, использующий теоремы 1.1 и 1.2 для логлинейной регрессии, оказывается несостоятельным, так как $\bar{Q}_{LC} = 0$. Для этой регрессии, однако, можно несколько модифицировать процедуру нахождения уровня локальной выпуклости, которая уже приведет к положительному результату (другой путь преодоления указанных трудностей описывается в следующем параграфе).

Вернемся опять к многомерному случаю $m \geq 1$. Гессиан для логлинейной модели регрессии равен

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} = 2 X^T D X, \quad (3.16)$$

где X — матрица $n \times m$, i -й вектор-строкой которой является x_i^T ; D — диагональная матрица $n \times n$, ii -й элемент которой есть $\exp(\alpha^T x_i) X \times (2 \exp(\alpha^T x_i) - y_i)$. В [15] предлагается следующий критерий совпадения локального минимума с глобальным. Гессиан логлинейной регрессии, как следует из (3.16), будет положительно определен, если $D_{ii} > 0$, т.е. если

$$2 \exp(\alpha^T x_i) - y_i > 0, \quad i = 1, \dots, n$$

(будем для простоты считать $y_i > 0$). Таким образом, на множестве (многограннике)

$$S = \{\alpha \in R^m: \alpha^T x_i > \ln y_i - \ln 2, \quad i = 1, \dots, n\}$$

сумма квадратов отклонений $Q(\alpha)$ выпукла. Оценим снизу сумму квадратов на дополнении к этому множеству, а именно оценим снизу величину

$$\inf_{\alpha \in S} Q(\alpha).$$

Если $\alpha \in S$, то найдется такое $j \in [1, n]$, для которого

$$\frac{1}{2} y_j - e^{\alpha^T x_j} \geq 0$$

и

$$y_j - e^{\alpha^T x_j} \geq \frac{1}{2} y_j > 0,$$

поэтому

$$(y_j - e^{\alpha^T x_j})^2 \geq \frac{1}{4} y_j^2.$$

Значит, если $\alpha \in S$, то

$$Q(\alpha) = \sum (y_i - \exp(\alpha^T x_i))^2 \geq \frac{1}{4} y_j^2 \geq \frac{1}{4} y_{\min}^2,$$

где $y_{\min}^2 = \min(y_1^2, y_2^2, \dots, y_n^2)$ – квадрат минимального из всех положительных наблюдений. Итак, доказано, что если

$$Q(\alpha) < \frac{1}{4} y_{\min}^2, \quad (3.17)$$

то $\alpha \in S$ и $\partial^2 Q / \partial \alpha^2 > 0$. Помимо того что неравенство (3.17) задает условие положительной определенности гессиана, оно решает основную задачу – проверку совпадения локального минимума с глобальным. А именно, если a – стационарная точка, причем $Q(a) < y_{\min}^2/4$, то a – точка глобального минимума суммы квадратов логлинейной регрессии. Действительно, поскольку S выпукло, то для всех $\alpha \in S$ имеем $Q(\alpha) > Q(a)$, $\alpha \neq a$ в силу выпуклости $Q(\alpha)$. Для всех $\alpha \in S$ по условию $Q(\alpha) \geq y_{\min}^2/4 > Q(a)$. Таким образом, для всех $\alpha \in R^m$

$$Q(\alpha) > Q(a), \quad \alpha \neq a,$$

что и требовалось доказать.

Сейчас оценка (3.17) будет усилена. Для этого выразим диагональные элементы матрицы D через y_i и $e_i = y_i - \exp(\alpha^T x_i)$. Легко проверить, что

$$D_{ii} = y_i^2 - 3e_i y_i + 2e_i^2, \quad i = 1, \dots, n.$$

Найдем в терминах значения $Q(\alpha)$ условие положительной определенности гессиана. Используя ранее введенные обозначения, получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} &= \sum (y_i^2 - 3e_i y_i + 2e_i^2) x_i x_i^T = \\ &= \sum y_i^2 x_i x_i^T - (\sum e_i y_i x_i x_i^T + 2 \sum (y_i - e_i) e_i x_i x_i^T). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Но по матричному аналогу неравенства Коши – Буняковского (2.29)

$$\sum e_i y_i x_i x_i^T \leq (\sum e_i^2)^{1/2} (\sum y_i^2 \|x_i\|^2 x_i x_i^T)^{1/2}. \quad (3.19)$$

Далее замечаем, что $(y_i - e_i)e_i \leq y_i^2/4$, поэтому с учетом (3.19) получим

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \geq A - (\sum e_i^2)^{1/2} B^{1/2} - \frac{1}{2} A = \frac{1}{2} A - (\sum e_i^2)^{1/2} B^{1/2}, \quad (3.20)$$

где

$$A = \sum y_i^2 x_i x_i^T, \quad B = \sum y_i^2 \|x_i\|^2 x_i x_i^T \quad (3.21)$$

– матрицы порядка $m \times m$. Таким образом, как следует из (3.20), для того чтобы $\partial^2 Q/\partial \alpha^2 > 0$, достаточно, чтобы

$$\frac{1}{2} A - (\sum e_i^2)^{1/2} B^{1/2} > 0,$$

т.е.

$$Q_{LC} = \frac{1}{4} \lambda_{\min}^2(AB^{-1/2}). \quad (3.22)$$

Теперь остановимся на другом интересном и достаточно простом классе квазилинейных регрессий – *степенных регрессиях*, т.е. регрессиях, функция которых имеет вид

$$f_i(\alpha) = (\alpha, x_i)^p, \quad p \neq 0. \quad (3.23)$$

В рамках (3.23) будем предполагать, что $x_1, \dots, x_n \in R^m$ линейно независимы и однонаправлены (§ 2, гл. 1). Чтобы задача была корректной, будем считать, что априорное множество параметров есть

$$\Lambda = \{\alpha \in R^m: (x_i, \alpha) > 0, i = 1, \dots, n\}. \quad (3.24)$$

Из однонаправленности следует, что $\Lambda \neq \emptyset$. Таким образом, для (3.23) $g(\xi) = \xi^p$, $\xi > 0$ (см. § 3, гл. 1).

Очевидно, для степенных регрессий

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} = X^T D(\alpha) X,$$

где $D(\alpha)$ – диагональная матрица $n \times n$ с диагональным элементом

$$D_{ii} = p \xi_i^{p-2} ((2p-1) \xi_i^p - (p-1) y_i), \quad (3.25)$$

где для краткости обозначено $\xi_i = (\alpha, x_i) > 0$. Исследование положительной определенности гессiana разбивается на несколько случаев. Самый простой случай $1/2 \leq p < 1$, так как при этом $2p-1 \geq 0$, $p-1 < 0$; поэтому, если $y_i > 0$ (что в рамках степенных регрессий следует считать естественным), то $D_{ii} > 0$. Итак, *если наблюдения y_i положительны, то при $1/2 \leq p \leq 1$ сумма квадратов является выпуклой функцией.*

Исследуем положительную определенность гессiana в других случаях. Это исследование во многом похоже на предыдущий класс регрессий – логлинейные регрессии.

Итак, пусть $0 < p < 1/2$. В этом случае гессиан положительно определен на множестве

$$S = \{\alpha \in R^m : (2p - 1)\xi_i^p - (p - 1)y_i > 0, i = 1, \dots, n\} = \\ = \left\{ \alpha \in R^m : \alpha^T x_i < \left(\frac{1-p}{1-2p} y_i \right)^{1/p}, i = 1, \dots, n \right\}$$

— выпуклый многогранник в R^m . Проведем элементарные преобразования:

$$(2p - 1)\xi_i^p - (p - 1)y_i = py_i - (1 - 2p)(\xi_i^p - y_i).$$

Поэтому $D_{ii} > 0$, если для каждого $i = 1, \dots, n$

$$\xi_i^p - y_i < \frac{p}{1 - 2p} y_i,$$

что влечет

$$(\xi_i^p - y_i)^2 < \left(\frac{p}{1 - 2p} \right)^2 y_i^2.$$

Рассуждая, как и в случае логлинейной регрессии, можно утверждать, что если

$$Q(\alpha) < \left(\frac{p}{1 - 2p} \right)^2 y_{\min}^2, \quad (3.26)$$

где y_{\min} — минимальное наблюдение, то $\partial^2 Q / \partial \alpha^2 > 0$. Больше того, поскольку множество положительной определенности $Q(\alpha)$ выпукло, то если $a \in S$ таково, что $\partial Q(a) / \partial \alpha = 0$ и

$$Q(a) < \left(\frac{p}{1 - 2p} \right)^2 y_{\min}^2, \quad (3.27)$$

то a — точка глобального минимума суммы квадратов.

Точно так же проводится анализ в других ситуациях, когда $p > 1$ или $p < 0$; ответ тот же: на множестве (3.26) $\partial^2 Q / \partial \alpha^2 > 0$, причем если $\partial Q(a) / \partial \alpha = 0$ и имеет место (3.27), то a — точка глобального минимума.

Оценка (3.27) довольно груба. Покажем, как ее улучшить, на примере $p > 2$ (считая $y_i > 0$). Имеем

$$\frac{1}{p} D_{ii} = p \xi_i^{2p-2} - (p - 1)(y_i - \xi_i^p) \xi_i^{p-2}.$$

Выражаем D_{ii} через y_i и $e_i = y_i - \xi_i^p$, т.е. $\xi_i = (y_i - e_i)^{1/p}$:

$$\frac{1}{p} D_{ii} = p(y_i - e_i)^{2 - \frac{2}{p}} - (p - 1)e_i(y_i - e_i)^{1 - \frac{2}{p}}. \quad (3.28)$$

Оценим (3.28) снизу. Сделаем это сначала для первого слагаемого; для

этого применим неравенство $(1-x)^\nu \geq 1-\nu x$ при $x \leq 1, \nu \geq 1$:

$$\begin{aligned} (y_i - e_i)^{2-\frac{2}{p}} &= y_i^{2-\frac{2}{p}} \left(1 - \frac{e_i}{y_i}\right)^{2-\frac{2}{p}} \geq \\ &\geq y_i^{2-\frac{2}{p}} \left(1 - \left(2 - \frac{2}{p}\right) \frac{e_i}{y_i}\right) = y_i^{2-\frac{2}{p}} - \frac{2(p-1)}{p} e_i y_i^{1-\frac{2}{p}}. \end{aligned}$$

Оценим снизу второе слагаемое (3.28); для этого воспользуемся следующим неравенством:

$$\begin{aligned} -(y-x)^\nu x &\geq -\frac{1}{\nu+1} \left(1 - \frac{1}{\nu+1}\right)^\nu y^{\nu+1}, \\ -\infty < x &\leq y, \quad \nu > 0, \quad y > 0. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Доказательство этого неравенства элементарно: рассмотрим функцию действительного переменного

$$\Phi(x) = -(y-x)^\nu x, \quad x \leq y, \quad \nu > 0, \quad y > 0.$$

Имеем $\Phi(0) = \Phi(y) = 0, \Phi(x) > 0$ при $x < 0$;

$$\Phi'_x = (y-x)^{\nu-1}[(\nu+1)x - y],$$

поэтому минимум $\Phi(x)$ достигается при $x = y/(\nu+1)$. Подстановкой этого значения в функцию $\Phi(x)$ и получаем требуемое неравенство.

Итак, применяя (3.29) ко второму слагаемому (3.28), получим

$$-(p-1)e_i(y_i - e_i)^{1-\frac{2}{p}} \geq -\frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2(p-1)}\right)^{\frac{p-2}{p}} \frac{2(p-1)}{y_i^{\frac{2}{p}}}$$

Собирая воедино обе оценки снизу, получим оценку снизу выражения (3.28):

$$\begin{aligned} \frac{1}{p} D_{ii} &\geq p y_i^{2-\frac{2}{p}} - \frac{2(p-1)}{p} e_i y_i^{1-\frac{2}{p}} - \frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2(p-1)}\right)^{\frac{p-2}{p}} \frac{2(p-1)}{y_i^{\frac{2}{p}}} = \\ &= R y_i^{2-\frac{2}{p}} - \left(2 - \frac{2}{p}\right) e_i y_i^{1-\frac{2}{p}}, \end{aligned}$$

где

$$R = R(p) = p \left(1 - 4 \frac{1-p}{p} \left(\frac{p-2}{p-1}\right)^{\frac{p-2}{p}}\right). \quad (3.30)$$

Тогда

$$\frac{1}{2p} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \geq R \sum y_i^{2-\frac{2}{p}} x_i x_i^T - \left(2 - \frac{2}{p}\right) \sum y_i^{1-\frac{2}{p}} e_i x_i x_i^T.$$

Ко второму слагаемому применяем матричный аналог неравенства Коши -- Буняковского (2.29)

$$\begin{aligned} \sum y_i^{1-\frac{2}{p}} e_i x_i x_i^T &\leq \\ &\leq (\sum e_i^2)^{1/2} (\sum y_i^{\frac{2(p-2)}{p}} \|x_i\|^2 x_i x_i^T)^{1/2}, \end{aligned}$$

откуда следует, что гессиан будет положительно определен, если

$$Q(\alpha) < Q_{LC} = \lambda_{\min}^2(AB^{-1/2}),$$

где

$$A = R \sum y_i^{\frac{2(p-1)}{p}} x_i x_i^T, \quad B = \frac{4(p-1)^2}{p^2} \sum y_i^{\frac{2(p-2)}{p}} \|x_i\|^2 x_i x_i^T.$$

Итак, в случае степенной регрессии (3.23) при $p > 2$ и $y_i > 0$ для всех $\alpha \in \Lambda$ таких, что $Q(\alpha) < Q_{LC}$, гессиан $\partial^2 Q / \partial \alpha^2$ положительно определен.

§ 4. Сужение априорного множества параметров

В предыдущем параграфе на примере логлинейной функции было показано, что значение \bar{Q}_{LC} может оказаться равным нулю, и поэтому предлагаемый подход становится недееспособным. Можно ли преодолеть это препятствие, может быть, имеет смысл сузить априорное множество параметров, удалив из него те множества, которые заведомо не содержат стационарных точек? Поставленную задачу и решает описываемый в этом параграфе метод.

Напомним, что нашей основной целью является построение критериев проверки совпадения локального минимума суммы квадратов с глобальным. В этой связи, просматривая все априорное множество параметров, исключим из него те точки, в которых заведомо не может существовать локального минимума, а более строго, -- стационарной точки. Естественно, если не привлекать дополнительных сведений о функции регрессии, то сокращение априорного множества параметров в принятом выше смысле невозможно. Здесь предлагается информацию о регрессии использовать в виде ее направленности. Начнем со случая одномерного параметра $\alpha \in \Lambda \subset R^1$, где Λ -- исходное выпуклое множество параметров.

Определение. Говорим, что функция регрессии $f(\alpha) \subset R^n$ имеет конус направлений¹⁾ K , если

$$f(\alpha) \in K \quad \forall \alpha \in \Lambda, \tag{4.1}$$

где K -- конус в R^n . Минимальным конусом направлений называем конус, натянутый на множество $\{f(\alpha), \alpha \in \Lambda\}$.

¹⁾ Ср. с определением конуса принадлежности (§ 1, гл. 2).

Предполагаем, что конус направлений является заостренным.

В дальнейшем мы не раз будем характеризовать регрессию своим конусом направлений. Для линейных регрессий и регрессий, сводящихся к линейным (см. предыдущую главу), минимальным конусом направлений будет луч ($m = 1$). Действительно, регрессия с одним оцениваемым параметром, сводящаяся к линейной, имеет вид

$$f_i(\alpha) = g(\alpha)x_i + z_i, \quad \alpha \in R^1,$$

поэтому конус направлений есть $K = \{y \in R^n: y = \lambda g'(\alpha)x, \lambda \geq 0\}$. Конус направлений – одна из важнейших качественных характеристик нелинейной регрессии. Выпишем градиент суммы квадратов в одномерном случае:

$$\frac{1}{2} Q'(\alpha) = (e(\alpha), f(\alpha)),$$

где $e(\alpha) = f(\alpha) - y \in R^n$. Обращаясь к § 2 гл. 1, можно утверждать, что если $e(\alpha) \in K^+$ – положительно сопряженный открытый конус, то $Q'(\alpha) > 0$; если $e(\alpha) \in K^-$ – отрицательно сопряженный открытый конус, то $Q'(\alpha) < 0$. Из условия заостренности конуса следует, что $K^- \neq \phi$, $K^+ \neq \phi$. Итак, в пространстве наблюдений в условиях (4.1) можно выделить два множества, на которых $Q'(\alpha) \neq 0$. Другими словами, если

$$f(\alpha) \in y + K^+ \quad \text{или} \quad f(\alpha) \in y + K^-, \quad (4.2)$$

то для соответствующего $\alpha \in \Lambda$ и $y \in R^n$ имеем $Q'(\alpha) \neq 0$. Из условий (4.2) для данного y уже нетрудно определить ту часть $\Lambda' \subset \Lambda$, для которой $Q'(\alpha) \neq 0$: $\alpha \in \Lambda'$ – суженное априорное множество параметров.

Описанный прием сформулируем в виде теоремы.

Теорема 4.1. Пусть $m = 1$, а конус направлений регрессии K заострен. Тогда для всех $\alpha \in \Lambda' \subset \Lambda$, для которых имеет место (4.2), где K^- и K^+ – соответственно открытый отрицательно и положительно сопряженные конусы, имеем $Q'(\alpha) \neq 0$.

Предлагаемый метод продемонстрируем на примере логлинейной регрессии

$$f_i(\alpha) = e^{\alpha x_i}, \quad i = 1, \dots, n, \quad \alpha \in (-\infty, \infty).$$

Будем считать x_i положительными (для отрицательных x_i исследование проводится аналогично). Как было отмечено, при этом значение (3.15) равно нулю. Сузим априорное множество параметров, выделив в нем те точки α , для которых заведомо $Q'(\alpha) \neq 0$. Вектор производной этой регрессии равен

$$\dot{f}(\alpha) = (x_1 e^{\alpha x_1}, x_2 e^{\alpha x_2}, \dots, x_n e^{\alpha x_n}).$$

Сразу замечаем, что $\dot{f}_i(\alpha) > 0$, поскольку $x_i > 0$, $i = 1, \dots, n$. Другими словами, $f(\alpha)$ имеет конус направлений $R_+^n = \{z: z_i \geq 0\}$. Замечаем, что конусом, отрицательно сопряженным к R_+^n , будет $R_-^n = \{z: z_i < 0\}$;

конусом, положительно сопряженным к R_+^n , будет сам конус R_+^n . Отсюда заключаем, что если $y - f(\alpha) \in R_+^n$, то $Q'(\alpha) < 0$; если $y - f(\alpha) \in R_-^n$, то $Q'(\alpha) > 0$, где $f_i = e^{\alpha x_i}$. Будем сначала считать, что $y_i > 0, i = 1, \dots, n$. Тогда первое условие означает

$$y_i - \exp(\alpha x_i) > 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

второе

$$y_i - \exp(\alpha x_i) < 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

откуда следует, что если

$$\alpha < \min_i \frac{\ln y_i}{x_i} = a, \quad \text{либо} \quad \alpha > \max_i \frac{\ln y_i}{x_i} = b, \quad (4.3)$$

то $Q'(\alpha) \neq 0$. Таким образом, при $y_i > 0, x_i > 0, i = 1, \dots, n$, в логлинейной регрессии с одним оцениваемым параметром суженным априорным множеством параметров можно считать $\Lambda' = [a, b]$, где a и b задаются выражениями (4.3). Если $\alpha \in \Lambda'$, то $Q'(\alpha) = 0$. Таким образом, минимум $Q(\alpha)$ лежит в Λ' .

Рассмотрим теперь случай, когда некоторые из наблюдений y_i неположительны; так, допустим, что $y_i \leq 0, i = 1, \dots, k \leq n$. Тогда условие $y - f(\alpha) \in R_+^n$ не выполнимо (т.е. при этом всегда $Q'(\alpha) \geq 0$). Условие $y - f(\alpha) \in R_-^n$ ведет к системе неравенств $y_i - \exp(\alpha x_i) < 0, i > k$, откуда следует, что если

$$\alpha > \max_{i > k} \frac{\ln y_i}{x_i} = c,$$

то $Q'(\alpha) > 0$. Итак, в условиях неположительных наблюдений ($x_i > 0$) суженное априорное множество параметров есть $\Lambda' = (c, \infty)$. Заметим, что если $k = n$, то $Q'(\alpha) > 0$ для всех $-\infty < \alpha < \infty$; в этом случае нижняя грань $Q(\alpha)$ не достигается, т.е. оценка МНК не существует.

Как использовать суженное априорное множество параметров? Если оно ограничено (как в случае логлинейной регрессии при $x_i > 0, y_i > 0$), то методами перебора, деления пополам или методом хорд можно легко найти корень уравнения $Q'(\alpha) = 0$. Ограниченность Λ' приводит, в частности, к тому, что $\bar{Q}_{LC} > 0$ на Λ' .

Продолжим рассмотрение логлинейной регрессии с $x_i > 0$. Как следует из предыдущего параграфа, $\bar{Q}_{LC} = 0$ при $\alpha \in (-\infty, \infty)$. Найдем нетривиальную оценку снизу для \bar{Q}_{LC} на $\Lambda' = [a, b]$ (будем считать $y_i > 0$); напомним, что для логлинейной регрессии

$$\bar{Q}_{LC} = \inf_{\alpha \in \Lambda} \frac{(\sum x_i^2 e^{2\alpha x_i})^2}{\sum x_i^4 e^{2\alpha x_i}}.$$

Используя выпуклость \exp , по неравенству Иенсена получаем

$$\sum x_i^2 e^{2\alpha x_i} \geq \sum x_i^2 \exp\left(2\alpha \frac{\sum x_i^3}{\sum x_i^2}\right),$$

поэтому

$$\bar{Q}_{LC} \geq \inf(\sum x_i^2)^2 T^{-1}(\alpha),$$

где

$$T(\alpha) = \sum x_i^4 \exp\left(2\alpha \left(x_i - \frac{2 \sum x_i^3}{\sum x_i^2}\right)\right).$$

Будем считать наблюдения ранжированными по возрастанию x_i ; таким образом, $0 < x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. Рассмотрим два случая:

1) $x_n \leq 2 \sum x_i^3 / \sum x_i^2$, тогда $T(\alpha)$ – убывающая функция, поэтому для $\alpha \in \Lambda' = [a, b]$ имеем $T(\alpha) \leq T(a)$;

2) $x_n > 2 \sum x_i^3 / \sum x_i^2$; пусть $1 < k < n$ такое, что $x_j < 2 \sum x_i^3 / \sum x_i^2$ для $j \leq k$, но $x_j \geq 2 \sum x_i^3 / \sum x_i^2$ для $j > k$; тогда замечаем, что $T(\alpha)$ – выпуклая функция, поэтому

$$T(\alpha) \leq \max(T(a), T(b)), \alpha \in [a, b].$$

Оценки сверху для функции $T(\alpha)$ естественным образом приводят к оценкам снизу для \bar{Q}_{LC} на $\Lambda' = [a, b]$.

Теперь разберем случай, когда последовательность x_1, \dots, x_n имеет разные знаки. Допустим, что $x_i \leq 0$, $1 \leq i \leq k$, $x_i \geq 0$, $i > k$. Тут же заметим, что значения $x_i = 0$ можно исключить из анализа, так как соответствующие члены в сумме

$$2 \sum (e^{\alpha x_i} - y_i) x_i e^{\alpha x_i} = Q'(\alpha)$$

равны нулю. Очевидно, $Q' > 0$, если выполнены следующие n неравенств:

$$e^{\alpha x_i} - y_i < 0, \quad i \leq k,$$

$$e^{\alpha x_i} - y_i > 0, \quad i > k,$$

откуда следует, что на интервале $(b, +\infty)$, где

$$b = \max\left(\max_{i \leq k} \frac{\ln y_i}{x_i}, \max_{i > k} \frac{\ln y_i}{x_i}\right) = \max_i \frac{\ln y_i}{x_i},$$

$Q'(\alpha) > 0$. Аналогично можно показать, что на интервале $(-\infty, a)$, где

$$a = \min_i \frac{\ln y_i}{x_i},$$

$Q'(\alpha) < 0$. Таким образом, как и ранее, суженное априорное множество есть $[a, b]$.

Анализ, проведенный для логлинейной регрессии, очевидным образом обобщается на случай квазилинейной одномерной регрессии $f_i(\alpha) = g(\alpha x_i)$, где g — строго монотонная функция. Допустим для простоты, что y_i принадлежат области значений g , тогда суженным априорным множеством будет

$$\Lambda' = \left[\min_i \frac{g^{-1}(y_i)}{x_i}, \max_i \frac{g^{-1}(y_i)}{x_i} \right].$$

Выше было продемонстрировано, как для редукции априорного множества можно использовать знание "о знаках вектора производной регрессии". Большого сжатия этого множества можно добиться, привлекая другие, дополнительные сведения о регрессии, т.е. "заужая" конус направлений \dot{K} (4.1). Покажем, как это можно сделать, привлекая монотонность или (и) выпуклость (вогнутость) функций $\{f_i(\alpha), i = 1, \dots, n\}$.

Определение. Пусть $\{\psi_i(\alpha), i = 1, \dots, n\}$ — система функций, $\alpha \in \Lambda \subset R^m$. Говорим, что эта система является *монотонной по первому порядку*, если существует такая перестановка $\{1, \dots, n\}$ (т.е. такой порядок), что для некоторых чисел $r_1, r_2, \dots, r_n \in R^1$

$$r_{i+1}\psi_{i+1}(\alpha) - r_i\psi_i(\alpha) \geq 0, \quad i = 1, \dots, n-1, \quad (4.4)$$

равномерно по $\alpha \in \Lambda$. Говорим, что система функций является *монотонной по второму порядку*, если

$$r_{i+1}\psi_{i+1}(\alpha) + r_{i-1}\psi_{i-1}(\alpha) - r_i\psi_i(\alpha) \geq 0, \quad 1 < i < n,$$

равномерно по $\alpha \in \Lambda$.

Рассмотрим частный случай (4.4), когда $r_i = \text{const}$. Тогда при $r_i > 0$ перенумерацией функций можно добиться того, чтобы

$$\psi_{i+1}(\alpha) \geq \psi_i(\alpha), \quad \alpha \in \Lambda.$$

Будем в дальнейшем под $\psi_i(\alpha)$ понимать $\dot{f}_i(\alpha)$; тогда предыдущее неравенство переписется как

$$\dot{f}_{i+1}(\alpha) \geq \dot{f}_i(\alpha), \quad \alpha \in \Lambda, \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (4.5)$$

Покажем для этого случая, как использовать это свойство монотонности для сужения априорного множества параметров.

Соответствующий конус направлений регрессии тогда задается системой $n-1$ линейных неравенств:

$$K = \{u \in R^n: u_{i+1} - u_i \geq 0, i = 1, \dots, n-1\}.$$

Строим для этого конуса пару конусов: положительно сопряженный конус K^+ и отрицательно сопряженный K^- . Область в пространстве параметров, в которой $Q'(\alpha) \neq 0$, задается условиями (4.2).

Проиллюстрируем, как использовать подобные свойства функции регрессии на примере логлинейной регрессии при условии $y_i > 0, x_i > 0$. Будем пока считать, что $\alpha > 0$. Докажем тогда, что система производных этой регрессии является возрастающей по первому порядку. Перенумеруем наблюдения в порядке возрастания x_i . Рассмотрим функцию действительного переменного

$$S(x) = xe^{\alpha x}, \quad x \in (0, \infty), \quad (4.6)$$

где $\alpha > 0$ фиксировано. Заметим при этом, что $\dot{f}_i(\alpha) = S(x_i)$. Нетрудно проверить, что эта функция является возрастающей. Поэтому при $x_{i+1} \geq x_i$

$$x_{i+1}e^{\alpha x_{i+1}} \geq x_i e^{\alpha x_i}, \quad i = 1, \dots, n-1.$$

С учетом того, что $\dot{f}_1(\alpha) = x_1 e^{\alpha x_1} \geq 0$, конус направлений для логлинейной регрессии может быть описан как

$$K = \{u \in R^n: u_1 \geq 0, u_{i+1} - u_i \geq 0, i = 1, \dots, n-1\}. \quad (4.7)$$

Открытым положительно сопряженным конусом к (4.7), как следует из § 2, гл. 1, будет конус, задаваемый системой n неравенств

$$u_1 + \dots + u_n > 0, \quad u_2 + \dots + u_n > 0, \quad \dots, \quad u_n > 0.$$

Из (4.2) следует, что если для $\alpha \in R^1$ имеет место n неравенств

$$\sum_{j=i}^n f_j(\alpha) > \sum_{j=i}^n y_j, \quad i = 1, \dots, n,$$

то для этого α $Q'(\alpha) \neq 0$. Для логлинейной регрессии предыдущая система неравенств переписывается следующим образом:

$$\begin{aligned}
 e^{\alpha x_1} + \dots + e^{\alpha x_n} &> y_1 + \dots + y_n, \\
 e^{\alpha x_2} + \dots + e^{\alpha x_n} &> y_2 + \dots + y_n, \\
 &\dots \\
 e^{\alpha x_n} &> y_n.
 \end{aligned} \quad (4.8)$$

Требуется найти (по возможности минимальное) значение α , при котором система (4.8) имеет место. Аналитически решить эту задачу невозможно. Можно предложить следующую итеративную процедуру нахождения этого значения α .

Возьмем сначала от обеих частей системы (4.8) логарифм ("выпрямляем" экспоненту), обозначим

$$p_i(\alpha) = \ln \left(\sum_{j=i}^n e^{\alpha x_j} \right), \quad l_i = \ln \left(\sum_{j=i}^n y_j \right).$$

Функции $p_i(\alpha)$ являются возрастающими и выпуклыми, так как

$$p'_i(\alpha) = \frac{\sum_{j \geq i} x_j e^{\alpha x_j}}{\sum_{j \geq i} e^{\alpha x_j}},$$

$$p''_i(\alpha) = \frac{\left(\sum_{j \geq i} x_j^2 e^{\alpha x_j} \right) \left(\sum_{j \geq i} e^{\alpha x_j} \right) - \left(\sum_{j \geq i} x_j e^{\alpha x_j} \right)^2}{\left(\sum_{j \geq i} e^{\alpha x_j} \right)^2}.$$

Но по неравенству Коши – Буняковского

$$\left(\sum_{j \geq i} x_j e^{\alpha x_j} \right)^2 < \sum_{j \geq i} x_j^2 e^{\alpha x_j} \sum_{j \geq i} e^{\alpha x_j},$$

откуда следует $p''_i(\alpha) \geq 0, i = 1, \dots, n, \alpha \in (-\infty, \infty)$.

Рассмотрим последнее неравенство системы (4.8). Понятно, что при $\alpha \in (a_n, \infty)$, где $a_n = \ln y_n/x_n$, последнее неравенство будет иметь место. Посмотрим, будет ли на этом интервале иметь место предпоследнее неравенство. Если $p_{n-1}(a_n) \geq l_{n-1}$, то полагаем $a_{n-1} = a_n$ и переходим к следующему неравенству. Допустим теперь, что $p_{n-1}(a_n) < l_{n-1}$. Будем решать уравнение

$$p_{n-1}(\alpha) = l_{n-1} \tag{4.9}$$

по методу Ньютона (метод касательных), в качестве начального приближения беря приближение по недостатку $\bar{\alpha} = a_{n-1}$. Обозначим точное решение (4.9) через a_{n-1}^* . Первая итерация по методу касательных приводит к уравнению ($i = n - 1$)

$$(\alpha - a_n) \frac{\sum_{j \geq i} x_j e^{a_n x_j}}{\sum_{j \geq i} e^{a_n x_j}} = l_i - p_i(a_{n-1}).$$

Корень α этого уравнения является оценкой сверху для a_{n-1}^* . Дальнейшие итерации по методу касательных решения уравнения (4.9) приводят к монотонно убывающим значениям с избытком. В принципе можно ограни-

читься и первой итерацией. Итак, в качестве a_{n-1} возьмем приближенное значение корня (4.9) с избытком. Процесс повторяется для следующих неравенств системы (4.8). Окончательно в качестве верхней границы α берем a_1 . По условию на интервале (a_1, ∞) имеем $Q'(\alpha) > 0$. Построением отрицательно сопряженного конуса к (4.7) можно найти интервал $(-\infty, b_1)$, в котором $Q'(\alpha) < 0$ для логлинейной регрессии. Очевидно, b_1 совпадает с верхней границей тех значений α , для которых имеют место n неравенств

$$\sum_{j \geq i} e^{\alpha x_j} < \sum_{j \geq i} y_j, \quad i = 1, \dots, n.$$

Точное значение b_1 (вернее, с любой степенью точности) находится тем же способом, что и ранее. Теперь итерации метода касательных приводят к приближениям с избытком.

В решении (4.8) можно ограничиться приближенным методом. Воспользуемся для этого выпуклостью функции \exp ; тогда

$$\sum_{j=i}^n e^{\alpha x_j} \geq (n-i+1)e^{\alpha \bar{x}_i}, \quad \bar{x}_i = \frac{\sum_{j=i}^n x_j}{n-i+1}.$$

Отсюда следует, что, полагая

$$\bar{a} = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{\ln \bar{y}_i}{\bar{x}_i},$$

где $\bar{y}_i = \sum_{j \geq i} y_j / (n-i+1)$, на интервале (\bar{a}, ∞) для логлинейной модели будем иметь $Q'(\alpha) > 0$.

Выше было продемонстрировано, как для логлинейной модели можно использовать монотонность производных при $r_i = \text{const}$ (см. (4.4)). Вместо (4.5) можно рассмотреть другую систему неравенств:

$$x_i \dot{f}_{i+1}(\alpha) \geq x_{i+1} \dot{f}_i(\alpha), \quad \alpha \in \Lambda, \quad i = 1, \dots, n-1; \quad (4.10)$$

по-прежнему считаем $0 < x_1 \leq \dots \leq x_n$, что приведет нас к другим отрицательно и положительно сопряженным конусам.

К системе неравенств (4.5) или (4.10) можно присовокупить условие монотонности $\{f_i(\alpha), i = 1, \dots, n\}$ по второму порядку. Последнее следует из выпуклости функции (4.6), поскольку

$$\begin{aligned} S(x_i) &= S \left[\frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} x_{i-1} + \left(1 - \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right) x_{i+1} \right] \leq \\ &\leq \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_{i-1}} S(x_{i-1}) + \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} S(x_{i+1}), \end{aligned}$$

откуда

$$(x_i - x_{i-1})S(x_{i+1}) + (x_{i+1} - x_i)S(x_{i-1}) - (x_{i+1} - x_{i-1})S(x_i) \geq 0,$$

или

$$(x_i - x_{i-1})x_{i+1}\dot{f}_{i+1}(\alpha) + (x_{i+1} - x_i)x_{i-1}\dot{f}_{i-1}(\alpha) - \\ - (x_{i+1} - x_{i-1})x_i\dot{f}_i(\alpha) \geq 0, \quad \alpha \in R^1, \quad i = 2, \dots, n-1.$$

В принципе возможно привлечение разного рода информации о поведении $\dot{f}_i(\alpha)$ в совокупности (равномерно по α). Критерием здесь является простота учета этой информации в плане решения соответствующей системы неравенств относительно α , т.е. в плане построения суженного априорного множества параметров.

Перейдем теперь к многомерному случаю. Тогда

$$\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha} = \sum_1^n (f_i(\alpha) - y_i) \frac{\partial f_i(\alpha)}{\partial \alpha}. \quad (4.11)$$

Заметим прежде всего, что $\partial Q/\partial \alpha \neq 0$ тогда и только тогда, когда $(\partial Q/\partial \alpha, \nu) \neq 0$ для некоторого $\nu \in R^m$. Таким образом, задачу отыскания подмножеств $\Lambda \subset R^m$, в которых $\partial Q/\partial \alpha \neq 0$, можно в некотором смысле свести к одномерной, рассматривая скалярное произведение (4.11) с $\nu \in R^m$:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial Q}{\partial \alpha}, \nu \right) = \sum_1^n (f_i(\alpha) - y_i) g_i(\alpha; \nu),$$

где $g_i(\alpha; \nu) = (\partial f_i(\alpha)/\partial \alpha, \nu)$, или в векторной форме

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial Q}{\partial \alpha}, \nu \right) = (f(\alpha) - y, g(\alpha; \nu)).$$

Фиксируем $\nu \in R^m$, пусть $K(\nu)$ — конус, содержащий множество $\{g(\alpha, \nu), \alpha \in \Lambda\}$. Тогда, рассуждая, как и в одномерном случае, можно утверждать, что если

$$f(\alpha) - y \in K^+(\nu) \quad \text{или} \quad f(\alpha) - y \in K^-(\nu), \quad (4.12)$$

то $\partial Q/\partial \alpha \neq 0$. Эти включения приводят к сужению априорного множества параметров $\Lambda'(\nu) \subset \Lambda$. Очевидно, полное сужение есть

$$\Lambda' = \bigcap_{\nu \neq 0} \Lambda'(\nu).$$

На практике основную сложность представляет перевод информации с языка включений (4.12) на язык соответствующего суженного множества $\Lambda'(\nu)$. Иногда перебор ν можно ограничить, исходя из целей построения суженного априорного множества или упрощения задачи.

Проиллюстрируем построение суженного априорного множества параметров в многомерном случае на примере логлинейной регрессии $f_i(\alpha) = \exp(\alpha^T x_i)$, $\alpha \in R^m$. Иногда суженное априорное множество удобно характеризовать своим центром и длиной отрезка, исходящего из этого центра по всем направлениям $\nu \in R^m$. Итак, пусть $a_0 \in R^m$ — центр суженного априорного множества Λ' . В качестве a_0 в квазилинейных регрессиях можно брать оценку МНК линеаризованной регрессии $g^{-1}(y_i) = (\alpha, x_i) + \epsilon_i$. Выберем произвольное направление $\tau \in R^m$, $\|\tau\| = 1$ и построим луч

$\alpha(\lambda) = a_0 + \lambda\tau$. Найдем на этом луче крайние значения $\lambda_1(\tau)$ и $\lambda_2(\tau)$, при которых на интервалах $(-\infty, \lambda_1(\tau))$ и $(\lambda_2(\tau), \infty)$ градиент $g(a_0 + \lambda\tau) \neq 0$, где $g(\alpha) = \partial Q/\partial \alpha$. Для нашего примера

$$\frac{1}{2} g(a_0 + \lambda\tau) = \sum_{i=1}^n (e^{(a_0, x_i) + \lambda(\tau, x_i)} - y_i) x_i e^{(\alpha, x_i)}.$$

Крайние значения $\lambda_1(\tau)$ и $\lambda_2(\tau)$ в принципе надо находить из условия

$$(\nu, g(a_0 + \lambda\tau)) \neq 0 \quad (4.13)$$

по всем $\nu \in R^m$. Для простоты в (4.13) положим $\nu = \tau$. Тогда

$$\frac{1}{2} (\tau, g(a_0 + \lambda\tau)) = \sum_1^n (e^{(a_0, x_i) + \lambda(\tau, x_i)} - y_i)(\tau, x_i) e^{(\alpha, x_i)}.$$

Обозначая в предыдущем равенстве $(\tau, x_i) = z_i$, приходим к одномерной логлинейной модели, откуда, принимая во внимание проведенное ранее исследование, получаем

$$\begin{aligned} \lambda_1(\tau) &= \min_{i: (\tau, x_i) \neq 0} \frac{\ln y_i - (a_0, x_i)}{(\tau, x_i)}, \\ \lambda_2(\tau) &= \max_{i: (\tau, x_i) \neq 0} \frac{\ln y_i - (a_0, x_i)}{(\tau, x_i)}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Таким образом, суженное априорное множество равно

$$\Lambda' = \{\alpha \in R^m : \alpha = a_0 + \lambda\tau, \lambda_1(\tau) \leq \lambda \leq \lambda_2(\tau), \tau \in R^m\},$$

где значения $\lambda_1(\tau)$ и $\lambda_2(\tau)$ задаются выражениями (4.14).

КРИТЕРИИ ОДНОСТАЦИОНАРНОСТИ И ВЫПУКЛОСТИ

В предыдущей главе было определено такое значение уровня суммы квадратов \bar{Q}_{LC} , что для всех точек $\alpha \in R^m$ таких, что $Q(\alpha) < \bar{Q}_{LC}$, гессиан $\partial^2 Q(\alpha)/\partial \alpha^2$ становился положительно определенным. В этой главе развивается предлагаемый подход: для суммы квадратов находятся такие значения уровня, которые приводят к локальной одностационарности и выпуклости $Q(\alpha)$. Часть результатов, основанных на идеях дифференциальной геометрии, была получена автором еще в 1977 г. [14], позже было найдено алгебраическое доказательство и обобщение на многомерный случай. При этом "геометрия" стала хорошей и наглядной иллюстрацией.

§ 1. Критерий локальной одностационарности

Прежде всего сделаем несколько замечаний относительно структуры множества уровня

$$S(F^*) = \{x \in R^m : F(x) \leq F^*\}$$

некоторой ограниченной снизу непрерывной функции $F(x)$. Это множество, вообще говоря, несвязно. Если $x_0 \in S(F^*)$, т.е. $F(x_0) \leq F^*$, то можно говорить о компоненте $K(x_0; S(F^*))$ как о "максимальном" связном множестве, содержащемся в $S(F^*)$ и содержащем x_0 . Множество $S(F^*)$ может быть представлено в виде объединения своих компонент. Одна компонента не содержит предельных точек другой (и поэтому компоненты не пересекаются; соответствующие доказательства и подробности можно найти, например, в [3]). Заметим, что для непрерывной функции F компонента множества $S(F^*)$ замкнута.

Этот параграф начнем с доказательства одного результата, в котором многоэкстремальность связывается со строением множества уровня.

Лемма 1.1. Пусть $F(x)$ — непрерывная функция $x \in R^m$. Если эта функция имеет несколько строгих локальных минимумов, то существует F^* такое, для которого множество этого уровня несвязно. Обратно, если для некоторого F^* это множество несвязно и ограничено, то $F(x)$ имеет несколько локальных минимумов в R^m .

Доказательство. Пусть x_1 и x_2 — точки строгих локальных минимумов $F(x)$; для определенности будем считать $F(x_1) \geq F(x_2)$. Положим

$F^* = F(x_1)$ и докажем, что множество $S(F^*)$ несвязно. Для этого достаточно показать, что x_2 не является предельной точкой $K(x_1; S(F^*))$. Это действительно так, поскольку в противном случае x_1 вследствие непрерывности F не была бы точкой строгого локального минимума.

Докажем теперь обратное утверждение. Пусть F^* таково, что $S(F^*)$ несвязно и ограничено. Выберем две компоненты этого множества S_1 и S_2 . Таким образом, $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. Пусть x_1 и x_2 — соответствующие точки минимумов функции $F(x)$ на них. Очевидно, $x_1 \neq x_2$, причем каждая из этих точек дает локальный минимум $F(x)$ на R^m . Лемма полностью доказана.

Как следует из леммы 1.1, для того чтобы $F(x)$ была одноэкстремальна, достаточно, чтобы каждое множество уровня было связно.

Доказываемый ниже результат следует из теории Морса [42], однако его фундаментальность требует того, чтобы его доказательство было по возможности наиболее доступным. В частности, этот результат будет существенно нами использоваться при построении критериев глобальности. Похожий результат был получен в [13].

Лемма 1.2 (принцип перевала). Пусть $F(x)$ — дифференцируемая функция на R^m . Допустим, существует такой уровень $\bar{F} < \infty$, для которого множество уровня

$$S(\bar{F}) = \{x \in R^m : F(x) \leq \bar{F}\}$$

ограничено. Тогда если $x_1^* \neq x_2^*$ — точки строгих локальных минимумов $F(x)$, принадлежащие одной компоненте $S(\bar{F})$, то существует третья стационарная точка x_3^* , не являющаяся точкой локального минимума.

Доказательство. Обозначим через F^{**} нижнюю грань тех значений F^* , при которых x_1^* и x_2^* принадлежат одной компоненте множества $S(F^*)$, обозначаемой $S_0(F^*)$. Как следует из условия леммы, хотя бы одно F^* , для которого одновременно x_1^* и x_2^* принадлежат одной компоненте $S(F^*)$, существует, так как за такое значение можно взять \bar{F} . В этом случае $x_1^*, x_2^* \in S_0(\bar{F}) \subset S(\bar{F})$ (рис. 12).

Нетрудно далее убедиться в том, что

$$S_0(F^{**}) = \bigcap_{F^* > F^{**}} S_0(F^*) \quad (1.1)$$

есть компонента множества $S(F^{**})$, содержащая одновременно x_1^* и x_2^* . Связность множества (1.1) следует из того факта, что пересечение любого числа вложенных компактных связных множеств есть связное множество; $x_1^*, x_2^* \in S_0(F^{**})$ следует из того, что $x_1^*, x_2^* \in S_0(F^*)$, $F^* > F^{**}$. "Максимальность" (1.1) также доказывается весьма просто: пусть $x_1^*, x_2^* \in \bar{S} \subset S(F^{**})$, \bar{S} — связное множество. Тогда по определению для любого $F^* > F^{**}$ имеем $\bar{S} \subset S_0(F^*)$, поэтому $\bar{S} \subset S_0(F^{**})$.

Изучим теперь строение множеств уровней $F^* < F^{**}$. Для $F^* < F^{**}$ по определению F^{**} нельзя найти компоненту множества $S(F^*)$, которая одновременно содержала бы и точку x_1^* , и x_2^* . Обозначим поэтому через $S_1(F^*)$ компоненту множества $S(F^*)$, содержащую точку x_1^* , соответственно через $S_2(F^*)$ — компоненту, содержащую точку x_2^* (из определения $S_1(F^*) \cap S_2(F^*) = \emptyset$). Сначала покажем, что в $S_0(F^{**})$ можно найти такую

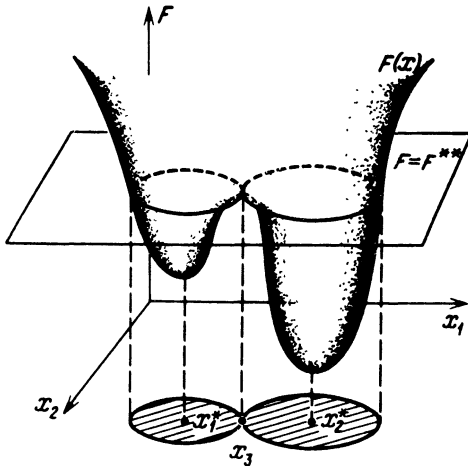


Рис. 12. Иллюстрация принципа перевала

точку x_3^* , что в любой окрестности этой точки $V(x_3^*)$ существуют точки u, v , для которых $u \in S_1(F^*), v \in S_2(F^*)$ для некоторого $F^* < F^{**}$. Выберем некоторую возрастающую последовательность значений $F_k \uparrow F^{**}, k \rightarrow \infty$. Положим

$$\begin{aligned} \|u_k - v_k\| &= \min_{\substack{u \in S_1(F_k) \\ v \in S_2(F_k)}} \|u - v\| = \\ &= \rho(S_1(F_k), S_2(F_k)) \end{aligned} \quad (1.2)$$

– расстояние между множествами $S_1(F_k)$ и $S_2(F_k)$. Докажем сначала равенство

$$\bigcup_k (S_1(F_k) \cup S_2(F_k)) = \overset{\circ}{S}_0(F^{**}), \quad (1.3)$$

где $\overset{\circ}{S}_0(F^{**})$ – внутренность компоненты $\overset{\circ}{S}_0(F^{**})$, связанное открытое множество. Нетрудно убедиться в том, что $\overset{\circ}{S}_0(F^{**})$ есть компонента множества $\{x \in R^m: F(x) < F^{**}\}$, которая одновременно содержит x_1^* и x_2^* . Пусть $x \in S_i(F_k)$, т.е. $F(x) \leq F_k < F^{**}, i = 1, 2$. Учтывая "компонентность" $\overset{\circ}{S}_0(F^{**})$, получаем включение $x \in \overset{\circ}{S}_0(F^{**})$, а значит, и включение левой части в правую в (1.3). Пусть, наоборот, $x \in \overset{\circ}{S}_0(F^{**})$, т.е. $F(x) < F^{**}$. Найдем k , для которого $F_k > F(x)$, тогда x принадлежит левой части (1.3). Таким образом, равенство в (1.3) можно считать установленным.

Вернемся к (1.2). В силу замкнутости $S_1(F_k)$ и $S_2(F_k)$ минимум достигается, причем $\rho(S_1(F_k), S_2(F_k)) = \|u_k - v_k\| \downarrow 0, u_k \in S_1(F_k), v_k \in S_2(F_k), k \rightarrow \infty$. Нетрудно показать, что u_k и v_k лежат на границе множества $S_1(F_k)$ и $S_2(F_k)$, т.е. $F(u_k) = F(v_k) = F_k$. Последовательность u_k ограничена, так как

$$u_k \in S(F^{**}) \subset S(\bar{F}),$$

а $S(\bar{F})$ – ограниченное множество. Значит, в $\{u_k\}$ можно выделить сходящуюся последовательность (для простоты ею можно считать саму последовательность $\{u_k\}$). Очевидно, если $u_k \rightarrow x_3^*$, то $v_k \rightarrow x_3^* \in S_0(F^{**})$. По построению в любой окрестности x_3^* существуют точки из $S_1(F_k)$ и $S_2(F_k)$ для некоторого $F_k < F^{**} = F(x_3^*)$.

Докажем, что x_3^* – стационарная точка. Допустим противное, т.е. что $g = \partial F(x_3^*)/\partial x \neq 0$. Тогда найдется такое $\lambda_* > 0$, что для всех $0 < \lambda < \lambda_*$ $F(x_3^* - \lambda g) < F(x_3^*) = F^{**}$. Покажем теперь, что одновременно $x_3^* - \lambda g \in S_1(F^*), x_3^* - \lambda g \in S_2(F^*)$ для некоторого $F^* < F^{**}$. Заметим прежде всего, что $x_3^* - \lambda g \in \overset{\circ}{S}_0(F^{**}), 0 < \lambda < \lambda_*$. Поэтому из (1.3) следует, что

$x_3^* - \lambda_0 g \in S_1(F_k)$ для некоторого $0 < \lambda_0 < \lambda_*$ и F_k . Аналогично можно утверждать, что $x_3^* - \lambda_0 g \in S_2(F_k)$. Получили противоречие с пустотой множества $S_1(F_k) \cap S_2(F_k)$. Точка x_3^* не является точкой локального минимума, так как в любой ее окрестности существуют точки u_k , для которых $F(u_k) < F(x_3^*)$. Лемма полностью доказана.

З а м е ч а н и я. 1. Как следует из доказательства леммы, условие ограниченности множества $S(\bar{F})$ для функций, уходящих на бесконечности в бесконечность ($F(x) \rightarrow +\infty, \|x\| \rightarrow \infty$), может быть опущено.

2. Для случая $m=1$ верен более сильный результат: если дифференцируемая на $(-\infty, \infty)$ функция имеет два строгих локальных минимума, то у этой функции существует локальный максимум. Доказательство тривиально. Пусть $x_1 < x_2$ — точки локальных минимумов $F(x)$. Тогда на компакте $[x_1, x_2]$ достигается максимум F_* в точке x_* . Нетрудно видеть, что $x_1 < x_* < x_2$, причем $F'(x_*) = 0$.

3. Условия леммы "ограниченность множества $S(\bar{F})$ и принадлежность x_1^*, x_2^* одной компоненте $S(\bar{F})$ " не могут быть в общем случае опущены. Достаточно представить себе при $m=2$ две локальные ямы, разделенные хребтом, уходящим в бесконечность. В этом случае искомая стационарная точка также уходит в бесконечность, т.е. утверждение леммы перестает быть верным. Этот эффект свойствен только многомерным задачам. В связи с этим замечанием введем следующее определение.

Определение. Непрерывную функцию $F(x), x \in R^m$, называем *сходящейся на бесконечности снизу*, если для последовательности $x_k: \|x_k\| \rightarrow \infty$, такой что $F(x_k) \rightarrow F^*$, для любого K найдется $k \geq K$, для которого $F(x_k) < F^*$. Другими словами, $F(x)$ является сходящейся на бесконечности снизу, если не существует асимптотической последовательности (см. § 1, гл. 1), для которой значение функции стремится к своему предельному значению сверху. В нашем случае значение F^* может принимать значение $+\infty$. Очевидно, функции с $\bar{F}_E = \infty$ являются сходящимися на бесконечности снизу. Как следует из теоремы 1.1, гл. 1, нижняя грань функции, сходящейся на бесконечности снизу, достижима. На основе введенного определения переформулируем лемму 1.2 следующим образом.

Лемма 1.3. Пусть $F(x)$ — дифференцируемая функция на R^m , сходящаяся на бесконечности снизу. Тогда если $x_1^* \neq x_2^*$ — точки строгих локальных минимумов $F(x)$, то существует третья стационарная точка x_3^* , не являющаяся точкой локального минимума.

Доказательство. Очевидно, достаточно изменить лишь начало доказательства леммы 1.2. Пусть по-прежнему F^{**} — нижняя грань тех значений F^* , при которых x_1^* и x_2^* принадлежат одной компоненте множества уровня $S(F^*)$; эту компоненту обозначаем $S_0(F^*)$. Множество таких F^* непусто, так как можно положить $F^* = \max F(\lambda x_1^* + (1-\lambda)x_2^*), 0 \leq \lambda \leq 1$. Главное — показать, что множество (1.1) ограничено и связно. Докажем, что $S_0(F^{**})$ — ограниченное множество. Допустим обратное. Пусть $F_k \downarrow F^{**}, k \rightarrow \infty$. Тогда множество $S_0(F_k)$ также не ограничено, поэтому можно выбрать $x_k \in S_0(F_k)$ так, чтобы $\|x_k\| \geq k$ и $F(x_k) = F_k$. В этом случае $\|x_k\| \rightarrow \infty$ и $F(x_k) \downarrow F^{**}$, что противоречит тому, что $F(x)$ — функция сходящаяся на бесконечности снизу. Таким образом, $S_0(F^{**})$ — ограниченное множество. Докажем теперь, что $S_0(F^{**})$ — связное множество. Для

этого заметим, что если пересечение последовательности замкнутых вложенных множеств есть компакт, то начиная с некоторого номера множества этой последовательности ограничены. Как было доказано, $S_0(F^{**})$ – ограниченное, замкнутое множество, являющееся пересечением замкнутых, связных множеств $\{S_0(F_k)\}$, которые также можно считать ограниченными. А как было отмечено ранее, пересечение такой системы множеств связно, что и требовалось показать. Далее доказательство полностью повторяет доказательство леммы 1.2.

Основным достоинством строго выпуклых (и строго квазивыпуклых) функций является существование единственного локального минимума, совпадающего с глобальным. На практике строгая выпуклость проверяется установлением положительной определенности гессиана $\partial^2 F/\partial x^2 > 0$, $x \in R^m$. Значение доказанных лемм состоит в том, что для существования единственного локального минимума положительную определенность $\partial^2 F/\partial x^2$ достаточно устанавливать только в стационарных точках функции! Более точно соответствующий критерий одноэкстремальности формулируется следующим образом: *функция, сходящаяся на бесконечности снизу, будет одноэкстремальной, если в ее стационарных точках гессиан положительно определен.*

Например, как следует из этого критерия, если $F(x)$ сходится на бесконечности снизу и ее гессиан представим в виде

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = P(x) - M(x) \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)^T M^T(x),$$

где $P(x)$ – положительно определенная матрица, $M(x)$ – какая-либо квадратная матрица, то $F(x)$ одноэкстремальна на R^m .

Перейдем теперь к многоэкстремальным функциям. Нас прежде всего интересуют множества уровней.

Определение. Говорим, что $F(x)$, $x \in R^m$, – локально одноэкстремальна (одноstationарна) на множестве уровня $S(F^*) = \{x \in R^m: F(x) < F^*\}$, если она одноэкстремальна (одноstationарна) на каждой компоненте множества $S(F^*)$.

Из леммы 1.2 вытекает следующий признак локальной одноэкстремальности.

Теорема 1.1 (критерий локальной одноэкстремальности функции многих переменных). Пусть $F^* < \bar{F}_E$ таково, что для любых $x_0 \in S(F^*)$, для которых $\partial F(x_0)/\partial x = 0$, следует $\partial^2 F(x_0)/\partial x^2 > 0^1$. Тогда $F(x)$ локально одноэкстремальна на $S(F^*)$. В частности, если $S(F^*)$ связно, то $F(x)$ имеет на нем единственный локальный минимум, совпадающий с глобальным.

В применении к сумме квадратов

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\alpha))^2$$

этот критерий выглядит следующим образом. Пусть для некоторого $\bar{Q}_{LU} < \bar{Q}_E$ из условий $Q(\alpha_*) < \bar{Q}_{LU}$, $\partial Q(\alpha_*)/\partial \alpha = 0$ следует $\partial^2 Q(\alpha_*)/\partial \alpha^2 > 0$; тогда $Q(\alpha)$ одноэкстремальна на любом связном подмножестве $S(\bar{Q}_{LU})^2$.

¹⁾ Напомним, что \bar{F}_E – нижняя грань функции на бесконечности (см. § 1, гл. 1).

²⁾ LU – первые буквы от англ. Local Unique – локально единственная.

Если это множество связно, то локальный минимум на нем совпадает с глобальным на R^m . Наша ближайшая задача — найти это значение суммы квадратов \bar{Q}_{LU} , при котором на всех стационарных точках, принадлежащих $S(\bar{Q}_{LU})$, гессиан $Q(\alpha)$ положительно определен. В целях простоты изложения начнем со случая $m = 1$.

Теорема 1.2 (критерий локальной одноэкстремальности суммы квадратов, $m = 1$). Сумма квадратов $Q(\alpha)$ одноэкстремальна на множестве уровня

$$\bar{Q}_{LU} = \inf_{\alpha \in R^1} \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^6}{\|\dot{f}(\alpha)\|^2 \|\ddot{f}(\alpha)\|^2 - (\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha))^2}, \quad (1.4)$$

где считаем выполненным $\bar{Q}_{LU} < \bar{Q}_E$.

Доказательство. Как следует из теоремы 1.1, достаточно показать, что для всех α_0 неравенство $Q(\alpha_0) < \bar{Q}_{LU}$ влечет $d^2Q(\alpha_0)/d\alpha^2 > 0$ при условии, что $dQ(\alpha_0)/d\alpha = 0$. Напомним, что

$$\frac{1}{2} \frac{d^2Q}{d\alpha^2} = \|\dot{f}(\alpha)\|^2 - (y - f(\alpha), \ddot{f}(\alpha)).$$

Применим неравенство Коши — Буняковского (§ 2, гл. 3, неравенство (2.17)) в условиях линейного ограничения

$$-\frac{1}{2} \frac{dQ}{d\alpha} = (y - f(\alpha), \dot{f}(\alpha)) = 0. \quad (1.5)$$

Имеем

$$\begin{aligned} & -(y - f(\alpha), \dot{f}(\alpha)) \geq \\ & \geq -\frac{\|y - f(\alpha)\|}{\|\dot{f}(\alpha)\|} (\|\dot{f}(\alpha)\|^2 \|\ddot{f}(\alpha)\|^2 - (\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha))^2)^{1/2}, \end{aligned}$$

откуда $d^2Q/d\alpha^2 > 0$ при условии (1.5), если

$$Q(\alpha) < \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^6}{\|\dot{f}(\alpha)\|^2 \|\ddot{f}(\alpha)\|^2 - (\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha))^2},$$

что и доказывает (1.4).

Очевидно

$$\frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^4 / \|\ddot{f}(\alpha)\|^2}{1 - (\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha))^2 / \|\dot{f}(\alpha)\|^2 \|\ddot{f}(\alpha)\|^2} = \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^4}{\|\ddot{f}(\alpha)\|^2 \sin^2(\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha))},$$

откуда следует, что $\bar{Q}_{LC} \leq \bar{Q}_{LU}$.

Доказанная теорема обладает наглядной геометрической интерпретацией. Будем рассматривать $f = f(\alpha) \subset R^n$, $\alpha \in R^1$, как кривую в n -мерном евклидовом пространстве. Вычислим кривизну этой кривой в точке α ; она подсчитывается по формуле [52] (для простоты обозначений α в скобках опускаем):

$$k = \frac{\|\dot{f}\| \|\ddot{f}\|^2 - \dot{f}(\dot{f}, \ddot{f})}{\|\dot{f}\|^4}.$$

Найдем на ее основе квадрат радиуса кривизны

$$R^2 = \frac{1}{k^2} = \frac{\|\dot{f}\|^8}{\|\dot{f}\|\dot{f}\|^2 - \dot{f}(\dot{f}, \dot{f})\|^2},$$

знаменатель которой преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned} & (\dot{f}\|\dot{f}\|^2 - \dot{f}(\dot{f}, \dot{f}))^T (\dot{f}\|\dot{f}\|^2 - \dot{f}(\dot{f}, \dot{f})) = \\ & = \|\dot{f}\|^4 \|\dot{f}\|^2 - \|\dot{f}\|^2 (\dot{f}, \dot{f})^2 = \|\dot{f}\|^2 (\|\dot{f}\|^2 \|\dot{f}\|^2 - (\dot{f}, \dot{f})^2). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$R^2(\alpha) = \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^6}{\|\dot{f}(\alpha)\|^2 \|\ddot{f}(\alpha)\|^2 - (\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha))^2}, \quad (1.6)$$

что совпадает с выражением (1.4) под знаком \inf . Таким образом, $\sqrt{\bar{Q}_{LU}}$ есть не что иное, как минимальный радиус кривизны кривой $f(\alpha)$, $\alpha \in \mathbb{R}^1$. Проиллюстрируем теперь результат теоремы. Пусть $y \in \mathbb{R}^n$ – вектор наблюдений, a – стационарная точка, соответствующая локальному минимуму $Q(\alpha)$; это значит, что $f(a) \perp y - f(a)$ (рис. 13), причем $\|y - f(a)\|^2 \leq \bar{Q}_{LU}$. Обозначим через C_1 сферу с центром y и радиусом $\|y - f(a)\|$. Очевидно, кривая f касается сферы C_1 в точке $f(a)$. В точке $f(a)$ построим соприкасающуюся окружность C_2 с радиусом $R(a)$, лежащую в плоскости $\dot{f}(a)$, $\ddot{f}(a)$ (если эти векторы коллинеарны, $R(a) = \infty$). Окружность, получающуюся в пересечении плоскости, натянутой на $\dot{f}(a)$, $\ddot{f}(a)$ и C_1 , обозначим через C_3 . Можно показать, что C_2 лежит вне сферы C_1 (это следует из того, что C_2 лежит вне C_3 , что с учетом того, что $R^2(a) \geq \bar{Q}_{LU}$, доказывается элементарными средствами планиметрии). Однако кривая $f(\alpha)$ в точке $\alpha = a$ со сферой C_1 имеет порядок касания, равный 1, а с окружностью C_2 – порядок касания, равный 2. Но C_2 лежит вне сферы C_1 , поэтому в некоторой окрестности точки $f(a)$ кривая лежит вне сферы C_1 , т.е. для $\alpha \neq a$ вблизи $\alpha = a$ $\|y - f(\alpha)\| > \|y - f(a)\|$, т.е. $Q(\alpha) > Q(a)$. Это неравенство будет иметь место на всем протяжении $(-\infty, a)$

и (a, ∞) до первого пересечения кривой со сферой C_1 . Другими словами, на каждом интервале (b, c) , содержащем a , таком, что $Q(\alpha) < \bar{Q}_{LU}$, $b < \alpha < c$, уравнение $dQ/d\alpha = 0$ имеет единственное решение $\alpha = a$. По сути дела, это и есть формулировка теоремы 1.2.

Как и в случае критерия локальной выпуклости (§ 1, гл. 3), можно показать, что значение \bar{Q}_{LU} в некотором смысле оптимально.

Пример (параболическая регрессия). В предыдущей главе для пара-

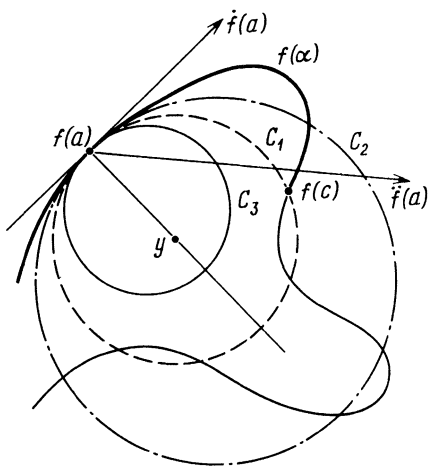


Рис. 13. Иллюстрация теоремы 1.2

большинства регрессии $f_i(\alpha) = \alpha x_i + \alpha^2 z_i$ было найдено точное значение \bar{Q}_{LC} . Найдем теперь точное значение \bar{Q}_{LU} . Квадрат радиуса кривизны для этой регрессии равен

$$R^2(\alpha) = \frac{\|2\alpha z + x\|^6}{4[\|2\alpha z + x\|^2 \|z\|^2 - (2\alpha \|z\|^2 + (x, z))^2]}.$$

Докажем, что он принимает минимальное значение в той же точке, что \bar{Q}_{LC} , а именно в точке

$$a = -\frac{1}{2} \frac{(x, z)}{\|z\|^2}. \quad (1.7)$$

Действительно, числитель производной $dR^2(\alpha)/d\alpha$ после алгебраических преобразований равен с точностью до постоянного множителя

$$\|2\alpha z + x\|^4 (4\|2\alpha z + x\|^2 \|z\|^2 - 3(2\alpha \|z\|^2 + (x, z))^2) \times \\ \times (2\alpha \|z\|^2 + (x, z)).$$

Из неравенства Коши – Буняковского

$$4\|2\alpha z + x\|^2 \|z\|^2 - 3(2\alpha \|z\|^2 + (x, z))^2 > 0.$$

Поэтому $dR^2(\alpha)/d\alpha = 0$ приводит к решению (1.7). Соответствующее значение квадрата радиуса кривизны равно

$$R^2(a) = \min_{\alpha} R^2(\alpha) = \bar{Q}_{LU} = \bar{Q}_{LC} = \frac{\|x\|^4}{4\|z\|^2} \sin^4(\hat{x}, \hat{z}).$$

Здесь значения \bar{Q}_{LC} и \bar{Q}_{LU} совпали, так как при $\alpha = a$ значение $2\alpha \|z\|^2 + (x, z) = 0$.

Перейдем теперь к многомерному случаю.

Теорема 1.3. *Обозначим*

$$\bar{Q}_{LU} = \inf_{\alpha} \min_p \frac{(p^T F^T(\alpha) F(\alpha) p)^2}{h^T(p) [I - F(\alpha) (F^T(\alpha) F(\alpha))^{-1} F^T(\alpha)] h(p)}, \quad (1.8)$$

где $h(p)$ – вектор-столбец $n \times 1$, $h_i(p) = p^T H_i(\alpha) p$, $p \in R^m$, $i = 1, \dots, n$. Допустим, $\bar{Q}_{LU} < \bar{Q}_E$. Тогда на каждой компоненте множества уровня

$$S(\bar{Q}_{LU}) = \{\alpha \in R^m: Q(\alpha) < \bar{Q}_{LU}\}$$

$Q(\alpha)$ имеет единственный локальный минимум (единственную стационарную точку)¹⁾.

До к а з а т е л ь с т в о. В принятых ранее обозначениях

$$\frac{1}{2} p^T \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} p = p^T F^T F p - p^T \sum e_i H_i p =$$

$$= p^T F^T F p - \sum e_i p^T H_i p.$$

¹⁾ Если знаменатель дроби в (1.8) обращается в нуль, значение дроби полагаем равным $+\infty$.

Оценим сверху выражение $\sum e_i p^T H_i p$ в терминах $\sum e_i^2$ при условии, что

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha} = \sum (y_i - f_i(\alpha)) \frac{\partial f_i}{\partial \alpha} = F^T e = 0,$$

где $e = (e_1, \dots, e_n)^T$. Воспользуемся для этого матричным аналогом неравенства Коши – Буняковского в условиях ограничений (2.31), гл. 3:

$$\sum e_i p^T H_i p \leq \sqrt{\sum e_i^2} [h^T(p)(I - F(F^T F)^{-1} F^T)h(p)]^{1/2},$$

где $h_i(p) = p^T H_i p$, $i = 1, \dots, n$. Таким образом,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} p^T \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} p &\geq p^T F^T F p - \\ &- \sqrt{\sum e_i^2} [h^T(p)(I - F(F^T F)^{-1} F^T)h(p)]^{1/2}, \end{aligned}$$

откуда и следует результат теоремы.

Так как в одномерном случае, $\bar{Q}_{LC} \leq \bar{Q}_{LU}$. Это следует из неотрицательной определенности матрицы $F(F^T F)^{-1} F^T$:

$$\begin{aligned} h^T(p) [I - F(F^T F)^{-1} F^T] h(p) &= \\ &= h^T(p) h(p) - h^T(p) F(F^T F)^{-1} F^T h(p) \leq \|h(p)\|^2 = \\ &= \sum_1^n (p^T H_i p)^2. \end{aligned}$$

Формула (1.8) допускает прозрачную геометрическую интерпретацию. Образом отображения $f: R^m \rightarrow R^n$ является m -мерная поверхность. Пусть $\alpha_0 \in R^m$ фиксировано. Определим максимальную кривизну поверхности f в точке α_0 следующим образом¹⁾. Как известно, касательным многообразием в точке α_0 называется линейное многообразие

$$\mathcal{X} = \{ z \in R^n: F^T(\alpha_0)(z - f(\alpha_0)) = 0 \};$$

оно проходит через точку $f(\alpha_0)$ и натянуто на вектор-столбцы $\partial f / \partial \alpha_i$, $i = 1, \dots, m$. Нормальным многообразием в точке α_0 называется линейное многообразие

$$\mathcal{N} = \{ z \in R^n: N^T(\alpha_0)(z - f(\alpha_0)) = 0 \},$$

где матрица N порядка $n \times (n - m)$ составлена из вектор-столбцов, каждый из которых ортогонален $F(\alpha_0)$. В матричном виде последнее условие можно записать как $F^T(\alpha_0)N(\alpha_0) = 0$ – нулевая матрица $m \times (n - m)$. Подпространство, натянутое на вектор-столбцы матрицы $F(\alpha_0)$, называем касательным, а натянутое на вектор-столбцы $N(\alpha_0)$ – нормальным подпространством. Рассмотрим на поверхности f некоторую дважды дифференцируемую кривую φ , которую всегда можно представить как $\varphi(\nu) = f(\alpha(\nu))$, где $\alpha(\nu)$ – дважды дифференцируемая кривая в пространстве

¹⁾ В стандартных руководствах классического типа (см., например, [44, 53]) рассматриваются частные случаи: $n = 3, m = 2$; $n = 3, m = 1$; $m = n - 1$. Ниже формула максимальной кривизны поверхности будет обобщена на случай любых $m < n$.

параметров $\alpha: R^1 \rightarrow R^m$. Очевидно тогда

$$\frac{d\varphi}{dv} = F^T(\alpha) \frac{d\alpha}{dv},$$

$$\frac{d^2\varphi_i}{dv^2} = \sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j} \frac{d^2\alpha_j}{dv^2} + \sum_{j,k=1}^m \frac{d\alpha_j}{dv} \frac{d\alpha_k}{dv} \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha_j \partial \alpha_k}.$$

Кривизной поверхности f в точке α_0 в направлении p называем кривизну кривых, лежащих на поверхности f и проходящих через точку α_0 , вторая производная которых принадлежит нормальному подпространству, а первая производная равна p . Исходя из этого определения и выведем формулу максимальной кривизны поверхности. Обозначим $H_i = \partial^2 f_i / \partial \alpha^2$; $p = d\alpha/dv, r = d^2\alpha/dv^2 \in R^m$. Тогда в матричной записи

$$\frac{d\varphi}{dv} = F^T p, \quad \frac{d^2\varphi_i}{dv^2} = p^T H_i p + F_i^T r,$$

где F_i — i -й вектор-столбец матрицы F^T , т.е. $F_i = \partial f_i / \partial \alpha$. Фиксируем пока вектор направления p и найдем вектор r . Вектор r , как было оговорено, определяем из условия принадлежности $d^2\varphi/dv^2$ нормальному подпространству N . Определим n -мерный вектор-столбец $h = (p^T H_1 p, \dots, p^T H_n p)^T$. Тогда

$$\frac{d^2\varphi}{dv^2} = h + Fr.$$

Но

$$F^T \frac{d^2\varphi}{dv^2} = F^T h + F^T Fr = 0,$$

откуда

$$r = -(F^T F)^{-1} F^T h,$$

и поэтому

$$\frac{d^2\varphi}{dv^2} = h - F(F^T F)^{-1} F^T h = (I - F(F^T F)^{-1} F^T) h.$$

Квадрат кривизны кривой φ в точке α_0 в направлении $p \in R^m$ поэтому равен

$$k^2(p) = \frac{h^T (I - F(F^T F)^{-1} F^T) h}{(p^T F^T F p)^2}, \quad (1.9)$$

поскольку $d\varphi/dv \perp d^2\varphi/dv^2$. Максимальной кривизной поверхности f в точке α_0 естественно назвать $\max_p k(p) = k$. Величина, обратная к k^2 , есть

квадрат радиуса кривизны, который совпадает с выражением под знаком \inf в (1.8). Таким образом, как и в одномерном случае, значение \bar{Q}_{LU} можно считать равным максимальному квадрату радиуса кривизны поверхности функции регрессии.

Минимизация (1.8) по p не приводит к явному решению. Поэтому целесообразно оценить (1.8) снизу по p , это будет сделано наподобие того, как ранее строилась оценка снизу для \bar{Q}_{LC} .

Теорема 1.4. Пусть Q_{LU} – максимальное значение Q , при котором

$$F^T(\alpha)F(\alpha) - \sqrt{Q} \left[\Sigma H_i^2(\alpha) - \frac{1}{\text{tr} F^T(\alpha)F(\alpha)} \times \right. \\ \left. \times (\Sigma H_i(\alpha)g_i(\alpha)) (\Sigma g_i^T(\alpha)H_i(\alpha)) \right]^{1/2} \geq 0, \quad \alpha \in R^m, \\ \text{т.е.} \\ Q_{LU} = \inf_{\alpha} \lambda_{\min}^2(F^T(\alpha)F(\alpha)) \left[\Sigma H_i^2(\alpha) - \frac{1}{\text{tr}(F^T(\alpha)F(\alpha))} \times \right. \\ \left. \times (\Sigma H_i(\alpha)g_i(\alpha)) (\Sigma g_i^T(\alpha)H_i(\alpha)) \right]^{-1/2}. \quad (1.10)$$

Тогда если $Q_{LU} < \bar{Q}_E$, то на множестве $S(Q_{LU})$ сумма квадратов одноэкстремальна (на каждой компоненте этого множества $Q(\alpha)$ имеет единственный локальный минимум¹⁾).

Доказательство. Оценим матрицу $\partial^2 Q/\partial \alpha^2$ сверху в терминах Σe_i^2 в условиях ограничения $F^T e = 0$, т.е.

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha} = \Sigma e_i g_i = 0,$$

где $g_i = \partial f_i/\partial \alpha$. Как следует из матричного неравенства Коши–Буняковского в условиях ограничений (2.34), гл. 3,

$$\Sigma e_i H_i \leq \sqrt{\Sigma e_i^2 \left[\Sigma H_i^2 - \frac{1}{g_i^T g_i} (\Sigma H_i g_i) (\Sigma H_i g_i)^T \right]^{1/2}}$$

Результаты теоремы теперь следуют из теоремы 1.1.

Сделаем одно важное замечание качественного характера. Значение \bar{Q}_{LC} зависит от параметризации модели $f(\alpha)$. Другими словами, репараметризация $\beta = \beta(\alpha)$ может изменить (т.е. увеличить или уменьшить) \bar{Q}_{LC} . Значение же \bar{Q}_{LU} инвариантно относительно внутренних преобразований в пространстве параметров. Это и понятно, ведь \bar{Q}_{LU} есть минимальный квадрат радиуса кривизны поверхности, а эта величина есть функция самой поверхности, а не ее представления. Итак, при неудачной параметризации \bar{Q}_{LC} будет мало, при удачной – велико. Поскольку \bar{Q}_{LU} не зависит от параметризации, а $\bar{Q}_{LC} \leq \bar{Q}_{LU}$, то верхним пределом \bar{Q}_{LC} следует считать \bar{Q}_{LU} . Как же следует параметризовать модель, чтобы \bar{Q}_{LC} достигло своего предела \bar{Q}_{LU} ?

Рассмотрим случай $m = 1$. Как следует из сопоставления (1.4) данной главы и (1.4) гл. 3 $\bar{Q}_{LC} = \bar{Q}_{LU}$, если $(\dot{f}(\alpha), \ddot{f}(\alpha)) = 0$. А это имеет место, когда кривая естественно параметризована. Таким образом, с вычислительной точки зрения при одномерном параметре наиболее выгодна такая па-

¹⁾ Если матрица в квадратных скобках (1.10) вырождена, следует взять обобщенную обратную.

раметризация задачи, при которой параметр совпадает с длиной дуги. Наоборот, рассмотрим случай, когда $\dot{f}(\alpha)$ коллинеарен $\ddot{f}(\alpha)$. Тогда (как следует из гл. 2) $f(\alpha) = g(\alpha)x + z$, где $x, z \in R^n$, $g(\alpha) \in R^1$, т.е. регрессия представляет собой часть прямой. Переобозначением $\beta = g(\alpha)$ эта регрессия сводится к линейной. В этом случае \bar{Q}_{LC} будет конечно, $\bar{Q}_{LC} = \|x\|^2 \times \inf_{\alpha} [(\dot{g}(\alpha))^4 / (\ddot{g}(\alpha))^2]$, тогда как $\bar{Q}_{LU} = \infty$. Разумным переобозначением

\bar{Q}_{LC} можно довести до значения \bar{Q}_{LU} . Действительно, сумма квадратов линейной регрессии выпукла на любом множестве уровня.

Примеры. Найдем коэффициент уровня локальной одноэкстремальности для $(m, m + 1)$ -связной регрессии (см. § 3, гл. 3). Напомним, что функция регрессии в этом случае равна

$$f_i(\alpha) = w_1(\alpha)x_{i1} + \dots + w_m(\alpha)x_{im} + w_{m+1}(\alpha)z_i, \quad (1.11)$$

$$i = 1, \dots, n, \quad \alpha \in R^m.$$

Переобозначением параметров перейдем к каноническому виду

$$f_i(\alpha) = (\alpha, x_i) + z_i v(\alpha), \quad \alpha \in R^m, \quad (1.12)$$

$x_1, \dots, x_n \in R^m$. В § 3 гл. 3 для регрессии (1.12) была найдена оценка снизу коэффициента локальной выпуклости \bar{Q}_{LC} . Воспользуемся принятыми в том параграфе обозначениями. Формула (1.8) для этой регрессии переписется в виде

$$(\bar{Q}_{LU})^{1/2} =$$

$$= \inf_{\alpha} \min_{\nu} \frac{\nu^T F^T(\alpha) F(\alpha) \nu}{\nu^T h_+(\alpha) \nu [\|z\|^2 - z^T F(\alpha) (F^T(\alpha) F(\alpha))^{-1} F^T(\alpha) z]},$$

где $F(\alpha) = X + zg^T(\alpha)$. Оценим снизу это выражение при условии, что $h_+(\alpha) \leq U$. Как ранее было установлено, если обозначить $\gamma = (g(\alpha), \nu)$, то минимум числителя достигается при условии $(X\nu + z\gamma)^T z = 0$. Поэтому оценка снизу нулем выражения

$$z^T (X + zg(\alpha)) [(X + zg(\alpha))^T (X + zg(\alpha))]^{-1} (X + zg(\alpha)) z \geq 0$$

является вполне приемлемой, а значит, в рамках предположения (3.11), гл. 3 удовлетворительной оценкой снизу для \bar{Q}_{LU} можно считать оценку снизу, полученную для \bar{Q}_{LC} . Отсюда можно заключить, что переобозначения модели (1.11) в виде (1.12) уместны, поскольку они приводят к повышению \bar{Q}_{LC} до уровня \bar{Q}_{LU} . Это было продемонстрировано ранее на параболической регрессии, которая представляет собой частный случай $(m, m + 1)$ -связной регрессии при $m = 1$.

§ 2. Критерии глобальной выпуклости и одностационарности

Ранее были предложены критерии локальной выпуклости и одностационарности. Эти критерии были основаны на отыскании таких пороговых значений уровней суммы квадратов, на каждом связанном подмножестве которых сумма квадратов была либо выпукла (\bar{Q}_{LC}), либо одноэкстремальна

(\bar{Q}_{LU}) . В этом параграфе будет предложена пара других, более низких значений суммы квадратов \bar{Q}_{CC} и \bar{Q}_{US} , которые уже соответствуют глобальной выпуклости и одноэкстремальности (одноstationарности); функции регрессии считаем дважды непрерывно дифференцируемыми. Задача, таким образом, сводится к отысканию такого $\bar{Q}_{CC} \leq \bar{Q}_{LC}$, при котором множество $S(\bar{Q}_{CC})$ связно, то же имеет место и для \bar{Q}_{US} .

Решим эту задачу сначала для одномерного случая, т.е. $m = 1$. Обратимся к геометрической трактовке минимизации суммы квадратов; при этом образом $f(\alpha)$, $\alpha \in R^1$, служит кривая в R^n . Локальным показателем кривизны кривой $f(\alpha)$ служит коэффициент кривизны, или просто кривизна k , минимальное значение квадрата обратной величины которой $R^2 = 1/k^2$ и есть значение \bar{Q}_{LU} . Величину k вправе назвать дифференциальным показателем кривизны. Для того чтобы решать проблемы "глобального" характера, в частности, строить критерии связности множества уровня суммы квадратов, необходим показатель, характеризующий кривую $f(\alpha)$ глобально. В качестве такого показателя мы предлагаем брать интегральную криволинейность кривой (или короче — интегральную кривизну), на основе которой и будут далее строиться глобальные критерии.

Определение. Пусть дана непрерывно дифференцируемая кривая $f(\alpha)$, $\alpha \in R^1$ в R^n . *Интегральной кривизной кривой относительно точек* $\alpha_1, \alpha_2 \in R^1$ называем отношение длины дуги этой кривой к длине хорды, т.е.

$$p(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{(f(\alpha_1), \smile f(\alpha_2))}{\|f(\alpha_1) - f(\alpha_2)\|},$$

где

$$(f(\alpha_1), \smile f(\alpha_2)) = \int_{\alpha_2}^{\alpha_1} \|\dot{f}(\alpha)\| d\alpha$$

— длина дуги; не теряя общности будем считать, что $\alpha_2 > \alpha_1$. Заметим, что $p(\alpha_1, \alpha_2) \geq 1$, $\lim p(\alpha_1, \alpha_2) = 1$ при $\alpha_1 \rightarrow \alpha_2$, причем $p(\alpha_1, \alpha_2) = 1$ тогда и только тогда, когда $f(\alpha)$ между α_1 и α_2 есть отрезок прямой.

Интегральной кривизной кривой $f(\alpha)$ называем максимальную интегральную кривизну по всем парам точек $\alpha_1 < \alpha_2$:

$$\bar{p} = \sup_{\alpha_1 < \alpha_2} p(\alpha_1, \alpha_2).$$

Прежде чем переходить к доказательству основного результата, установим один вспомогательный факт.

Лемма 2.1. Пусть $f(\alpha)$ — дважды дифференцируемая кривая в R^n , $\alpha_1 < \alpha_2$, $f(\alpha_1) = A_1 \neq A_2 = f(\alpha_2)$. Известно, что $\|A_1\| = \|A_2\| = r > 0$, но $\|f(\alpha)\| > r$ при $\alpha_1 < \alpha < \alpha_2$. Введем на кривой натуральную параметризацию, тогда

$$\int_0^{\bar{s}} k(s) ds > \frac{\|A_1 - A_2\|}{r}, \quad (2.1)$$

\bar{s} — длина дуги на отрезке кривой (A_1, A_2) , $k(s)$ — кривизна кривой.

Доказательство. По условию $f(0) = A_1$, $f(\bar{s}) = A_2$, $\|\dot{f}(s)\| = 1$, $\|\ddot{f}(s)\| = k(s)$, $0 \leq s \leq \bar{s}$. Рассмотрим функцию $v_1(s) = (\dot{f}(s), \dot{f}(0))$,

$0 \leq s \leq \bar{s}$. Пусть γ – тупой угол между вектором $A_2 - A_1$ и касательной к окружности в точке A_1 , образованной сечением сферы $S = \{u: \|u\| = r\}$ плоскостью, натянутой на векторы A_1, A_2 (рис. 14). Нетрудно видеть, что

$$\cos \gamma = (1 - \|A_1 - A_2\|^2 / 4r^2)^{1/2}. \quad (2.2)$$

Докажем, что существует такое $s_1: 0 \leq s_1 \leq \bar{s}$, что $v_1(s_1) \leq \cos \gamma$. Допустим противное, т.е. $v_1(s) > \cos \gamma > 0$ для всех $0 \leq s \leq \bar{s}$. Интегрируя это неравенство по s , получаем

$$\int_0^{\bar{s}} v_1(s) ds = \int_0^{\bar{s}} (\dot{f}(s), \dot{f}(0)) ds = (A_2 - A_1, \dot{f}(0)) > \bar{s} \cos \gamma.$$

Но $\bar{s} \geq \|A_1 - A_2\|$, поэтому

$$\cos(A_2 - A_1, \dot{f}(0)) = \frac{(A_2 - A_1, \dot{f}(0))}{\|A_2 - A_1\|} > \cos \gamma. \quad (2.3)$$

Покажем, что неравенство (2.3) в условиях леммы невозможно. Действительно, рассмотрим функцию $T(s) = \|f(s)\|^2$. Тогда $T'(0) = 2(\dot{f}(0), f(0)) = 2(\dot{f}(0), A_1) \geq 0$, так как в противном случае нашлись бы достаточно малые положительные значения s , для которых $T(s) < r^2$, что противоречит условию леммы. Теперь найдем

$$\max_{\substack{\|u\|=1 \\ (A_1, u) \geq 0}} (u, A_2 - A_1) = \max_{(A_1, u) \geq 0} \frac{(u, A_2 - A_1)}{\|u\|}. \quad (2.4)$$

Поскольку $(A_1, A_2 - A_1) = (A_1, A_2) - \|A_1\|^2 < 0$, то максимальное значение функции $(u, A_2 - A_1)$ при $\|u\| = 1$ достигается на границе ограничения $(A_1, u) \geq 0$, поэтому в (2.4) можно считать $(A_1, u) = 0$. Воспользуемся теперь неравенством Коши–Буняковского в условиях линейного ограничения (2.17) гл. 3. Тогда при $\|u\| = 1$

$$\begin{aligned} (u, A_2 - A_1) &\leq \|u\| (\|A_2 - A_1\|^2 - \\ &- (A_2 - A_1, A_1)^2 / \|A_1\|^2)^{1/2} = \\ &= (\|A_2 - A_1\|^2 - ((A_2, A_1) - r^2)^2 / r^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Нетрудно проверить, что правая часть (2.5) совпадает с $\|A_2 - A_1\| \cos \gamma$, где $\cos \gamma$ задается (2.2). Таким образом, мы вступаем в противоречие с (2.3), т.е. для некоторого s_1 имеем $(\dot{f}(s_1), \dot{f}(0)) \leq \cos \gamma$.

Аналогичные рассуждения могут быть проведены для кривой в "противоположном

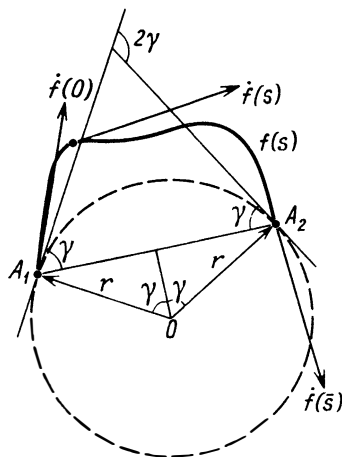


Рис. 14. К доказательству леммы 2.1

направлении", т.е. $\varphi(s') = f(\bar{s} - s')$, $0 \leq s' \leq \bar{s}$. Как и прежде, можно найти $0 \leq s_2 \leq \bar{s}$, для которого $v_2(s_2) = (\dot{f}(\bar{s}), \dot{f}(s_2)) \leq \cos \gamma$. Докажем, что s_1 и s_2 могут быть выбраны так, что $s_1 \leq s_2$. Действительно, допустим противное, т.е.

$$v_1(s) = (\dot{f}(s), \dot{f}(0)) > \cos \gamma, \quad 0 \leq s \leq s_1,$$

$$v_2(s) = (\dot{f}(s), \dot{f}(\bar{s})) > \cos \gamma, \quad s_2 \leq s \leq \bar{s},$$

причем $s_1 > s_2$. В силу непрерывности $v_1(s)$ и $v_2(s)$ тогда существует s_3 , для которого $v_1(s_3) = v_2(s_3)$, причем для

$$v_3(s) = \begin{cases} v_1(s), & 0 \leq s \leq s_3, \\ v_2(s), & s_3 \leq s \leq \bar{s}, \end{cases}$$

имеем $v_3(s) > \cos \gamma$. Но тогда

$$\begin{aligned} \bar{s} \cos \gamma &< \int_0^{\bar{s}} v_3(s) ds = \int_0^{s_3} v_1(s) ds + \int_{s_3}^{\bar{s}} v_2(s) ds = \\ &= \|\dot{f}(\bar{s})\|^2 - \|\dot{f}(0)\|^2 = 0. \end{aligned}$$

Получили противоречие, т.е. s_1 и s_2 всегда можно выбрать так, чтобы $s_1 \leq s_2$.

Дальнейшее доказательство не представляет труда. Как известно, в натуральной параметризации кривизна кривой $f(s)$ равна $\|\ddot{f}(s)\|$, поэтому

$$\begin{aligned} \int_0^{\bar{s}} k(s) ds &= \int_0^{\bar{s}} \|\ddot{f}(s)\| ds \geq \int_0^{s_1} \|\ddot{f}(s)\| ds + \int_{s_2}^{\bar{s}} \|\ddot{f}(s)\| ds \geq \\ &\geq \|\dot{f}(s_1) - \dot{f}(0)\| + \|\dot{f}(\bar{s}) - \dot{f}(s_2)\| = \\ &= \sqrt{2} [1 - (\dot{f}(s_1), \dot{f}(0))]^{1/2} + \sqrt{2} [1 - (\dot{f}(s_2), \dot{f}(\bar{s}))]^{1/2} \geq \\ &\geq 2\sqrt{2} [1 - \cos \gamma]^{1/2}, \end{aligned}$$

где $\cos \gamma$ задается выражением (2.2). Поскольку

$$2\sqrt{2} (1 - \sqrt{1 - w^2/4})^{1/2} > w, \quad 0 < w \leq 2; \quad (2.5')$$

лемма доказана.

З а м е ч а н и е. В условиях леммы можно доказать более сильное неравенство

$$\int_0^{\bar{s}} k(s) ds > \frac{\tilde{s}}{r}, \quad (2.6)$$

где \tilde{s} — длина дуги окружности экватора сферы, соединяющей точки $f(0)$ и $f(\bar{s})$. Последнее неравенство, как было подсказано Л.Д. Бурого, может быть доказано с помощью теории вращений векторных полей (см., например, [28]). Заметим, что неравенство (2.6) может быть доказано также элементарным способом, обобщая наше доказательство леммы 2.1, разбиением интервала интегрирования на $[0, s_1]$, $[s_1, s_2]$, ..., $[s_{n-1}, s]$ и устремлением $n \rightarrow \infty$. Нас вполне устраивает оценка (2.1), тем более, что она допускает обобщение и для любого выпуклого тела (см

лемму 3.1). Фактически в лемме 2.1 было доказано более сильное неравенство.

В следующей лемме устанавливается выпуклость компоненты множества локальной выпуклости функции (§ 1, гл. 3).

Лемма 2.2. Пусть $F(x)$ – дважды непрерывно дифференцируемая функция, $x \in R^m$ и $F_{LC} < \bar{F}_E$ такой уровень, что на множестве $S_{LC} = \{x \in R^m: F(x) < F_{LC}\}$ гессиан $F(x)$ положительно определен. Тогда каждая компонента множества S_{LC} есть строго выпуклое множество.

Доказательство. Не теряя общности можно считать, что для всех $x_0: F(x_0) = F_{LC}$ матрица Гессе $\partial^2 F(x_0)/\partial x^2$ положительно определена (в противном случае можно взять $F'_{LC} < F_{LC}$, а затем рассмотреть последовательность $F'_{LC} \uparrow F_{LC}$).

Докажем сначала, что при этом условии $\forall x_0: F(x_0) = F_{LC}$ существует такая окрестность ненулевого радиуса $V(x_0)$, что $(x - x_0, \partial F(x_0)/\partial x) < 0$ для всех $x \in V(x_0) \cap S_{LC}$. Действительно,

$$F(x) - F(x_0) = \left(x - x_0, \frac{\partial F(x_0)}{\partial x}\right) + (x - x_0)^T \frac{\partial^2 F(x_0)}{\partial x^2} (x - x_0) + o(\|x - x_0\|^2).$$

Допустим противное, т.е. $(x - x_0, \partial F(x_0)/\partial x) \geq 0$. Тогда для достаточно малых $\|x - x_0\| > 0$ правая часть последнего равенства будет неотрицательной, что противоречит условию $F(x) < F(x_0)$. Рассмотрим какую-либо компоненту множества S_{LC} , которую обозначим через S_{LC}^0 , и докажем, что это строго выпуклое множество. Для этого достаточно доказать, что для любого $x_0 \in S_{LC}^0: F(x_0) = F_{LC}$ и для любого $x \in S_{LC}^0, x \neq x_0$ имеет место неравенство $(x - x_0, \partial F(x_0)/\partial x) < 0$. Допустим, это утверждение ложно, т.е. $x_0 \neq x_* \in S_{LC}^0$ таковы, что $(x_* - x_0, \partial F(x_0)/\partial x) \geq 0$. Пересечение $\{x: (x - x_0) \partial F(x_0)/\partial x \geq 0\} \cap S_{LC}^0$ связано как пересечение связанных множеств, поэтому в любой окрестности x_0 можно найти $x: F(x) < F_{LC}$, для которых $(x - x_0, \partial F(x_0)/\partial x) \geq 0$, что противоречит ранее полученному утверждению.

Теорема 2.1. Положим

$$\bar{Q}_{US} = \frac{\bar{Q}_{LU}}{\bar{p}^2}, \quad (2.7)$$

$$\bar{Q}_{CC} = \frac{\bar{Q}_{LC}}{\bar{p}^2}. \quad (2.8)$$

Допустим, $\bar{Q}_{US} < \bar{Q}_E$. Тогда множества уровней

$$S(\bar{Q}_{US}) = \{\alpha: Q(\alpha) < \bar{Q}_{US}\}, \quad S(\bar{Q}_{CC}) = \{\alpha: Q(\alpha) < \bar{Q}_{CC}\}$$

связны, на множестве $S(\bar{Q}_{US})$ существует единственная стационарная точка, множество $S(\bar{Q}_{CC})$ выпукло, а гессиан суммы квадратов на нем положительно определен¹⁾.

¹⁾ Нижние индексы в левых частях формул (2.7) и (2.8) истолковываются следующим образом: US – Unique Stationary (единственная стационарная); CC – Convex Connected (выпуклая связанная).

Доказательство. Установим сначала свойство уровня (2.7). А именно докажем, что множество $S(\bar{Q}_{US})$ связано. Для этого, очевидно, достаточно доказать следующее: пусть $\alpha_1 < \alpha_2$, причем $\alpha_1, \alpha_2 \in S(\bar{Q}_{US})$, т.е.

$$Q(\alpha_j) = \|y - f(\alpha_j)\|^2 < \bar{Q}_{US}, \quad j = 1, 2; \quad (2.9)$$

тогда для любого $\alpha_1 \leq \alpha \leq \alpha_2$ имеем $\alpha \in S(\bar{Q}_{US})$, т.е.

$$Q(\alpha) = \|y - f(\alpha)\|^2 < \bar{Q}_{US}.$$

Допустим противное, а именно, пусть $\alpha_1 < \bar{\alpha} < \alpha_2$ таково, что $Q(\bar{\alpha}) \geq \bar{Q}_{US}$. Пусть Q^* такое, что $\max(Q(\alpha_1), Q(\alpha_2)) < Q^* < \bar{Q}_{US}$. Обозначим через $\bar{\alpha}_1$ инфимум α таких, что для всех $\bar{\alpha} > \alpha > \bar{\alpha}_1$ имеем $Q(\alpha) > Q^*$ и $\bar{\alpha}_2$ – супремум α таких, что для всех $\bar{\alpha} < \alpha < \bar{\alpha}_2$ имеем $Q(\alpha) > Q^*$. Эти значения $\bar{\alpha}_1$ и $\bar{\alpha}_2$ существуют, поскольку имеют место неравенства (2.9). Из непрерывности $f(\alpha)$ следует, что

$$\|y - f(\bar{\alpha}_1)\|^2 = \|y - f(\bar{\alpha}_2)\|^2 = Q^*; \quad \|y - f(\alpha)\|^2 > Q^*.$$

$$\bar{\alpha}_1 < \alpha < \bar{\alpha}_2.$$

Введем на отрезке $[\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2]$ натуральную параметризацию и применим к кривой $f(\alpha)$ на отрезке $[0, \bar{s}]$ лемму 2.1 (здесь \bar{s} – длина дуги кривой $f(\alpha)$ на отрезке $[\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2]$); очевидно, все условия леммы выполнены. Поэтому по теореме о среднем

$$\int_0^{\bar{s}} k(s) ds = k(\tilde{s})\bar{s} > \frac{\|f(\bar{s}) - f(0)\|}{\sqrt{Q^*}} > \frac{\|f(\bar{s}) - f(0)\|}{\sqrt{\bar{Q}_{US}}}$$

для некоторого $\tilde{s} \in [0, \bar{s}]$. Но тогда по определению \bar{Q}_{US}

$$k(\tilde{s}) > \bar{p} \frac{\|f(\bar{s}) - f(0)\|}{\bar{s}} \sup_{s \in [0, \bar{s}]} k(s),$$

т.е. $k(\tilde{s}) > \sup_{s \in [0, \bar{s}]} k(s)$ – противоречие.

Аналогично можно доказать связность множества $S(\hat{Q})$ для любого $\hat{Q} \leq \bar{Q}_{US}$. Отсюда следует связность множества $S(\bar{Q}_{CC})$, поскольку $\bar{Q}_{LC} \leq \bar{Q}_{US}$. Неравенство $d^2 Q/d\alpha^2 > 0$ на $S(\bar{Q}_{CC})$ следует из того, что $\bar{Q}_{CC} \leq \bar{Q}_{LC}$. Выпуклость множества $S(\bar{Q}_{CC})$ следует из леммы 2.2.

Перейдем к многомерному случаю.

Определение. Интегральной кривизной поверхности $f: R^m \rightarrow R^n$ называем

$$\bar{p} = \sup_{\alpha_1, \alpha_2 \in R^m} \frac{(g(0; \alpha_1, \alpha_2), \smile g(1; \alpha_1, \alpha_2))}{\|f(\alpha_1) - f(\alpha_2)\|},$$

где $g(\nu; \alpha_1, \alpha_2)$ – кривая на поверхности $f(\alpha)$ минимальной длины, соединяющая точки $f(\alpha_1)$ и $f(\alpha_2)$, т.е. геодезическая; $0 \leq \nu \leq 1$, $g(0; \alpha_1, \alpha_2) = f(\alpha_1)$, $g(1; \alpha_1, \alpha_2) = f(\alpha_2)$; $(g(0; \alpha_1, \alpha_2), \smile g(1; \alpha_1, \alpha_2))$ – минимальная длина дуги.

Теорема 2.2. Теорема (2.1) верна в многомерном случае.

Доказательство. Для того чтобы доказать связность множества $S(\bar{Q}_{US})$, достаточно показать, что при условии (2.9) найдется такая непрерывная кривая $\alpha(\nu) \in R^m$, что $\alpha(\nu) \in S(\bar{Q}_{US})$ и $\alpha(0) = \alpha_1$, $\alpha(\bar{\nu}) = \alpha_2$. Соединим точки $f(\alpha_1)$ и $f(\alpha_2)$ геодезической, которую в пространстве параметров R^m можно представить как $\alpha(\nu)$, а в пространстве наблюдений R^n как $f(\alpha(\nu)) = g(\nu)$. Известно, что для геодезической $\dot{g}(\nu) \in N$ — нормальное многообразие поверхности, значит, в любой точке кривизна геодезической не больше кривизны поверхности, т.е. $1/k_g^2 \leq \bar{Q}_{LU}$. Далее доказательство проводим так же, как в теореме 2.1.

Определение. Интегральной кривизной кривой $f(\alpha)$ относительно $a \in R^1$ называется

$$\bar{p}(a) = \sup_{\alpha} \frac{(f(a), \smile, f(\alpha))}{\|f(a) - f(\alpha)\|}.$$

Интегральной кривизной поверхности $f: R^m \rightarrow R^n$ относительно $a \in R^m$ называется

$$\bar{p}(a) = \sup_{\alpha \in R^m} \frac{(g(0; a, \alpha), \smile, g(1; a, \alpha))}{\|f(a) - f(\alpha)\|},$$

где, как и прежде, $g(\nu; a, \alpha)$ — геодезическая кривая на поверхности $f(\alpha)$, соединяющая точки $f(a)$ и $f(\alpha)$, $0 \leq \nu \leq 1$, $g(0) = f(a)$, $g(1) = f(\alpha)$. Таким образом,

$$(g(0; a, \alpha), \smile, g(1; a, \alpha)) = \inf_{\substack{\psi \in f \\ \psi(0) = f(a) \\ \psi(1) = f(\alpha)}} \int_0^1 \|\dot{\psi}(\nu)\| d\nu.$$

Очевидно $\bar{p}(a) \leq \bar{p}$.

Теорема 2.3 (критерий совпадения локального минимума с глобальным). Пусть a — точка локального минимума суммы квадратов $Q(\alpha)$, причем

$$Q(a) < \frac{\bar{Q}_{US}}{\bar{p}^2(a)}.$$

Тогда, если $Q(a) < \bar{Q}_E$, то a — точка глобального минимума $Q(\alpha)$.

Доказательство. Как следует из доказательства теоремы 2.2, множество уровня $S(\bar{Q}_{US}/\bar{p}^2(a))$ будет связным и на нем $Q(\alpha)$ имеет единственную стационарную точку. Вне этого множества уровня по определению

$$Q(\alpha) \geq \frac{\bar{Q}_{US}}{\bar{p}^2(a)} > Q(a).$$

Значит, $Q(a)$ — глобальный минимум функции $Q(\alpha)$.

Пример вычисления интегральной кривизны кривой. Рассмотрим уже исследовавшуюся ранее параболическую регрессию

$$f(\alpha) = \alpha z + \alpha^2 x, \quad x, z \in R^n, \quad \alpha \in R^1.$$

Оценим сверху интегральную кривизну этой кривой. Пусть $\alpha_1 < \alpha_2$, тогда

$$\begin{aligned} \|f(\alpha_1) - f(\alpha_2)\| &= \|\alpha_1^2 x + \alpha_1 z - \alpha_2^2 x - \alpha_2 z\| = \\ &= (\alpha_2 - \alpha_1) \|(\alpha_1 + \alpha_2)x + z\|, \\ (f(\alpha_1) \smile f(\alpha_2)) &= \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \|2\alpha x + z\| d\alpha = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} (\sum (2\alpha x_i + z_i)^2)^{1/2} d\alpha. \end{aligned}$$

Оценим длину дуги сверху, для этого используем следующее неравенство: если $u(x)$ – непрерывная функция на $[a, b]$, то

$$\left(\int_a^b u(x) dx\right)^2 \leq (b-a) \int_a^b u^2(x) dx. \quad (2.10)$$

Неравенство (2.10) следует из интегрального варианта неравенства Коши–Буняковского:

$$\left(\int_a^b u(x) dx\right)^2 = \left(\int_a^b u(x) 1 dx\right)^2 \leq (b-a) \int_a^b u^2(x) dx.$$

Если обозначить в (2.10) $u(x) = \sqrt{v(x)}$, $v(x) \geq 0$, то оно переписывается как

$$\int_a^b \sqrt{v(x)} dx \leq \sqrt{b-a} \sqrt{\int_a^b v(x) dx}.$$

С привлечением последнего неравенства можно выписать оценку сверху для длины дуги

$$(f(\alpha_1) \smile f(\alpha_2)) \leq (\alpha_2 - \alpha_1)^{1/2} \left(\sum_{\alpha_1}^{\alpha_2} \int f_i^2(\alpha) d\alpha\right)^{1/2}. \quad (2.11)$$

Для параболической регрессии $\bar{p} = \infty$. Это можно проверить на простейшей параболе $f = \frac{1}{2} A \alpha^2$, $A > 0$ в координатной плоскости (α, f) . Возьмем $\alpha_1 = -\alpha_2$ и устремим $\alpha_1 \rightarrow \infty$. Тогда $\|f(\alpha_1) - f(\alpha_2)\| = 2\alpha_1$, а

$$(f(\alpha_1) \smile f(\alpha_2)) = 2 \int_0^{\alpha_1} (1 + A^2 \alpha^2)^{1/2} d\alpha \geq 2A \int_0^{\alpha_1} \alpha d\alpha = A\alpha_1^2.$$

Поэтому

$$\frac{(f(\alpha_1) \smile f(\alpha_2))}{\|f(\alpha_1) - f(\alpha_2)\|} \geq \frac{A\alpha_1^2}{2\alpha_1} \rightarrow \infty, \quad \alpha_1 \rightarrow \infty.$$

Однако можно зафиксировать одну точку и оценить сверху по α выражение

$$p_a(\alpha) = \frac{(f(\alpha) \smile f(a))}{\|f(\alpha) - f(a)\|},$$

т.е. найти оценку сверху для величины $p(a)$. Эта задача в рамках параболической регрессии уже имеет нетривиальное решение. Воспользуемся

для этого неравенством (2.11). Тогда для параболической регрессии

$$\begin{aligned} (f(\alpha), f(a)) &\leq (a - \alpha)^{1/2} \left(\sum_{\alpha}^a (2\alpha x_i + z_i)^2 d\alpha \right)^{1/2} = \\ &= (a - \alpha) \left[\frac{4}{3} (\alpha^2 + \alpha a + a^2) \|x\|^2 + 2(\alpha + a)(x, z) + \|z\|^2 \right]^{1/2}, \quad a > \alpha. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$p^2(a) \leq \frac{\frac{4}{3} (\alpha^2 + \alpha a + a^2) \|x\|^2 + 2(\alpha + a)(x, z) + \|z\|^2}{(\alpha + a)^2 \|x\|^2 + 2(\alpha + a)(x, z) + \|z\|^2} = T_a(\alpha).$$

При $a < \alpha$ ответ получается тот же. Найдем максимум $T_a(\alpha)$ по α . Вычленив в числителе $T_a(\alpha)$ знаменатель, получим

$$\begin{aligned} T_a(\alpha) &= 1 + \frac{1}{3} \|x\|^2 \frac{(a - \alpha)^2}{(\alpha + a)^2 \|x\|^2 + 2(\alpha + a)(x, z) + \|z\|^2} = 1 + \frac{1}{3} \|x\|^2 \times \\ &\times \frac{(a - \alpha)^2}{(a - \alpha)^2 \|x\|^2 + (a - \alpha)[2(x, z) + 4a\|x\|^2] + \|z\|^2 + 4a^2\|x\|^2 + 4a(x, z)}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} \frac{1}{T_a(\alpha) - 1} &= \frac{3}{\|x\|^2} \min_{\nu} \left[\|x\|^2 + \frac{2}{\nu} ((x, z) + 2a\|x\|^2) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{\nu^2} (\|z\|^2 + 4a^2\|x\|^2 + 4a(x, z)) \right] = \frac{3\sin^2(\hat{x}, \hat{z})}{4\|z\| + 2ax\|^2} \|z\|^2. \end{aligned}$$

Таким образом, для параболической регрессии

$$\bar{p}^2(a) \leq 1 + \frac{4\|z\| + 2ax\|^2}{3\sin^2(\hat{x}, \hat{z}) \|z\|^2}.$$

Учитывая эту оценку и теорему 2.3, можно утверждать, что если a — найденная стационарная точка функции

$$Q(\alpha) = \sum (y_i - \alpha^2 x_i - \alpha z_i)^2,$$

причем

$$Q(a) \leq \frac{12\sin^6(\hat{x}, \hat{z})}{3\sin^2(\hat{x}, \hat{z}) \|z\|^2 + 4\|z\| + 2ax\|^2},$$

то a — точка глобального минимума $Q(\alpha)$. Заметим, что для параболической регрессии критерий глобальности может быть построен другими, более простыми методами (см., например, следующую главу). Здесь этот пример был рассмотрен из чисто иллюстративных соображений.

Важнейшим понятием математического анализа и теории оптимизации, в частности, является понятие выпуклости множества и функции. Оказывается, в рамках предлагаемого подхода можно построить достаточно

простые критерии выпуклости множества уровня $Q(\alpha)$. Напомним, что выпуклое множество связно, обратное, вообще говоря, неверно (за исключением R^1).

Определение. Интегральной линейной кривизной поверхности $f: R^m \rightarrow R^n$ называем

$$\bar{P} = \sup_{\alpha_1, \alpha_2 \in R^m} \frac{\int_0^1 \|\dot{f}(\lambda\alpha_1 + (1-\lambda)\alpha_2)\| d\lambda}{\|f(\alpha_1) - f(\alpha_2)\|},$$

где $\dot{f} \in R^n$ есть вектор-производная отображения отрезка $[\alpha_1, \alpha_2]$ в R^n . Интегральной линейной кривизной поверхности f относительно точки $a \in R^m$ называем

$$\bar{P}(a) = \sup_{\alpha \in R^m} \frac{\int_0^1 \|\dot{f}(\lambda a + (1-\lambda)\alpha)\| d\lambda}{\|f(a) - f(\alpha)\|}.$$

Отличие \bar{p} от \bar{P} заключается в том, что в числителе супремума \bar{P} стоит длина дуги на поверхности f , образованной отображением отрезка прямой $\lambda\alpha_1 + (1-\lambda)\alpha_2$, $0 \leq \lambda \leq 1$, соединяющей точки α_1 и α_2 , а не кривая минимальной длины (геодезическая), как в случае \bar{p} . Понятно, что $\bar{P} \geq \bar{p}$, причем $\bar{P} = \bar{p}$ при $m = 1$. Аналогичное замечание можно сделать и для $\bar{P}(a)$.

Определение. Множество $S \subset R^m$ называется звездчатым относительно $a \in R^m$, если из условия $\alpha \in S$ следует, что $\lambda a + (1-\lambda)\alpha \in S$ для любого $0 \leq \lambda \leq 1$.

Нетрудно показать, что S выпукло тогда и только тогда, когда оно звездчато относительно всех своих точек. Если S звездчато относительно a , то оно линейно связно (в качестве непрерывной кривой, соединяющей две произвольные точки $\alpha_1, \alpha_2 \in S$, берем ломаную $[\alpha_1, a], [a, \alpha_2] \subset S$). Таким образом, множества, звездчатые относительно какой-либо точки, занимают промежуточное положение между выпуклыми и связными множествами. Если $F(x)$ локально выпукла на множестве S ($\partial^2 F / \partial x^2$ — положительно определенная матрица на S), которое в свою очередь звездчато относительно x_* , то функция на луче $F(x_* + \lambda q)$, $\lambda \geq 0$, для любого $q \neq 0$ является выпуклой на некотором отрезке $[0, \bar{\lambda}]$, где $x_* + \bar{\lambda}q$ принадлежит границе S . Этот факт можно использовать при выборе длины шага вдоль выбранного направления при минимизации $Q(\alpha)$. Таким образом, выпуклые множества в некотором смысле могут быть заменены звездчатыми относительно какой-либо точки.

Обозначим¹⁾ (см. рис. 11)

$$\bar{Q}_C = \frac{\bar{Q}_{LU}}{\bar{P}^2}, \quad \bar{Q}_C(a) = \frac{\bar{Q}_{LU}}{\bar{P}^2(a)}. \quad (2.12)$$

¹⁾ C — первая буква от англ. Convex — выпуклый.

Теорема 2.4 (критерий выпуклости множества уровня). *Множество уровня*

$$S(\bar{Q}_C) = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) < \bar{Q}_C \}$$

выпукло. Множество уровня

$$S(\bar{Q}_C(a)) = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) < \bar{Q}_C(a) \}$$

звездчато относительно $a \in R^m$.

Доказательство. Пусть $\alpha(0) = \alpha_1$ и $\alpha(1) = \alpha_2$, причем $\alpha_1, \alpha_2 \in S(\bar{Q}_C)$. Построим отрезок $\alpha(\nu) = \nu\alpha_1 + (1-\nu)\alpha_2$ и его образ $g(\nu) = f(\alpha(\nu))$. Рассуждая дальше также как в теореме 2.2, находим, что $\alpha(\nu) \in S(\bar{Q}_C)$. Звездчатость относительно a множества $S(\bar{Q}_C(a))$ доказывается аналогично. Здесь кривые на поверхности получены отображением всех лучей, исходящих из точки a . Теорема доказана.

Замечание. Очевидно, соответствующие утверждения имеют место для любых уровней меньших рассматриваемых.

Ниже приводятся некоторые способы вычисления интегральной кривизны кривых и поверхностей, которые основаны на понятии "направленности".

Напомним, что в § 4, гл. 3 было введено понятие конуса направлений для кривой $f(\alpha) \in R^n$ как конуса K , содержащего кривую $f(\alpha)$.

Определение. Кривую $f(\alpha) \in R^n$ называем *направленной*, если ее конус направлений K заострен.

Наиболее простой конус — круговой; в этом случае можно найти такой вектор z , $\|z\| = 1$, и угол $0 \leq \varphi < \pi/2$, что

$$\cos(\hat{f}(\alpha), z) \geq \cos \varphi \quad \forall \alpha \in R^1. \quad (2.13)$$

Вектор z называется *осью конуса направлений*, φ — *углом раствора*.

Теорема 2.5. Пусть конус направлений кривой $f(\alpha)$ является круговым и заостренным ($0 \leq \varphi < \pi/2$). Тогда интегральная кривизна кривой ограничена сверху:

$$\bar{\rho} \leq \frac{1}{\cos \varphi}. \quad (2.14)$$

Доказательство. Пусть $\alpha_1 < \alpha_2$ — любые. По условию

$$(\hat{f}(\alpha), z) \geq \cos \varphi \|f(\alpha)\|,$$

поэтому по неравенству Коши — Буняковского

$$\begin{aligned} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \|f(\alpha)\| d\alpha &\leq \frac{1}{\cos \varphi} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} (f(\alpha), z) d\alpha = \\ &= \frac{1}{\cos \varphi} (f(\alpha_2) - f(\alpha_1), z) \leq \frac{1}{\cos \varphi} \|f(\alpha_2) - f(\alpha_1)\|, \end{aligned}$$

что и требовалось показать.

Для получения оценки сверху для $\bar{p}(a)$ на основе этой теоремы можно положить $z = \dot{f}(a) / \|\dot{f}(a)\|$. Тогда если $\cos(\dot{f}(\alpha), \hat{\dot{f}}(a)) \geq \cos \varphi > 0$, то $\bar{p}(a) \leq 1/\cos \varphi$. Строить оценки сверху для интегральной криволинейности кривой можно непосредственно интегрированием с применением соответствующих оценок сверху (например, как это было сделано ранее для параболической регрессии), либо пользуясь неравенством (2.14). В последнем случае отправной точкой служит конус направлений кривой. При этом если построенный конус направлений не является круговым, то задача заключается в том, чтобы для заостренного конуса K найти круговой конус K_s , содержащий K и имеющий минимальный угол раствора; круговой конус K_s в этом случае называем *описанным*. Задача построения кругового описанного конуса была рассмотрена в § 2 гл. 1, к которому мы и отсылаем читателя.

Иногда угол раствора конуса направленной кривой регрессии удобно находить на основе угла между векторами производной этой кривой. В связи с этим дадим следующее

Определение. Кривую $f(\alpha) \in R^n$ называем *прямо направленной*¹⁾, если $(\dot{f}(\alpha_1), \dot{f}(\alpha_2)) \geq 0$ для любых $\alpha_1, \alpha_2 \in R^1$. Говорим, что $f(\alpha)$ *прямо направлена* с $\cos \varphi \geq 0$, если

$$\cos(\dot{f}(\alpha_1), \dot{f}(\alpha_2)) \geq \cos \varphi, \quad \alpha_1, \alpha_2 \in R^1. \quad (2.15)$$

Очевидно, прямо направленная кривая с $\cos \varphi > 0$ является направленной. Во второй главе было дано определение однонаправленной кривой. Там было отмечено, что однонаправленность является своеобразным критерием внутренней адекватности регрессии. Покажем, что прямо направленная кривая является однонаправленной. А именно покажем, что для гладкой кривой без особых точек

$$(\dot{f}(\alpha_1), \dot{f}(\alpha_2)) \geq 0, \quad \alpha_1, \alpha_2 \in R^1, \quad (2.16)$$

влечет

$$(\dot{f}(\alpha), f(\alpha) - f(\beta)) < 0, \quad \alpha < \beta, \quad (2.17)$$

$$(\dot{f}(\alpha), f(\alpha) - f(\beta)) > 0, \quad \alpha > \beta. \quad (2.18)$$

Действительно, пусть $\alpha < \beta$ выбраны произвольно. Тогда из (2.16) следует, что

$$(\dot{f}(\alpha), \dot{f}(\alpha_2)) \geq 0, \quad \alpha \leq \alpha_2 \leq \beta. \quad (2.19)$$

Теперь заметим, что левая часть (2.19) как функция α_2 является непрерывной по α_2 , причем при $\alpha_2 = \alpha$ эта функция положительна, поэтому ее

¹⁾ Этот термин аргументируем следующим образом. Вектор производной прямо направленной кривой лежит в прямом конусе, т.е. в конусе K , для которого $(u, v) \geq 0$ для любых $u, v \in K$.

интеграл по $d\alpha_2$ от α до β положителен, т.е.

$$\int_{\alpha}^{\beta} (\dot{f}(\alpha), \dot{f}(\alpha_2)) d\alpha_2 = (\dot{f}(\alpha), \int_{\alpha}^{\beta} \dot{f}(\alpha_2) d\alpha_2) = \\ = (\dot{f}(\alpha), f(\beta) - f(\alpha)) > 0,$$

что и доказывает (2.17). Аналогично доказывается (2.18).

Таким образом, грубо можно утверждать, что прямая направленность кривой есть условие внутренней адекватности регрессии.

Итак, допустим, для кривой имеет место неравенство (2.15). Как с помощью теоремы 2.5 оценить в этом случае интегральную кривизну кривой сверху? Из § 2, гл.1 следует, что при условии (2.15) существует вектор k_* такой, что

$$\cos(\dot{f}(\alpha), k_*) \geq \left(\frac{1}{n} (1 + (n-1) \cos \varphi) \right)^{1/2},$$

т.е. для такой кривой

$$\bar{p}^2 \leq \frac{n}{1 + (n-1) \cos \varphi}. \quad (2.20)$$

В частности, для прямонаправленной кривой $\bar{p}^2 \leq n$. Например, допустим, $\dot{f}_i(\alpha) \geq 0$, т.е. $\dot{f}(\alpha) \subset R_+^n$ — положительный ортант R^n ; тогда осью описанного кругового конуса будет $u = (1, 1, \dots, 1)$, а $\cos \varphi = 1/\sqrt{n}$. Таким образом, для такой кривой интегральная кривизна $\bar{p} \leq \sqrt{n}$.

Рассмотрим другой пример, а именно пусть $\dot{f}_i(\alpha)$ равномерно возрастают по i , т.е.

$$0 \leq \dot{f}_1(\alpha) \leq \dot{f}_2(\alpha) \leq \dots \leq \dot{f}_n(\alpha), \quad \alpha \in R^1.$$

Тогда соответствующий конус есть

$$K = \{ u \in R^n: 0 \leq u_1 \leq u_2 \leq \dots \leq u_n \}.$$

Как показано в § 2, гл. 1, косинус угла раствора для этого конуса задается формулой (2.15), гл. 1. Таким образом, можно считать, что в условиях возрастающей по i производной $\bar{p} \leq \sqrt{n/3}$ (улучшение по сравнению с конусом R_+^n в $\sqrt{3}$ раз).

Для построения точных оценок сверху для интегральной кривизны поверхности в качестве кривых необходимо рассматривать ее геодезические. Из теоремы 2.4 следует, что для установления выпуклости суммы квадратов достаточно рассмотреть кривые на поверхности, задаваемые более простыми средствами — это отображение прямых $l = \alpha_0 + \lambda \nu$ из пространства параметров в R^n посредством отображения f . При этом все результа-

ты, касающиеся обычных кривых, переносятся на подобные кривые автоматически. Так, говорим, что поверхность $f(\alpha) \in R^n$, $\alpha \in R^m$ линейно направлена, если для любого $\nu \in R^m$ множество

$$\{u: u = F(\alpha)\nu, \alpha \in R^m\}, \quad (2.21)$$

где $F(\alpha) = \partial f / \partial \alpha$ – матрица производных $n \times m$, лежит в заостренном конусе. Заметим, что в (2.21) можно, во-первых, ограничиться $\|\nu\| = 1$. Во-вторых, за счет выбора произвольного $w \neq 0$, $w \in R^m$ можно ограничиться подпространством векторов ν : $(\nu, w) \geq 0$.

Теорема 2.5 обобщается на многомерный случай непосредственным образом.

Теорема 2.6. Пусть $f: R^m \rightarrow R^n$, $F = \partial f / \partial \alpha$. Тогда, если существует $z \in R^n$, $\|z\| = 1$, для которого

$$\cos(z, \hat{F}\nu) = \frac{\nu^T F^T(\alpha)z}{(\nu^T F^T(\alpha)F(\alpha)\nu)^{1/2}} \geq \cos \varphi > 0 \quad \forall \alpha \in R^m$$

для всех ν : $(\nu, w) \geq 0$, $w \neq 0$, то интегральная линейная кривизна поверхности $f(\alpha)$ ограничена сверху:

$$\bar{P} \leq \frac{1}{\cos \varphi}.$$

Определение. Поверхность $f(\alpha) \in R^n$ называем линейно прямонаправленной, если

$$(F(\alpha_1)\nu, F(\alpha_2)\nu) = \nu^T F^T(\alpha_1)F(\alpha_2)\nu \geq 0, \quad \alpha_1, \alpha_2 \in R^m \quad (2.22)$$

для всех $\nu \in R^m$

Если l – прямая в R^m , то кривая $f(l)$ для линейно прямонаправленной поверхности будет прямонаправленной. Отсюда следует, что для такой поверхности $\bar{P}^2 \leq n$. Аналогично одномерному случаю можно утверждать, что если для m -мерной поверхности в n -мерном пространстве

$$\cos(F(\alpha_1)\nu, \hat{F}(\alpha_2)\nu) \geq \tau > -\frac{1}{n-1}, \quad \alpha_1, \alpha_2 \in R^m,$$

то для такой поверхности

$$\bar{P}^2 \leq \frac{n}{1 + (n-1)\tau}.$$

Примеры. Рассмотрим квазилинейные регрессии (см. § 3, гл. 1; § 3, гл. 3). Поверхность этой регрессии задается уравнениями $f_i(\alpha) = g(\alpha^T x_i)$, $\alpha, x_i \in R^m$, $i = 1, \dots, n$; g – строго возрастающая функция действительного переменного. Докажем, что эта поверхность является линейно прямонаправленной. Напомним (см. § 3, гл. 3), что для этой регрессии

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha} = F(\alpha) = G(\alpha)X,$$

где X — матрица $n \times m$, i -й вектор-строкой которой является x_i^T , $G(\alpha)$ — диагональная матрица $G_{ii}(\alpha) = \dot{g}(\alpha^T x_i) > 0$, $i = 1, \dots, n$. Поэтому для любого $v \in R^m$

$$v^T F^T(\alpha_1) F(\alpha_2) v = v^T X^T G(\alpha_1) G(\alpha_2) X v \geq 0,$$

поскольку $G(\alpha_1)G(\alpha_2) \geq 0$. Нетрудно видеть, что если к тому же $\text{rang } X = m$, $\dot{g} > 0$, то неравенство (2.22) для $v \neq 0$ будет строгим. Заметим кстати, что во второй главе была доказана однонаправленность квазилинейной регрессии. Она следует из доказанной линейной прямо-направленности поверхности квазилинейной регрессии с учетом неравенств (2.17) и (2.18) для прямонаправленных кривых.

Таким образом, для квазилинейных регрессий $\bar{P}^2 \leq n$. В частности, на основе теоремы 2.4 можно утверждать, что для логлинейных регрессий (см. § 3, гл. 3)

$$Q_C = \frac{1}{4n} \lambda_{\min}(A^2 B^{-1}), \quad (2.23)$$

где A и B задаются выражениями (3.21) из гл. 3, т.е. множество

$$S_C = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) < Q_C \}$$

выпукло и на нем сумма квадратов

$$Q(\alpha) = \sum (y_i - e^{\alpha^T x_i})^2$$

выпукла. Таким образом, если найденная точка a локального минимума дает значение $Q(a) < Q_C$, то a — точка глобального минимума. Разумеется, в каждом конкретном случае квазилинейной регрессии, и в том числе для логлинейной, можно предложить более точные оценки для линейной интегральной кривизны поверхности и в целом для величин Q_{US} , Q_C и $Q_C(a)$.

Теперь рассмотрим пример $(m, m + 1)$ -связной регрессии с функцией (3.10) из гл. 3. В § 3, гл. 3 для этой регрессии была построена оценка снизу для уровня локальной выпуклости суммы квадратов, в первом параграфе этой главы было установлено, что при некоторых предположениях в качестве достаточно хорошей оценки снизу для уровня локальной одноэкстремальности можно взять нижнюю оценку для уровня локальной выпуклости. Найдем теперь оценку снизу для уровня глобальной одноэкстремальности $Q(\alpha)$ этой регрессии. Для этого очевидно необходимо найти оценку сверху для интегральной кривизны поверхности, задаваемой (3.10) гл. 3. Воспользуемся для этого теоремой 2.5. Из методических соображений найдем сначала эту оценку сверху для одномерного параметра, т.е. в случае, когда

$$f_i(\alpha) = \alpha x_i + v(\alpha) z_i, \quad \alpha \in R^1. \quad (2.24)$$

Допустим, что $v(\alpha)$ — возрастающая функция, т.е. $v'(\alpha) = q(\alpha) \geq 0$.

Тогда $\dot{f}(\alpha) = x + q(\alpha)z$ лежит на луче с началом в точке x и направляющим

вектором z . Конусом, содержащим $\{f(\alpha), \alpha \in R^1\}$, в этом случае будет плоский конус, натянутый на векторы x и z . В качестве оси конуса целесообразно взять вектор $\rho = x/\|x\| + z/\|z\|$. Конус угла раствора при этом будет равен

$$\tau = \cos(x, \hat{\rho}) = \cos(z, \hat{\rho}), \quad (2.25)$$

поэтому для регрессии (2.24) оценкой сверху для интегральной криволинейности кривой будет $1/\tau$.

Предположим теперь, что $d^2v/d\alpha^2 \leq U$, $\alpha \in R^1$. В этих предположениях в § 3, гл. 3 была найдена оценка снизу для уровня локальной выпуклости $(m, m+1)$ -связной регрессии — см. формулу (3.13) из гл. 3. Легко проверить, что для случая $m=1$ эта формула имеет вид

$$Q_{LC} = \frac{\|x_z\|}{\|z\|^2 U^2},$$

где x_z — вектор остатков регрессии x на z , т.е.

$$x_z = \left(I - \frac{1}{\|z\|} z z^T \right) x.$$

Таким образом, окончательно для (1,2)-связной регрессии при сделанных выше предположениях

$$Q_C = \frac{\|x_z\|}{\|z\|^2 U^2 \tau^2},$$

где τ дается выражением (2.25). По теореме 2.4 тогда можно утверждать, что при сделанных предположениях множество

$$S_C = \{ \alpha \in R^1 : \sum (y_i - \alpha x_i - v(\alpha) z_i)^2 < Q_C \}$$

будет представлять собой интервал, причем на нем $Q(\alpha)$ будет строго выпуклой функцией α . В частности, если a — стационарная точка $Q(\alpha)$, причем $Q(a) < Q_C$, то $Q(a)$ — глобальный минимум $Q(\alpha)$, $\alpha \in R^1$.

Исследование $(m, m+1)$ -связных регрессий существенно упрощается, если произвести ортогонализацию. Так, для (1,2)-связной регрессии представим $z = x + e$, где $e \perp x$. Тогда уравнение (2.24) в векторном виде переписется как $f(\alpha) = (\alpha + v(\alpha))x + v(\alpha)e$. Воспользовавшись методом переобозначения (см. §1, гл. 1), придем опять к (1,2)-связной регрессии $f(\lambda) = \lambda x + t(\lambda)e$, где $(x, e) = 0$. Для такой регрессии при условии $t'(\lambda) \geq 0$ значение $\tau = 1/\sqrt{2}$, поэтому уровень выпуклости при условии, что $|t''(\lambda)| \leq U$, будет равен $\|x\|^4/2 \|e\|^2 U^2$.

Перейдем к многомерному случаю $(m, m+1)$ -связной регрессии. С помощью ортогонализации найдем вектор $e \in R^m$ такой, что $z = e + X\theta$, где $e \perp X$, т.е. $X^T e = 0$. Очевидно, θ в этом случае представляет собой оценку МНК линейной регрессии z на X , т.е. $\theta = (X^T X)^{-1} X^T z$. Переобо-

значением $(m, m+1)$ -связную регрессию (3.10), гл. 3 сводим к

$$f(\lambda) = X\alpha + t(\lambda)e, \quad \lambda \in R^m, \quad (2.26)$$

где по условию $X^T e = 0$. Пусть для всех $q(\lambda) = \partial t / \partial \lambda \in R^m$ существует такой вектор $w \in R^m$, что для всех $\nu: (\nu, w) \geq 0$ имеем $(q(\lambda), \nu) \geq 0$ при любых $\lambda \in R^m$. Оценим сверху линейную интегральную кривизну такой регрессии. Выберем в R^m прямую $l_\nu = \{\lambda = \lambda_0 + \sigma\nu, -\infty < \sigma < \infty\}$, где $\lambda_0 \in R^m$ выбрано произвольно, $\nu \neq 0$. Не теряя общности можно считать $(\nu, w) \geq 0$. образом этой прямой при отображении (2.26) будет $\varphi(\sigma) = X\lambda_0 + \sigma X\nu + et(\lambda_0 + \sigma\nu)$ с вектор-производной $\dot{\varphi}(\sigma) = X\nu + e(q(\lambda_0 + \sigma\nu), \nu)$. Но по условию $(q(\lambda_0 + \sigma\nu), \nu) \geq 0$. Заметим еще, что в силу проведенной ортогонализации $(X\nu)^T e = \nu^T X^T e = 0$. Поэтому, как и для $(1,2)$ -связной регрессии, косинус угла раствора конуса, натянутого на множество $\{X\nu + e \cdot (q(\lambda_0 + \sigma\nu), \nu)\}$, равен $1/\sqrt{2}$, а значит, по теореме 2.6 для этой регрессии линейная интегральная кривизна $\bar{P}^2 \leq 2$.

Для получения порогового уровня выпуклости Q_C необходимо найти оценку снизу для уровня локальной выпуклости. Как следует из § 3, гл. 3, при условии

$$\left(\frac{\partial^2 t}{\partial \lambda^2}\right)^2 \leq U^2, \quad \lambda \in R^m,$$

где U – симметрическая положительно определенная матрица $m \times m$, имеет место следующая оценка:

$$\bar{Q}_C \geq Q_C = \frac{1}{\|e\|^2} \lambda_{\min}^2(X^T X U^{-1}).$$

Поэтому на основании теоремы 2.4 окончательно можно утверждать, что при сделанных предположениях для регрессии (2.26) множество

$$\{\alpha \in R^m: Q(\alpha) < Q_C/2\}$$

будет выпукло и на нем $Q(\alpha)$ – выпуклая функция. В частности, если найденная стационарная точка a такова, что $Q(a) < Q_C/2$, то $Q(a)$ – глобальный минимум $Q(\alpha)$, $\alpha \in R^m$.

Разумеется, аналогичные оценки для $(m, m+1)$ -связных регрессий можно строить и в рамках иных предположений о функции $v(\alpha)$ (или $t(\lambda)$).

§ 3. Декомпозиционные функции. Обобщения

До сих пор построение критериев совпадения локального минимума с глобальным проводилось для суммы квадратов отклонений. Нельзя ли обобщить предложенный для суммы квадратов подход на функции более общей природы? Ответ на этот вопрос содержится в этом и следующем параграфах. Суть проблемы заключается в том, чтобы из всего многообразия функций m переменных выделить класс, включающий многоэкстремальные функции и поддающийся "исследованию на многоэкстремальность". Предлагается в качестве такого класса рассмотреть следующий класс функций, которые мы назвали декомпозиционными.

Определение. Функцию $F(x), x \in R^m$, называем *декомпозиционной функцией*, коротко *D-функцией*, если ее можно декомпозировать, т.е. представить в виде суперпозиции двух функций:

$$F(x) = V(f(x)), \quad (3.1)$$

где $f: R^m \rightarrow E, E \subset R^n, n \geq m, f$ обратима на E, V — строго выпуклая функция на $R^n, \partial^2 V(e)/\partial e^2 > 0$, достигающая своего инфимума.

Можно показать, что в этом случае для функции $V(e)$ имеем $\bar{V}_E = +\infty$, т.е. для любого $V_0 > \inf V(e)$ множество $S_0 = \{e \in R^n: V(e) \leq V_0\}$ компактно. Для доказательства сначала рассмотрим случай $e \in R^1$. Пусть $e_0 \in R^1$ и $V'(e_0) > 0$, тогда в силу строгой выпуклости $V(e)$ получаем $V(e) > V(e_0) + V'(e_0)(e - e_0) \rightarrow +\infty$ при $e \rightarrow \infty$. Аналогично, легко видеть, что существует $e'_0: V'(e'_0) < 0$, и тогда при $e \rightarrow -\infty$ опять $V(e) \rightarrow +\infty$. В многомерном случае допустим $\bar{V}_E < \infty$, тогда множество $S_E = \{e \in R^n: V(e) \leq \bar{V}_E\}$ выпукло и не ограничено в силу выпуклости $V(e)$, значит, оно содержит луч $e = e_0 + \lambda v, \lambda > 0$, причем $V(e) \rightarrow \bar{V}_E$ при $\lambda \rightarrow +\infty$. Но на луче $V(e)$ строго выпукла, значит, $V(e) \rightarrow +\infty$, — противоречие.

Помимо перечисленных условий, будем также предполагать, что функции V и e непрерывно дифференцируемы до необходимого порядка. Прототипом V является сумма квадратов, тогда $V(e) = \|e\|^2, e = (e_1, \dots, e_n)$; прототипом f — функция отклонений регрессии $(y_1 - f_1(\alpha), \dots, y_n - f_n(\alpha))$.

Класс D -функций достаточно широк. Очевидно, он включает в себя все строго выпуклые функции m переменных, так как для любой строго выпуклой функции $F(x), x \in R^m$, можно положить $n = m, f$ — тождественное отображение R^m на себя, $V(x) = F(x)$.

Можно показать, что класс декомпозиционных функций содержит все одноэкстремальные функции на R^m . Ограничимся лишь схемой доказательства этого утверждения. Итак, пусть $F(x)$ имеет единственный локальный минимум $x_* \in R^m$, совпадающий с глобальным (система $\partial F/\partial x = 0$ имеет единственное решение $x = x_*$). Не теряя общности можно считать $F(x) \geq 0$ и $x_* = 0, F(0) = 0 = \min F(x)$. В качестве V положим $V(e) = \|e\|^2$. В качестве f рассмотрим следующее взаимно однозначное отображение R^m на себя, неподвижной точкой которого является 0. Пусть $x_0 \in R^m$, рассмотрим систему дифференциальных уравнений $\dot{x}(t) = -(\partial F(x(t))/\partial x)$ с начальным условием $x(0) = x_0, 0 \leq t < +\infty$. Геометрически решением будет являться кривая в R^m , соединяющая x_0 и $\lim_{t \rightarrow +\infty} x(t) = 0$, вектор производной которой совпадает с антиградиентом $-\partial F/\partial x$. При сделанных предположениях можно показать, что функция действительного переменного $\varphi(t) = \|x(t)\|^2$ является строго убывающей, причем $\varphi(+\infty) = 0$. В качестве образа x_0 отображения f полагаем $x(t_0)$, где t_0 — решение уравнения $F(x_0) = \|x(t_0)\|^2$. Нетрудно видеть, что для построенных V и f имеем $F(x) = V(f(x))$, т.е. F — декомпозиционная функция.

Тем же способом можно доказать, что любую строго выпуклую функцию $V(e)$, $e \in R^n$, имеющую минимум, можно представить в виде суперпозиции $V(e) = T(\psi(e))$, где $\psi: R^n \rightarrow R^n$ – взаимно однозначное отображение R^n на себя, T – одностационарная функция, имеющая минимум. С учетом этого замечания очевидно, что класс D -функций совпадает с классом функций вида $T(f(x))$, где T – одностационарная на R^n функция, имеющая минимум на R^n , f – взаимно однозначное отображение R^m на $E \subset R^n$.

Особенность класса декомпозиционных функций в том, что он содержит многоэкстремальные функции. К подобным функциям, как следует из гл. 2, относится сумма квадратов. Естественным обобщением суммы квадратов служит сумма модулей p -х степеней невязки, т.е.

$$Q_p(\alpha) = \sum_{i=1}^n |y_i - f_i(\alpha)|^p, \quad p \geq 1, \quad (3.2)$$

или более общий класс функций

$$Q_\psi(\alpha) = \sum_{i=1}^n \psi(y_i - f_i(\alpha)), \quad (3.3)$$

где $\psi(\xi)$ – выпуклая весовая функция на R^1 , $\psi(0) = 0 = \min \psi(\xi)$. Еще более общий класс функций, который входит в класс D -функций, соответствует (3.3) с разными весовыми функциями:

$$Q_{\psi_1, \dots, \psi_n}(\alpha) = \sum_{i=1}^n \psi_i(y_i - f_i(\alpha)), \quad (3.4)$$

где ψ_i обладает свойствами весовой функции ψ в (3.3).

Заметим, что не теряя общности можно считать $\min V(e) = V(0) = 0$. Действительно, если $V(e_*) = V_* = \min V(e)$, то можно положить $f'(x) = f(x) + e_*$, $V'(e) = V(e + e_*) - V_*$ и рассматривать $F'(x) = V'(f'(x)) = F(x) - V_*$.

Другой возможный путь упрощения исходной задачи – линейная перепараметризация. В частности, возможен поворот и растяжение в пространстве R^n , улучшающие обусловленность функции V . Чтобы сохранить минимизируемую функцию, необходимо сделать обратное преобразование над $f(x)$.

Одна из основных особенностей D -функции состоит в том, что формулы ее первых и вторых производных напоминают соответствующие формулы для суммы квадратов:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \sum_i \frac{\partial V}{\partial f_i} \frac{\partial f_i}{\partial x},$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = \sum_{i,j} \left(\frac{\partial f_i}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial f_j}{\partial x} \right)^T \frac{\partial^2 V}{\partial f_i \partial f_j} + \sum \frac{\partial V}{\partial f_i} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2},$$

где $\partial f_i / \partial x$ – вектор первых производных $m \times 1$, $\partial^2 f_i / \partial x^2$ – матрица вторых производных $m \times m$. Будем далее обозначать $g_i = \partial f_i / \partial x$, G – матрица $n \times m$, i -я вектор-строка которой есть g_i^T , $\partial^2 f_i / \partial x^2 = H_i$ – матрица

$m \times m$, $\partial^2 V / \partial f^2 = W$ – гессиан функции V (матрица $n \times n$). Тогда предыдущие формулы переписываются следующим образом:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \sum_i^n \frac{\partial V}{\partial f_i} g_i, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = G^T W G + \sum_1^n \frac{\partial V}{\partial f_i} H_i. \quad (3.6)$$

Так же как и в случае исследования суммы квадратов, будем предполагать $\text{rank } G = m$. Если $W = W(e)$, $e \in R^n$, положительно определена, то вблизи точки минимума $\partial^2 F / \partial x^2 > 0$ и $\partial V / \partial f_i \approx 0$, а значит, вторым слагаемым выражения (3.6) можно пренебречь. Последнее замечание может лечь в основу вычисления уровня локальной выпуклости D -функции. Возможность декомпозиции D -функции позволяет изолированно исследовать функции V и f . Это свойство D -функции является основополагающим.

Вычисление уровня локальной выпуклости. Итак, предположим, что функции V и f дважды непрерывно дифференцируемы, $\min V(e) > -\infty$. Оценим гессиан D -функции (3.1) снизу. Воспользуемся матричным аналогом неравенства Коши – Бунаковского (2.29), гл. 3, тогда

$$\sum \frac{\partial V(f(x))}{\partial f_i} H_i(x) \geq - \left\| \frac{\partial V(f(x))}{\partial f} \right\| \left(\sum H_i^2(x) \right)^{1/2}. \quad (3.7)$$

Пусть $V_0 > \min V(e)$, тогда множество $J(V_0) = \{e \in R^n : V(e) \leq V_0\}$ компактно и на нем $\|\partial V / \partial f\|$ ограничено сверху. Это позволяет нам (хотя бы теоретически) записать оценку

$$\left\| \frac{\partial V}{\partial e} \right\| \leq \varphi(V), \quad (3.8)$$

где φ – некоторая строго возрастающая положительная функция. С учетом этого неравенства

$$\sum \frac{\partial V(f(x))}{\partial f_i} H_i(x) \geq -\varphi(V(f(x))) \left(\sum H_i^2(x) \right)^{1/2}.$$

Помимо оценки (3.7), по аналогичным соображениям может быть построена оценка снизу для гессиана функции $V(e)$:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial e^2} \geq T(V)W_0, \quad (3.9)$$

где $T(V)$ – невозрастающая положительная функция, W_0 – постоянная положительно определенная матрица $n \times n$. Объединяя обе оценки, можно получить оценку снизу для гессиана функции $F(x)$ ¹⁾:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \geq T(V)G^T(x)W_0G(x) - \varphi(V)R(x),$$

¹⁾ Напомним, что запись $A > B$ для двух симметрических матриц одного порядка A и B означает, что матрица $A - B$ неотрицательно определена; запись $A > B$ означает, что матрица $A - B$ положительно определена.

где

$$R(x) = (\sum H_i^2(x))^{1/2}.$$

Собирая вместе полученные оценки, получаем аналог теоремы 2.2.

Теорема 3.1. Пусть для D -функции (3.1) имеют место оценки (3.8) и (3.9). Пусть $U > 0$ такое, что

$$G^T(x)W_0G(x) - UR(x) \geq 0 \quad \forall x \in R^m,$$

т.е.

$$U \leq \lambda_{\min}(G^T(x)W_0G(x)R^{-1}(x)) \quad \forall x \in R^m.$$

Тогда для уровня

$$F_{LC} = \left(\frac{\varphi}{T} \right)^{-1}(U)$$

верно следующее утверждение: на множестве $S_{LC} = \{x \in R^m : F(x) < F_{LC}\}$ имеем $\partial^2 F / \partial x^2 > 0$.

Уровень F_{LC} называем уровнем локальной выпуклости (см. § 1, гл. 3). Это фактически означает, что F_{LC} — корень уравнения $\varphi(v)/T(v) = U$. В силу возрастания функции φ и убывания функции T этот корень единствен. Очевидно, если U таково, что $U > \varphi(v)/T(v)$ для любого v , то полагаем $F_{LC} = +\infty$. Если $U < \varphi(v)/T(v)$ для любого v , то полагаем $F_{LC} = -\infty$.

Очевидно, теорема 3.1 превращается в теорему 3.1, гл. 3 в случае суммы квадратов, т.е. для $V(e) = \|e\|^2$. При этом $T(V) \equiv 1$, $W_0 = 2I$, $\varphi(V) = 2\sqrt{V}$.

Разумеется, доказанная теорема должна служить лишь путеводной нитью для вычисления уровня локальной выпуклости D -функции в каждом конкретном случае. Главным здесь является умелое построение оценки сверху (3.8) и оценки снизу (3.9). В частности, с учетом специфики функции V оценка (3.8) может быть усилена, это будет продемонстрировано ниже.

Теорему 3.1 проиллюстрируем на примере суммы модулей p -х степеней (3.2) для $1 < p < 2$. Случай $p = 1$ мы не рассматриваем, так как он ведет к недифференцируемой $Q_p(\alpha)$ хотя это не принципиально. Рассмотрение случая $p = 1$ принесет массу деталей технического порядка. Аналогично возможно рассмотрение случая $p > 2$. При $1 < p < 2$ возникает одна сложность, связанная с тем, что в тех точках α , в которых $y_i = f_i(\alpha)$ хотя бы для одного $i = 1, \dots, n$, функция $Q_p(\alpha)$ не является дважды дифференцируемой. Нетрудно проверить, что

$$\begin{aligned} -\frac{1}{p} \frac{\partial Q}{\partial \alpha} &= \sum |y_i - f_i(\alpha)|^{p-1} \text{sign}(y_i - f_i(\alpha)) g_i, \\ \frac{1}{p} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} &= (p-1) \sum |y_i - f_i(\alpha)|^{p-2} g_i g_i^T - \\ &- \sum |y_i - f_i(\alpha)|^{p-1} \text{sign}(y_i - f_i(\alpha)) H_i, \end{aligned} \quad (3.10)$$

где, напомним, $g_i = \partial f_i / \partial \alpha$, $H_i = \partial^2 f_i / \partial \alpha^2$, аргумент α в скобках для краткости опускаем. Найдём сначала оценку сверху для второго слагаемого

в сумме (3.10). Введем следующее обозначение: если A — симметрическая матрица, то под $|A|$ понимаем матрицу $P^T |\Lambda| P$, где $|\Lambda|$ — диагональная матрица с ii -м диагональным элементом, равным $|\lambda_i|$, λ_i — i -е собственное число матрицы $A = P^T \Lambda P$, P — ортогональная матрица. Очевидно, $|A|$ — неотрицательно определенная матрица и $A \leq |A|$. На основании этого замечания получаем

$$\sum |y_i - f_i|^{p-1} \text{sign}(y_i - f_i) H_i \leq \sum |y_i - f_i| |H_i|.$$

Теперь воспользуемся матричным аналогом неравенства Гёльдера (2.26), гл. 3, полагая в нем $\theta = (p-1)/p$, $0 < \theta < 1$, $a_i = |y_i - f_i|^{p-1}$, $B_i = |H_i|$. Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} \sum |y_i - f_i|^{p-1} |H_i| &\leq (\sum |y_i - f_i|^p)^{\frac{p-1}{p}} (\sum |H_i|^p)^{\frac{1}{p}} = \\ &= Q_p^{p-1} (\sum |H_i|^p)^{\frac{1}{p}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Теперь оценим снизу первое слагаемое в (3.10). Для этого опять обратимся к матричному аналогу неравенства Гельдера, но уже с $\theta < 0$, т.е. к неравенству (2.28), гл. 3, где полагаем $\theta = (p-2)/p$, $a_i = |y_i - f_i|^{p-2}$, $B_i = g_i g_i^T$. Получим

$$\begin{aligned} \sum |y_i - f_i|^{p-2} g_i g_i^T &\geq (\sum |y_i - f_i|^p)^{\frac{p-2}{p}} (\sum (g_i g_i^T)^2)^{\frac{2}{p}} = \\ &= Q_p^{p-2} (\sum (g_i g_i^T)^2)^{\frac{2}{p}}. \end{aligned}$$

Собирая вместе полученные оценки, приходим к неравенству

$$\frac{1}{p} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} > Q_p^{\frac{p-2}{p}} A - Q_p^{\frac{p-1}{p}} B, \quad (3.12)$$

где

$$A = A(\alpha) = (p-1) (\sum (g_i g_i^T)^2)^{\frac{2}{p}}, \quad B = B(\alpha) = (\sum |H_i|^p)^{\frac{1}{p}}.$$

На основании (3.12) можно положить

$$(Q_p)_{LC} = \inf_{\alpha} \lambda_{\min}^p (A(\alpha) B^{-1}(\alpha)).$$

Тогда на множестве $S((Q_p)_{LC})$ для всех $\alpha: y_i \neq f_i(\alpha), i = 1, \dots, n$, имеем $\partial^2 Q_p / \partial \alpha^2 > 0$, где $1 < p < 2$.

Вычисление уровня локальной одноэкстремальности. Допустим, все ранее выдвинутые предположения относительно свойств функций V и f выполнены. Как следует из теоремы 3.1, для вычисления уровня локальной одноэкстремальности D -функции достаточно найти такой уровень функции F_{LU} , для которого из условий $F(x_0) < F_{LU}$, $\partial F(x_0) / \partial x = 0$ следует положительная определенность матрицы $\partial^2 F(x_0) / \partial x^2$. Это означает, что ранее выведенные оценки сверху и снизу для $\partial^2 F / \partial x^2$ те-

перь необходимо получать в условиях дополнительного ограничения $\partial F/\partial x = 0$. Чтобы идейную сторону не затемнять техническими деталями, начнем со случая $m = 1$. Тогда (для простоты аргумент в скобках опускаем):

$$\frac{d^2 F}{dx^2} = \dot{f}^T \frac{\partial^2 V}{\partial f^2} \dot{f} + \sum \frac{\partial V}{\partial f_i} \ddot{f}_i. \quad (3.13)$$

Оценим снизу это выражение при условии

$$\frac{dF}{dx} = \sum \frac{\partial V}{\partial f_i} \dot{f}_i = 0. \quad (3.14)$$

Видимо, в каждом конкретном случае можно предложить свои, более эффективные оценки. Мы рассмотрим один из возможных подходов к получению подобных оценок.

Оценим сначала сумму в выражении (3.13) снизу при условии (3.14). На основе неравенства Коши – Буняковского в условиях линейного ограничения (2.17), гл. 3 получаем

$$\sum \frac{\partial V}{\partial f_i} \ddot{f}_i \geq - \left\| \frac{\partial V}{\partial f} \right\| \left(\|\ddot{f}\|^2 - \frac{(\dot{f}, \ddot{f})^2}{\|\dot{f}\|^2} \right)^{1/2}. \quad (3.15)$$

Далее будем считать оценки (3.8) и (3.9) выполненными. Тогда получаем следующую оценку снизу для второй производной функции F при условии, что $F'(x) = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{dx^2} &\geq T(F(x)) \dot{f}^T(x) W_0 \dot{f}(x) - \\ &- \varphi(F(x)) \left(\|\ddot{f}(x)\|^2 - \frac{(\dot{f}(x), \ddot{f}(x))^2}{\|\dot{f}(x)\|^2} \right)^{1/2}, \quad x \in R^1. \end{aligned}$$

Пусть U такая постоянная, что

$$U \leq \frac{\dot{f}^T(x) W_0 \dot{f}(x)}{\left(\|\ddot{f}(x)\|^2 - \frac{(\dot{f}(x), \ddot{f}(x))^2}{\|\dot{f}(x)\|^2} \right)^{1/2}} \quad \forall x \in R^1.$$

Тогда в качестве искомого уровня локальной выпуклости можно взять

$$F_{LU} = \left(\frac{\varphi}{T} \right)^{-1} (U).$$

Такой выбор гарантирует нам то, что для всех $x: F(x) < F_{LU}$ вторая производная $d^2 F/dx^2$ функции (3.1) на всех стационарных точках будет положительно определена, т.е. на каждой компоненте множества уровня $S_{LU} = \{x: F(x) < F_{LU}\}$ уравнение $dF/dx = 0$ имеет единственный корень.

Необходимым условием предложенного способа вычисления уровня локальной выпуклости является наличие оценок вида (3.8) и (3.9). Можно пойти по другому пути, заменив их оценками другого типа.

А именно, с учетом неравенства (3.15) оценка снизу для d^2F/dx^2 при условии $dF/dx = 0$ может быть записана как

$$\frac{d^2F}{dx^2} \geq \dot{f}^\tau \frac{\partial^2 V(f)}{\partial f^2} \dot{f} - \left\| \frac{\partial V}{\partial f} \right\| \left(\|\dot{f}\|^2 - \frac{(\dot{f}, \ddot{f})}{\|\dot{f}\|^2} \right)^{1/2}.$$

Очевидно, $d^2F/dx^2 > 0$, если

$$\left\| \frac{\partial V(f)}{\partial f} \right\| \frac{\|\dot{f}\|}{\dot{f}^\tau \frac{\partial^2 V}{\partial f^2} \dot{f}} \leq \frac{\|\dot{f}\|^3}{(\|\dot{f}\|^2 \|\ddot{f}\|^2 - (\dot{f}, \ddot{f})^2)^{1/2}}. \quad (3.16)$$

Обозначим

$$r_f = \inf_x \frac{\|\dot{f}(x)\|^3}{[\|\dot{f}(x)\|^2 \|\ddot{f}(x)\|^2 - (\dot{f}(x), \ddot{f}(x))^2]^{1/2}} \quad (3.17)$$

– минимальный радиус кривизны кривой $f(x)$;

$$R_V(V_0) = \max_{V(e) = V_0} \left[\left\| \frac{\partial V}{\partial e} \right\| \left(\max_{\nu \perp \frac{\partial V}{\partial e}} \frac{\|\nu\|^2}{\nu^\tau \frac{\partial^2 V}{\partial e^2} \nu} \right) \right] \quad (3.18)$$

– максимальный радиус кривизны множества уровня $S(V_0) = \{e \in R^n: V(e) = V_0\}$ (см. ниже). Тогда при условии, что $R_V(\cdot)$ есть неубывающая функция, в качестве уровня локальной одноэкстремальности D -функции при $n = 1$ можно взять корень уравнения $R_V(V_0) = r_f$ относительно V_0 , который обозначим $F'_{LU} = R_V^{-1}(r_f)$. Как было ранее оговорено, матрица $\partial^2 V / \partial e^2$ положительно определена и непрерывна по e , множество $S(V_0)$ компактно, значит, $R_V(V_0) < \infty$. Очевидно, можно брать наибольший корень уравнения $R_V(V_0) = r_f$. По определению тогда для любого $x \in R^1: F(x) < F'_{LU}$, $dF/dx = 0$ имеем $d^2F/dx^2 > 0$. По теореме 1.1, если к тому же $F'_{LU} < \bar{F}_E$, то на любой компоненте множества $S_{US} = \{x \in R^1: F(x) < F'_{LU}\}$ уравнение $dF/dx = 0$ имеет единственное решение, т.е. функция локально одностационарна. Разумеется, можно ограничиться оценкой снизу для (3.17) и оценкой сверху для (3.18). В случае суммы квадратов, т.е. когда $V(e) = \|e\|^2$, имеем $\|\partial V / \partial e\| = 2\|e\|$, $\partial^2 V / \partial e^2 = 2I$. Поэтому $R_V(V_0) = \|e\| = \sqrt{V}$, и этот критерий совпадает с ранее полученным (см. теорему 1.2). Здесь вместо оценок (3.8) и (3.9) мы воспользовались величинами (3.16) и (3.17) или их оценками соответственно снизу и сверху.

Построенный критерий локальной одноэкстремальности для D -функции имеет наглядную геометрическую интерпретацию, похожую на интерпретацию в случае суммы квадратов: для того чтобы на множестве уровня $V(f(e)) \leq V_0$ функция была одностационарной, достаточно, чтобы минимальный радиус кривизны кривой $f: R^1 \rightarrow R^n$ был меньше максимального радиуса кривизны поверхности уровня $\{V(e_0) = V_*\}$ для любого $V_* < V_0$ в любой точке поверхности.

Покажем, что подобная интерпретация имеет место. Действительно выражение под знаком \inf справа в (3.17) есть не что иное, как радиус кривизны кривой $f: R^1 \rightarrow R^n$ (см. § 1, гл. 3), r_f – нижняя граница этой величины. Теперь определим радиус кривизны поверхности уровня функции V :

$$J = J(V_*) = \{ e \in R^n: V(e) = V_* \}, \quad (3.19)$$

где $V_* > \min V(e)$, $e \in R^n$. Пусть $e(\lambda)$ – кривая в R^n , лежащая на J , т.е.

$$V(e(\lambda)) = V_*, \quad \lambda \in R^1. \quad (3.20)$$

Обозначим $e_0 = e(0)$, $\nu = de(0)/d\lambda$ – вектор, лежащий в касательном пространстве (3.19), т.е. $\nu \perp \partial V(e_0)/\partial e$, что следует из дифференцирования (3.20) по λ . По определению минимальной кривизны поверхности уровня J называется минимальная кривизна кривых, лежащая на J , вторая производная которых ортогональна касательному пространству в e_0 . Дважды дифференцируя (3.20) по λ и обозначая

$$\frac{\partial V(e_0)}{\partial e} = g, \quad \frac{\partial^2 V(e_0)}{\partial e^2} = W, \quad \ddot{e} = \frac{d^2 e(0)}{d\lambda^2}, \quad e = \frac{de(0)}{d\lambda} = \nu,$$

получим

$$(g, \ddot{e}) + \nu^T W \nu = 0. \quad (3.21)$$

Условие ортогональности \ddot{e} касательному пространству может быть записано как $\ddot{e} = \kappa g$, $\kappa \in R^1$, поэтому, как следует из (3.21), получаем $\kappa = -\nu^T W \nu / \|g\|^2$. Радиус кривизны такой кривой равен $R_V(\nu) = \|\nu\|^2 \|g\| / \nu^T W \nu$. По определению тогда (максимальным) радиусом кривизны поверхности (3.19) в точке $e_0 \in J(V_*)$ будет

$$R_V(e_0, V_*) = \left\| \frac{\partial V}{\partial e} \right\| \left(\max_{\left(\nu, \frac{\partial V}{\partial e} \right) = 0} \frac{\|\nu\|^2}{\nu^T \frac{\partial^2 V}{\partial e^2} \nu} \right).$$

Максимальным радиусом кривизны поверхности множества уровня $S(V_0) = \{ e \in R^n: V(e) = V_0 \}$ поэтому будет

$$R_V(V_0) = \max_{V_* = V_0} R_V(e, V_*),$$

что совпадает с ранее полученным выражением. Геометрическая формулировка критерия локальной одноэкстремальности установлена.

Коротко остановимся на вопросе вычисления максимального радиуса кривизны множества уровня (3.18), который сводится к вычислению

$$\eta = \max_{\nu \perp g} \frac{\|\nu\|^2}{\nu^T W \nu}, \quad (3.22)$$

где W – положительно определенная матрица $n \times n$, $g \in R^n$, $g \neq 0$. Легко видеть, что

$$\lambda_1(W) \leq \eta^{-1} = \min_{\nu \perp g} \frac{\nu^T W \nu}{\|\nu\|^2},$$

где $\lambda_1(W)$ – минимальное собственное число матрицы W . Для точного вычисления η заметим, что максимизацию в (3.22) достаточно проводить по гиперплоскости $\nu' \in L_g = \{x \in R^n: (x, g) = 0\}$. Пусть $\nu \in R^n$, тогда $\nu' = (I - gg^T/\|g\|^2)\nu$ – проекция ν на L_g , поэтому ограничение $\nu \perp g$ может быть снято за счет перехода к вектору ν' . Другими словами,

$$\eta = \max_{\nu} \frac{\nu^T \left(I - \frac{gg^T}{\|g\|^2} \right) \nu}{\nu^T \left(I - \frac{gg^T}{\|g\|^2} \right) W \left(I - \frac{gg^T}{\|g\|^2} \right) \nu} = \lambda_{\min}^{-1}(A, B),$$

где $\lambda_{\min}(A, B)$ – минимальное обобщенное собственное число матриц

$$A = \left(I - \frac{gg^T}{\|g\|^2} \right) W \left(I - \frac{gg^T}{\|g\|^2} \right), \quad B = I - \frac{gg^T}{\|g\|^2},$$

т.е. минимальный корень уравнения $|A - \lambda B| = 0$. Поскольку $\|\nu'\|^2 \leq \|\nu\|^2$, то получаем следующую оценку для η^{-1} :

$$\eta^{-1} \leq \lambda_{\min}(A) = \lambda_{\min} \left(I - \frac{gg^T}{\|g\|^2} \right) W \left(I - \frac{gg^T}{\|g\|^2} \right). \quad (3.23)$$

Теперь рассмотрим многомерный случай ($m > 1$) D -функции. Домножая (3.6) на p^T слева, а справа на $p \in R^m$, $p \neq 0$, получим

$$p^T \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} p = (Gp)^T W(Gp) + \sum \frac{\partial V}{\partial f_i} h_i(p), \quad (3.24)$$

где $h_i = h_i(p, x) = p^T H_i(x)p$, $h' = (h_1, \dots, h_n)^T$. На основе обобщения неравенства Коши – Буняковского в условиях векторного линейного ограничения (2.31), гл. 3 найдем оценку снизу для второй суммы в (3.24) при условии, что

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \sum \frac{\partial V}{\partial f_i} g_i = 0.$$

Получим

$$\sum \frac{\partial V}{\partial f_i} h_i \geq - \left\| \frac{\partial V}{\partial f} \right\| \left[h^T (I - G(G^T G)^{-1} G^T) h \right]^{1/2}. \quad (3.25)$$

Таким образом, приходим к следующему критерию локальной одноэкстремальности D -функции, который является обобщением теоремы 1.3.

Теорема 3.2. Пусть для D -функции (3.1) имеют место оценки (3.8) и (3.9). Пусть $U > 0$ такое, что

$$p^T G^T(x) W(x) G(x) p - U [h^T(p, x) (I - G(x) (G^T(x) G(x))^{-1} \times \\ \times G^T(x)) h(p, x)] \geq 0 \quad \forall x, p \in R^m.$$

Тогда в качестве уровня локальной одноэкстремальности D -функции мож-

но взять значение

$$F'_{LU} = \left(\frac{\varphi}{T} \right)^{-1} (U). \quad (3.26)$$

Напомним, что для уровня локальной одноэкстремальности F'_{LU} имеет место следующее утверждение: на каждой компоненте множества $S_{LU} = \{x \in R^m: F(x) < F'_{LU}\}$ существует единственный локальный минимум $F(x)$ (см. § 1, гл. 3). Запись (3.26) означает, что $\varphi(F'_{LU})/T(F'_{LU}) = U$.

Можно получить более простую, но более низкую оценку уровня локальной одноэкстремальности, воспользовавшись неравенством (2.31), гл. 3:

$$\Sigma \frac{\partial V}{\partial f_i} H_i \geq - \left\| \frac{\partial V}{\partial f_i} \right\| \left\| \left[\Sigma H_i^2 - \frac{1}{\Sigma \|g_i\|^2} \Sigma H_i g_i \Sigma g_i^T H_i \right]^{1/2} \right\|.$$

Теорема 3.3. Пусть для D -функции (3.1) имеют место оценки (3.8) и (3.9). В качестве уровня локальной одноэкстремальности D -функции можно взять

$$F''_{LU} = \left(\frac{\varphi}{T} \right)^{-1} (\lambda_*),$$

где

$$0 < \lambda_* \leq \lambda_{\min} \{ (G^T(x) W(x) G(x)) [\Sigma H_i^2(x) - (\Sigma \|g_i(x)\|^2)^{-1} \times \\ \times \Sigma H_i(x) g_i(x) \Sigma g_i^T(x) H_i(x)]^{-1/2} \} \quad \forall x \in R^m.$$

Данная теорема является обобщением теоремы 1.4. Разумеется, вместо λ_* можно взять любую оценку снизу для F''_{LU} .

Как и в одномерном случае, можно пойти по другому пути, который имеет наглядную геометрическую интерпретацию. А именно, с учетом (3.25)

$$p^T \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} p \geq p^T G^T \frac{\partial^2 V}{\partial f^2} G p - \left\| \frac{\partial V}{\partial f} \right\| [h^T (I - G(\widehat{G}^T G)^{-1} G^T) h]^{1/2}.$$

Поэтому квадратичная форма слева будет положительно определена, если

$$\left\| \frac{\partial V}{\partial f} \right\| \frac{p^T G^T G p}{p^T G^T \frac{\partial^2 V}{\partial f^2} G p} < \frac{p^T G^T G p}{[h^T (I - G(G^T G)^{-1} G^T) h]^{1/2}}.$$

Обозначим

$$R_f = \inf_{x \in R^m} \min_{p \neq 0} \frac{p^T G^T(x) G(x) p}{[h^T(p) (I - G(x) (G^T(x) G(x))^{-1} G^T(x)) h(p)]^{1/2}}. \quad (3.27)$$

Заметим теперь, что

$$\max_{p: \frac{\partial F}{\partial x} = 0} \frac{p^T G^T G p}{p^T G^T W G p} \leq \max_{r \perp \frac{\partial V}{\partial f}} \frac{\|r\|^2}{r^T W r}.$$

С учетом этого замечания может быть сформулирован следующий еще один критерий локальной одноэкстремальности D -функции.

Теорема 3.4. Допустим, для функции $V(e)$ в (3.1) максимальный радиус кривизны $R_V(V_0)$ – возрастающая функция уровня V_0 – см. (3.18). Тогда в качестве уровня локальной одноэкстремальности D -функции можно взять

$$F_{LU} = R_V^{-1}(R_f),$$

где R_f – минимальный радиус кривизны поверхности $f(x)$, задаваемый формулой (3.27).

Как и прежде, можно ограничиться оценками сверху для R_V , оценками снизу для R_f и F_{LU} . Так, в (3.27) можно снять минимизацию по p , воспользовавшись неравенством (2.34) из гл. 3. Тогда приходим к оценке

$$R_f \geq \inf_x \lambda_{\min} \{ G^T(x) G(x) [\Sigma H_i^2(x) - (\Sigma \|g_i(x)\|^2)^{-1} \Sigma H_i(x) g_i(x) \Sigma g_i^T(x) H_i(x)]^{-1/2} \}, \quad (3.28)$$

и вместо R_f в теореме 3.4 можно взять правую часть неравенства (3.28).

Продолжим рассмотрение примера с суммой модулей p -х степеней $Q_p(\alpha)$. Для начала построим аналог неравенства (3.10). На основе неравенства (2.26), гл. 3 с учетом того, что $2(p-1) < p$, получаем

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\partial V}{\partial e} \right\| &= p (\Sigma |e_i|^{2(p-1)})^{1/2} \leq \\ &\leq pn^{\frac{2-p}{p}} \left[(\Sigma |e_i|^p)^{\frac{2(p-1)}{p}} \right]^{1/2} = pn^{\frac{2-p}{p}} \frac{p-1}{Q_p^p} \end{aligned} \quad (3.29)$$

В данном случае $\varphi(V) = pn^{\frac{2-p}{p}} V^{\frac{p-1}{p}}$. Оценка снизу первого слагаемого гессиана Q_p была построена ранее. Объединяя оценки (3.29), (3.11), получаем следующую оценку снизу для гессиана:

$$\frac{1}{p} \frac{\partial^2 Q_p}{\partial \alpha^2} \geq Q_p^{\frac{p-2}{p}} A - Q_p^{\frac{p-1}{p}} D, \quad \frac{\partial Q_p}{\partial \alpha} = 0,$$

где

$$D = D(\alpha) = pn^{\frac{2-p}{p}} [\Sigma H_i^2 - (\Sigma \|g_i\|^2)^{-1} \Sigma H_i g_i \Sigma g_i^T H_i]^{-1/2}.$$

Таким образом, по теореме 3.3 в качестве уровня локальной одноэкстремальности для $Q_p(\alpha)$ можно взять

$$(Q_p)_{LU} = \inf_{\alpha} \lambda_{\min}^p(A(\alpha)D^{-1}(\alpha)).$$

Теперь найдем уровень локальной одноэкстремальности для (3.2) при $1 < p < 2$ на основе теоремы 3.4. Для этого необходимо найти значение

(3.18) или его оценку сверху. Для функции (3.2)

$$V(e) = \sum |e_i|^p, \quad \left\| \frac{\partial V}{\partial e} \right\| = p (\sum |e_i|^{2(p-1)})^{1/2},$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial e_i^2} = p(p-1) |e_i|^{p-2}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Поэтому для нахождения значения (3.18) необходимо решить задачу оптимизации

$$\sum v_i^2 / \sum v_i^2 |e_i|^{p-2} \Rightarrow \max \quad (3.30)$$

при условии

$$\sum v_i |e_i|^{p-1} \text{sign}(e_i) = 0. \quad (3.31)$$

Поскольку при $e_i = 0$ значение (3.30) обращается в 0, формально в (3.30) можно рассматривать значения $e_i = 0$. Для получения грубой оценки сверху для (3.30) можно игнорировать ограничение (3.31); тогда

$$\sum v_i^2 / \sum v_i^2 |e_i|^{p-2} \leq [\min \{ |e_i|^{p-2}, i = 1, \dots, n \}]^{-1} = |e|_{\max}^{2-p}$$

и

$$R_V(V_0) \leq p \max_{\sum |e_i|^p = V_0} (\sum |e_i|^{2(p-1)})^{1/2} |e|_{\max}^{2-p}.$$

Но при $\sum |e_i|^p = V_0$ имеем $|e|_{\max}^{2-p} \leq V^{(2-p)/p}$. Поэтому с учетом неравенства (3.29) окончательно получаем

$$R_V(V_0) \leq p n^{1/p} V_0^{1/p}. \quad (3.32)$$

Обозначим правую часть неравенства (3.28) через λ_* , тогда за уровень локальной одноэкстремальности $Q_p(\alpha)$ по теореме 3.4 можно взять

$$(Q_p)_{LU} = \frac{1}{p} n^{1/p} \lambda_*^{1/p}.$$

Для получения более высокого значения $(Q_p)_{LU}$ необходимо получить более точную оценку для решения оптимизационной задачи (3.30) при ограничении (3.31). Для этого в свою очередь можно воспользоваться формулой (3.23).

Вычисление уровня глобальности и выпуклости. Нашей ближайшей задачей является обобщение теорем § 2 на случай декомпозиционных функций. Нам потребуется одно обобщение леммы 2.1.

Лемма 3.1. Пусть $f(s)$ – дважды непрерывно дифференцируемая, натурально параметризованная кривая в R^n , $0 \leq s \leq \bar{s}$. Пусть $V(e)$ – дважды непрерывно дифференцируемая функция, $\partial^2 V / \partial e^2 > 0$, $e \in R^n$, $V_0 > \min V(e) > -\infty$. Известно, что $V(f(0)) = V(f(\bar{s})) = V_0$, но $V(f(s)) > V_0$, $0 < s < \bar{s}$, $f(0) \neq f(\bar{s})$. Пусть $R_V(V_0)$ – максимальный радиус кривизны поверхности уровня $S(V_0) = \{e \in R^n: V(e) = V_0\}$, рассчитывае-

мый по формуле (3.18). Тогда

$$\int_0^{\bar{s}} k(s) ds > \|f(\bar{s}) - f(0)\| / R_V(V_0),$$

где $k(s)$ – кривизна кривой, \bar{s} – длина дуги кривой.

Доказательство обобщает доказательство леммы 2.1. Обозначим $f(0) = A_1 \neq A_2 = f(\bar{s})$, причем $\|\dot{f}(s)\| = 1, k(s) = \|\dot{f}(s)\|$. Как и раньше, рассмотрим функцию $v_1(s) = (\dot{f}(s), \dot{f}(0))$. Пусть γ_1 – нетупой угол между касательной плоскостью к поверхности уровня $I(V_0) = \{e \in R^n: V(e) = V_0\}$ в точке A_1 и вектором $A_2 - A_1$. Он определяется как наименьший угол между $A_2 - A_1$ и вектором u из касательного подпространства. Нетрудно видеть, что

$$\cos \gamma_1 = \left(1 - \frac{(A_2 - A_1, g_1)^2}{\|A_2 - A_1\|^2 \|g_1\|^2}\right)^{1/2}, \quad (3.33)$$

где $g_1 = \partial V(A_1) / \partial e$. Введем теперь функцию $v_1(s) = (\dot{f}(s), \dot{f}(0))$; докажем, что существует такое $s_1^*, 0 \leq s_1^* \leq \bar{s}$, что $v_1(s_1^*) \leq \cos \gamma_1$. Допустим противное, т.е. $v_1(s) > \cos \gamma_1$. Интегрируя это неравенство, как и при доказательстве леммы 2.1, получим

$$\cos(A_2 - A_1, \dot{f}(0)) = \frac{(A_2 - A_1, \dot{f}(0))}{\|A_2 - A_1\|} > \cos \gamma_1. \quad (3.34)$$

Докажем, что в условиях леммы этого быть не может. Сначала заметим, что $(\dot{f}(0), g_1) > 0$. Действительно, в противном случае для $T(s) = V(f(s))$ мы бы имели $T'(0) = (g_1, \dot{f}(0)) < 0$, а значит, нашлись бы достаточно малые $s > 0$, для которых $V(f(s)) < 0$, что противоречит условию леммы. Найдем

$$\max_{\substack{\|u\| = 1 \\ (g_1, u) \geq 0}} (u, A_2 - A_1) = \max_{(g_1, u) \geq 0} \frac{(u, A_2 - A_1)}{\|u\|}. \quad (3.35)$$

Заметим, что

$$(g_1, A_2 - A_1) = \left(\frac{\partial V(A_1)}{\partial e}, A_2 - A_1\right) < 0$$

в силу строгой выпуклости функции $V(e)$ (см., например, [11, 24, 43]). Поэтому (3.35) достигается на границе. Пользуясь обобщением неравенства Коши – Буняковского (2.17), гл. 3, получаем

$$(u, A_2 - A_1) \leq \|u\| \left(\|A_2 - A_1\|^2 - \frac{(A_2 - A_1, g_1)^2}{\|g_1\|^2}\right)^{1/2},$$

что приводит к противоречию с (3.33).

Аналогично можно рассмотреть функцию $v_2(s) = (\dot{f}(s), \dot{f}(\bar{s}))$, рассматривая кривую в противоположном направлении. Найдем $s_2^* \in [0, \bar{s}]$,

для которой $v_2(s_2^*) < \cos \gamma_2$, где

$$\cos \gamma_2 = \left(1 - \frac{(A_2 - A_1, g_2)^2}{\|A_2 - A_1\|^2 \|g_2\|^2} \right)^{1/2} \quad (3.36)$$

– косинус острого угла между вектором $A_1 - A_2$ и касательной плоскостью к $I(V_0)$ в точке A_2 , $g_2 = \partial V(A_2)/\partial e$. Совершенно аналогично докажем, что можно выбрать $s_1^* \leq s_2^*$. Тогда

$$\begin{aligned} \int_{s_1^*}^{s_2^*} k(s) ds &\geq \|f'(s_2^*) - f'(0)\| + \|f'(\bar{s}) - f'(s_1^*)\| \geq \\ &\geq \sqrt{2} [(1 - \cos \gamma_1)^{1/2} + (1 - \cos \gamma_2)^{1/2}], \end{aligned}$$

где $\cos \gamma_1$ и $\cos \gamma_2$ задаются выражениями (3.33) и (3.36). Воспользуемся теперь неравенством (2.5'), полагая

$$\frac{w_1}{2} = \frac{(A_1 - A_2, g_1)}{\|A_1 - A_2\| \|g_1\|}, \quad \frac{w_2}{2} = \frac{(A_2 - A_1, g_2)}{\|A_2 - A_1\| \|g_2\|}.$$

Тогда

$$\sqrt{2} [(1 - \cos \gamma_1)^{1/2} + (1 - \cos \gamma_2)^{1/2}] \geq \frac{\left(A_1 - A_2, \frac{g_1}{\|g_1\|} - \frac{g_2}{\|g_2\|} \right)}{\|A_1 - A_2\|}. \quad (3.37)$$

Осталось показать, что правая часть неравенства (3.37) не меньше $\|A_1 - A_2\|/R_V(V_0)$. Для этого рассмотрим следующую функцию действительного переменного:

$$U(\lambda) = \frac{\left(A_1 - A_2, \frac{\partial V}{\partial e} (\lambda A_1 + (1 - \lambda) A_2) \right)}{\left\| \frac{\partial V}{\partial e} (\lambda A_1 + (1 - \lambda) A_2) \right\|}, \quad 0 \leq \lambda \leq 1.$$

Обозначим для простоты

$$g(\lambda) = \frac{\partial V}{\partial e} (\lambda A_1 + (1 - \lambda) A_2), \quad W(\lambda) = \frac{\partial^2 V}{\partial e^2} (\lambda A_1 + (1 - \lambda) A_2).$$

Найдем производную ($W = W(\lambda)$):

$$\frac{dU}{d\lambda} = \frac{1}{\|g\|} (A_1 - A_2)^T W(A_1 - A_2) - \frac{1}{\|g\|^3} (A_1 - A_2)^T g g^T W(A_1 - A_2).$$

Тогда по теореме о среднем ($g_2 = g(0)$, $g_1 = g(1)$):

$$\begin{aligned}
 U(1) - U(0) &= \left(A_1 - A_2, \frac{g_1}{\|g_1\|} - \frac{g_2}{\|g_2\|} \right) = \frac{dU(\xi)}{d\lambda} \geq \\
 &\geq \min_{0 < \lambda < 1} \frac{dU}{d\lambda} = \min_{\lambda} \frac{\|A_1 - A_2\|^2}{\|g(\lambda)\|} \times \\
 &\times \left[\frac{(A_1 - A_2)^T W(\lambda) (A_1 - A_2)}{\|A_1 - A_2\|^2} - \frac{(A_1 - A_2)^T g(\lambda) g^T(\lambda) W(\lambda) (A_1 - A_2)}{\|g(\lambda)\|^2 \|A_1 - A_2\|^2} \right] \geq \\
 &\geq \min_{\lambda} \frac{\|A_1 - A_2\|^2}{\|g(\lambda)\|} \left[\min_{\substack{\|v\|=1 \\ v \perp A_1 - A_2}} \left(v^T W(\lambda) v - \frac{v^T g(\lambda) g^T(\lambda) W(\lambda) v}{\|g(\lambda)\|^2} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Обозначим $P(\lambda) = I - g(\lambda)g^T(\lambda)/\|g(\lambda)\|^2$. Как известно, это идемпотентная матрица $n \times n$, ее собственные значения равны 0 или 1. Поэтому для выражения в квадратных скобках получаем

$$\begin{aligned}
 \min_{\|v\|=1} v^T P(\lambda) W(\lambda) v &= \\
 &= \lambda_{\min}(P(\lambda) W(\lambda)) \geq \lambda_{\min}(P(\lambda) W(\lambda) P(\lambda)).
 \end{aligned}$$

Но с учетом неравенства (3.23) окончательно получаем

$$\begin{aligned}
 \int_s^{s_2} k(s) ds &\geq \frac{U(1) - U(0)}{\|A_1 - A_2\|} \geq \\
 &\geq \|A_1 - A_2\| \left\{ \max_{0 < \lambda < 1} \|g(\lambda)\| \left\| \max_{v \perp g(\lambda)} \frac{\|v\|^2}{v^T W(\lambda) v} \right\|^{-1} \right\} \geq \frac{\|A_1 - A_2\|}{R_V(V_0)},
 \end{aligned}$$

поскольку в силу выпуклости $S(V_0)$ для любых $0 \leq \lambda \leq 1$ имеем $e = \lambda A_1 + (1 - \lambda) A_2 \in S(V_0)$. Этим доказательство леммы закончено.

З а м е ч а н и е. Как следует из доказательства леммы,

$$R_V(V_0) \geq \frac{\|A_1 - A_2\|^2}{\left(A_1 - A_2, \frac{g_1}{\|g_1\|^2} - \frac{g_2}{\|g_2\|^2} \right)}$$

для любых $A_1, A_2: V(A_1) = V(A_2) = V_0$, $g_j = \partial V(A_j)/\partial e$, $j = 1, 2$.

Следующая теорема обобщает теоремы 2.1 и 2.4 на случай D -функций.

Теорема 3.5. Допустим, для функции $V(e)$ в (3.1) максимальный радиус кривизны $R_V(V_0)$ (3.18) есть возрастающая функция уровня V_0 . Положим

$$F_{US} = R_V^{-1}(R_f/\bar{p}), \quad (3.38)$$

$$F_{CC} = \min(F_{US}, F_{LC}), \quad (3.39)$$

$$F_C = R_V^{-1}(R_f/\bar{P}), \quad (3.40)$$

где \bar{p} – интегральная, а \bar{P} – интегральная линейная кривизна поверхности $f(x)$ (см. § 2), R_f – минимальный радиус кривизны поверхности (3.27),

F_{LC} – уровень локальной выпуклости. Допустим, $F_{US} < \bar{F}_E$. Тогда множество уровня $S(F_{US})$ связно и на нем $F(x)$ имеет единственный локальный минимум, совпадающий с глобальным. На множестве $S(F_{CC})$ к тому же $F(x)$ локально выпукла, в частности, $\partial^2 F / \partial x^2 > 0$. Множества $S(F_{CC})$ и $S(F_C)$ выпуклы.

Доказательство в принципе мало отличается от доказательства теоремы 2.1 и теоремы 2.4. Рассмотрим сначала случай $m = 1$. Докажем прежде всего, что множество $S(F_{US})$ связно, т.е. представляет собой отрезок-прямой. Для этого достаточно показать, что если для кривой $f(s)$, $s_1 \leq s \leq s_2$, имеем $f(s_1) \in S(F_{US})$, $f(s_2) \in S(F_{US})$, то $f(s) \in S(F_{US})$ для всех $s_1 \leq s \leq s_2$. Допустим противное, пусть существует $s_*: f(s_*) \notin S(F_{US})$, $s_1 \leq s_* \leq s_2$, т.е. $V(f(s_*)) \geq F_{US}$. Очевидно, в этом случае найдутся такие $s'_1 < s'_* < s'_2$, $\max(V(f(s'_1)), V(f(s'_2))) < F^* < F_{US}$, что

$$V(f(s'_1)) = V(f(s'_2)) = F^*, \quad V(f(s_*)) > F^* \quad \forall s \in (s'_1, s'_2).$$

Натурально параметризуем кривую и применим к отрезку кривой $f(s)$, $s'_1 \leq s \leq s'_2$, лемму 3.1. Тогда

$$\int_0^{\bar{s}} k(s) ds > \frac{\|f(\bar{s}) - f(0)\|}{R_V(F^*)} > \frac{\|f(\bar{s}) - f(0)\|}{R_V(F_{US})},$$

где \bar{s} – длина дуги $f(s)$. По теореме о среднем существует такое $0 \leq \tilde{s} \leq \bar{s}$, что

$$\int_0^{\bar{s}} k(s) ds = \bar{s} k(\tilde{s}) > \frac{\|f(\bar{s}) - f(0)\|}{R_V(F_{US})}.$$

Поэтому

$$k(\tilde{s}) > \frac{\|f(\bar{s}) - f(0)\|}{\bar{s} R_V(F_{US})} \geq \frac{1}{\bar{p} R_V(F_{US})}. \quad (3.41)$$

Но по определению F_{US} из (3.38) имеем $R_V(F_{US}) = R_f / \bar{p}$, поэтому с учетом (3.41) получаем

$$k(\tilde{s}) > R_f^{-1} = \sup_s k(s)$$

– противоречие. Значит, кривая $f(s)$ целиком лежит в $S(F_{US})$, если ее концы лежат в $S(F_{US})$, а это и означает связность множества $S(F_{US})$.

Для доказательства теоремы в многомерном случае, как и в случае теоремы 2.1, достаточно соединить точки $f(x_1)$ и $f(x_2)$ геодезической на f . Существование локального минимума на $S(F_{US})$ обеспечивается условием $F_{US} < \bar{F}_E$, где \bar{F}_E задается формулой (1.1), гл. 1, а его единственность и совпадение с глобальным минимумом следуют из теоремы 1.1.

Дословно повторяя доказательство теоремы 2.4, убеждаемся, что множество $S(R_f^{-1}(R_f / \bar{P}))$ выпукло; поскольку $F_C \leq F_{LC}$, то $\partial^2 F / \partial x^2 > 0$ на $S(F_C)$. Выпуклость множества $S(F_{CC})$ следует из леммы 2.2. Теорема полностью доказана.

З а м е ч а н и е. Если x_* – точка локального минимума $F(x)$, то вместо \bar{p} и \bar{P} в формулах (3.38) и (3.40) можно рассматривать $\bar{p}(x_*)$ и $\bar{P}(x_*)$ по

аналогии с $\bar{p}(a)$ и $\bar{P}(a)$ (см. § 2). Тогда, если $R_V(F(x_*)) < R_f/\bar{p}(x_*)$, то x_* — точка глобального минимума $F(x)$. Если $\hat{R}_V(F(x_*)) < R_f/\hat{P}(x_*)$, то к тому же множество $S(R_V^{-1}(R_f/\hat{P}(x_*)))$ является звездчатым относительно x_* .

Для иллюстрации доказанной теоремы продолжим пример с $Q_p(\alpha)$. В данном случае оценкой сверху для R_V может служить (3.32). Поэтому, если найдены оценки снизу \hat{R}_f для R_f и оценка сверху \hat{p} для \bar{p} , то в качестве F_{US} для функции (3.2) при $1 < p < 2$ можно взять

$$F_{US} = \frac{1}{p} n^{\frac{p-2}{p}} \left(\frac{\hat{R}_f}{\hat{p}} \right)^{1/p}$$

§ 4. Некоторые подходы к построению критериев глобальности в общем случае

Развитый в предыдущих параграфах подход к построению критериев совпадения локального минимума с глобальным ориентирован на сумму квадратов. Как строить подобные критерии (глобальности) для функций, не совпадающих с суммой квадратов? Некоторые подходы к построению критериев глобальности для общего класса функций предлагаются ниже (см. также [33]). Они применимы, если: а) известно множество уровня, на котором минимизируемая функция локально одноэкстремальна, б) известен мажорирующий или минорирующий одноэкстремальный функционал. Ограниченный снизу функционал $M(x)$ называем *одноэкстремальным на R^m* , если он имеет единственный локальный минимум $M(x_*) < \bar{M}_E$, где \bar{M}_E — нижняя грань $M(x)$ на бесконечности. Как следует из леммы 1.1, для любого $M^* < \bar{M}_E$ множество уровня $S(M^*) = \{x \in R^m: M(x) \leq M^*\}$ компактно и связно.

Теорема 4.1 (о мажорирующем функционале). Пусть $F(x)$ — непрерывная ограниченная снизу на R^m функция, а $F_{LU} < \bar{F}_E$ таково, что на множестве

$$S_{LU} = \{x \in R^m: F(x) \leq F_{LU}\}$$

функция $F(x)$ локально одноэкстремальна (на каждой компоненте S_{LU} существует единственный локальный минимум). Пусть $M_2(x)$ — мажорирующий функционал, одноэкстремальный на R^m , т.е.

$$F(x) \leq M_2(x), \quad x \in S_{LU}.$$

Пусть $F'_{LU} \leq F_{LU}$ таково, что из $F(x) \leq F'_{LU}$ следует $M_2(x) \leq F_{LU}$, т.е.

$$S'_{LU} = \{x \in R^m: F(x) \leq F'_{LU}\} \subset \{x \in R^m: M_2(x) \leq F_{LU}\} = E.$$

Тогда, если x_* — точка локального минимума $F(x)$, причем $F(x_*) \leq F'_{LU}$, то x_* — точка глобального минимума.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Главное — показать, что множество S'_{LU} связно. Действительно, тогда из $S'_{LU} \subset S_{LU}$ следует, что на S'_{LU} существует единственный локальный минимум x_* , т.е. для любых $x \in S'_{LU}$, $x \neq x_*$

имеем $F(x) > F(x_*)$. Если $x \in S'_{LU}$, т.е. если $F(x) > F'_{LU}$, то $F(x_*) < F(x)$ следует из неравенств $F(x_*) \leq F'_{LU} < F(x)$.

Прежде всего заметим, что в силу одноэкстремальности $M_2(x)$ множество E связно, причем $E \subset S_{LU}$. Нетрудно видеть, что E целиком принадлежит одной компоненте множества S_{LU} . Значит, по условию теоремы на E существует единственный локальный минимум. Отсюда следует, что множество S'_{LU} также связно, так как по лемме 1.1 в противном случае функция $F(x)$ на S'_{LU} , а значит, и на E имела бы два локальных минимума. Теорема доказана.

Теорема 4.2 (о минорирующем функционале). Пусть $F(x)$ — непрерывная ограниченная снизу на R^m функция, а $F_{LU} < \bar{F}_E$ таково, что на множестве

$$S_{LU} = \{x \in R^m: F(x) \leq F_{LU}\}$$

функция $F(x)$ локально одноэкстремальна. Пусть $M_1(x)$ — минорирующий, одноэкстремальный на R^m функционал, т.е.

$$M_1(x) \leq F(x),$$

$$x \in S_{LU}.$$

Пусть $F'_{LU} \leq F_{LU}$ таково, что из $M_1(x) \leq F'_{LU}$ следует $F(x) \leq F_{LU}$, т.е.

$$E = \{x \in R^m: M_1(x) \leq F'_{LU}\} \subset S_{LU}.$$

Тогда, если x_* — точка локального минимума $F(x)$, причем $F(x_*) \leq F'_{LU}$, то x_* — точка глобального минимума.

Доказательство во многом совпадает с предыдущим. Множество E связно и принадлежит одной компоненте множества S_{LU} . Далее, легко видеть, что множество $S'_{LU} = \{x \in R^m: F(x) \leq F'_{LU}\} \subset E$ также связно. Значит, если $x_* \in S'_{LU}$ — точка локального минимума, то для всех $x \neq x_*$, $x \in S'_{LU}$ имеем $F(x) > F(x_*)$ в силу локальной одноэкстремальности $F(x)$ на S_{LU} . Если $x \in S'_{LU}$, то $F(x) > F'_{LU} \geq F(x_*)$. Теорема доказана.

В качестве одноэкстремальных мажорирующих или минорирующих функционалов часто удобно рассматривать строго квазивыпуклые функционалы; функционал $M(x)$ называется *строго квазивыпуклым* (на R^m), если для любых $x_1, x_2 \in R^m$, $x_1 \neq x_2$, и любого $0 < \lambda < 1$ имеем $M(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) < \max(M(x_1), M(x_2))$. Нетрудно показать (см., например, [36]), что строго квазивыпуклый функционал имеет не более одного локального минимума. В свою очередь строго квазивыпуклый функционал часто можно определить через выпуклый. А именно, если $P(x)$ — выпуклый функционал, g — строго возрастающая функция действительного переменного, то $M(x) = g(P(x))$ — строго квазивыпуклый функцио-

нал. Это следует из цепочки неравенств

$$\begin{aligned} M(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) &= g(P(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2)) \leq \\ &\leq g(\lambda P(x_1) + (1 - \lambda)P(x_2)) < \max(g(P(x_1)), g(P(x_2))), \\ x_1 &\neq x_2, \quad 0 < \lambda < 1. \end{aligned}$$

Еще один способ образования строго квазивыпуклых функционалов основан на операции \max . А именно, если $P_1(x)$, $P_2(x)$ — строго квазивыпуклые функционалы на R^m , то $P_3(x) = \max(P_1(x), P_2(x))$ — также строго квазивыпуклый функционал на R^m .

В теоремах 4.1 и 4.2 необходимо находить для данного уровня F_{LC} другой уровень $F'_{LC} < F_{LC}$. Часто это сделать не просто, и требуется наличие одновременно и мажорирующего, и минорирующего функционалов. Покажем, как выглядит окончательный критерий совпадения локального минимума с глобальным в этом случае.

Теорема 4.3 (критерий глобальности в общем случае). Пусть $F(x)$ — непрерывная ограниченная снизу на R^m функция, а $F_{LU} < \bar{F}_E$ таково, что на $S_{LU} = \{x \in R^m: F(x) \leq F_{LU}\}$ функция $F(x)$ локально одноэкстремальна. Пусть $P_1(x)$, $P_2(x)$ — строго квазивыпуклые функционалы, причем

$$P_1(x) \leq F(x) \leq P_2(x), \quad x \in S_{LU}.$$

Пусть $F'_{LU} \leq F_{LU}$ таково, что из $P_1(x) \leq F'_{LU}$ следует $P_2(x) \leq F_{LU}$, т.е.

$$\{x \in R^m: P_1(x) \leq F'_{LU}\} \subset \{x \in R^m: P_2(x) \leq F_{LU}\}.$$

Тогда, если x_* — точка локального минимума функции $F(x)$, причем $F(x_*) \leq F'_{LU}$, то x_* — точка глобального минимума.

Следствие. Если $P_1(x)$ и $P_2(x)$ имеют вид соответственно $g_1(P(x))$ и $g_2(P(x))$, где $g_1(\xi) \leq g_2(\xi)$ — строго возрастающие функции действительного переменного, $P(x)$ — квазивыпуклый функционал на R^m , то можно положить $F'_{LU} = g_1(g_2^{-1}(F_{LC}))$ (если $F_{LC} \geq \sup g_2(\xi)$, то полагаем $g_2^{-1}(F_{LC}) = +\infty$).

В качестве примера применения доказанных теорем рассмотрим задачу глобальной минимизации функции

$$R(\alpha) = l \cdot \ln Q_1(\alpha) + (n - l) \cdot \ln Q_2(\alpha), \quad \alpha \in R^m, \quad (4.1)$$

где $0 < l < n$, $Q_j(\alpha) = \|y_j - X_j \alpha\|^2 > 0$, $y_1 \in R^l$, $y_2 \in R^{n-l}$, $j = 1, 2$; X_1 и X_2 — матрицы полного ранга порядка $l \times m$ и $(n-l) \times m$ соответственно. Функция (4.1) возникает в связи с оценением параметров линейной регрессии, дисперсия отклонений в которой различна; так, для $i = 1, \dots, l$ эта дисперсия равна σ_1^2 , а для $i = l + 1, \dots, n$ эта дисперсия равна σ_2^2 (так называемая "гетероскедастичная" регрессия). Вычислитель-

ным вопросам оценивания параметров в таких регрессиях посвящен отдельный параграф — § 4, гл. 7. Там, в частности, будет построен критерий одноэкстремальности функции (4.1), т.е. будут найдены условия, при которых $R(\alpha)$ имеет единственную стационарную точку на R^m . Сейчас мы построим критерий одноэкстремальности для этой функции, основываясь на результатах данного параграфа, т.е. с помощью мажорирующего и минорирующего квазивыпуклых функционалов.

Важнейшим свойством исследуемой функции (4.1) является ее мажорируемость квазивыпуклой функцией:

$$l \cdot \ln Q_1(\alpha) + (n-l) \cdot \ln Q_2(\alpha) \leq n \cdot \ln \left[\frac{l}{n} Q_1(\alpha) + \frac{n-l}{n} Q_2(\alpha) \right] = P(\alpha).$$

Это неравенство — следствие вогнутости \ln . Таким образом, $R(\alpha) \leq P(\alpha)$, $\alpha \in R^m$, т.е. $P(\alpha)$ — мажорирующий квазивыпуклый функционал. Для применения теоремы 4.1 осталось определить уровень одноэкстремальности минимизируемой функции (4.1).

Найдем первые и вторые производные этой функции:

$$\frac{\partial R}{\partial \alpha} = -\frac{l}{Q_1(\alpha)} X_1^T e_1(\alpha) - \frac{n-l}{Q_2(\alpha)} X_2^T e_2(\alpha),$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial \alpha^2} &= \frac{l}{Q_1(\alpha)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(\alpha)} X_2^T X_2 - \\ &- \frac{2l}{Q_1^2(\alpha)} X_1^T e_1(\alpha) e_1^T(\alpha) X_1 - \frac{2(n-l)}{Q_2^2(\alpha)} X_2^T e_2(\alpha) e_2^T(\alpha) X_2, \end{aligned}$$

где $e_j(\alpha) = y_j - X_j \alpha$, $j = 1, 2$. Итак, пусть $\partial R / \partial \alpha = 0$. Оценим в рамках этого ограничения гессиан функции снизу. Начнем со случая $m = 1$, т.е. положим $X_j = x_j \in R^1$. Обозначим $T_j = (x_j, e_j)$, $j = 1, 2$. Тогда $dR/d\alpha = 0$ (аргумент α в скобках для краткости опускаем) равносильно

$$l \cdot T_1 / Q_1 + (n-l) \cdot T_2 / Q_2 = 0,$$

при этом

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 R}{d\alpha^2} = \frac{l \|x_1\|^2}{Q_1} + \frac{(n-l) \|x_2\|^2}{Q_2} - \frac{2l T_1^2}{Q_1^2} - \frac{2(n-l) T_2^2}{Q_2^2}.$$

Выражаем T_2 / Q_2 через T_1 / Q_1 в первом уравнении и подставляем во второе; получаем

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 R}{d\alpha^2} = \frac{l \|x_1\|^2}{Q_1} + \frac{(n-l) \|x_2\|^2}{Q_2} - \frac{2nl}{n-l} \frac{T_1^2}{Q_1^2}.$$

Теперь заметим, что $(x, y - \alpha x)^2 = (Q(\alpha) - \hat{Q}) \|x\|^2$, где $Q(\alpha) = \|y - \alpha x\|^2$, $\hat{Q} = \min Q(\alpha)$. Поэтому $T_1^2 = \|x_1\|^2 (Q_1(\alpha) - \hat{Q}_1)$, где

$$\hat{Q}_1 = \min_{\alpha} \|y_1 - \alpha x_1\|^2.$$

Таким образом, значение второй производной исследуемой функции в стационарных точках будет равно

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d^2 R}{d\alpha^2} &= \frac{l \|x_1\|^2}{Q_1} + \frac{(n-l) \|x_2\|^2}{Q_2} - \frac{2nl}{n-l} \cdot \frac{(Q_1 - \hat{Q}_1)}{Q_1^2} \|x_1\|^2 = \\ &= \frac{(n-l) \|x_2\|^2}{Q_2} + \frac{2n\hat{Q}_1 \|x_1\|^2}{n-l} \cdot \frac{1}{Q_1^2} - \frac{l(n+l)}{n-l} \|x_1\|^2 \frac{1}{Q_1}, \quad (4.2) \end{aligned}$$

Наша ближайшая задача – определить те пороговые значения $R(\alpha)$, ниже которых последнее выражение положительно. Этот уровень и будет соответствовать уровню локальной одноэкстремальности. Для решения этой задачи необходимо оценить (4.2) снизу в терминах $l \cdot \ln Q_1 + (n-l) \cdot \ln Q_2$. Для этой цели воспользуемся еще раз оптимизационным методом получения числовых неравенств (см. § 2, гл. 3).

Допустим, требуется оценить снизу выражение $Ax/y + B/x$ в терминах $C \ln x + D \ln y$, где $A, B, C, D, x, y > 0$. Образует функцию Лагранжа

$$L(x, y; \lambda) = A \frac{x}{y} + B \frac{1}{x} - \lambda(C \ln x + D \ln y - \varphi)$$

и найдем ее стационарные точки: $\partial L / \partial x = A/y - B/x^2 - \lambda C/x = 0$, $\partial L / \partial y = -Ax/y^2 - \lambda D/y = 0$. Выражаем x, y через λ и подставляем в уравнение-ограничение $C \ln x + D \ln y - \varphi = 0$, откуда найдем λ , а затем x и y . Окончательно получим следующее числовое неравенство:

$$\begin{aligned} \frac{Ax}{y} + \frac{B}{x} &\geq \\ &\geq (C+2D) \exp \frac{C \ln \frac{B}{C+D} + D \ln \frac{AB}{D(C+D)} - C \ln x - D \ln y}{C+2D}, \end{aligned}$$

$$A, B, C, D, x, y > 0. \quad (4.3)$$

Доказательство того, что найденная стационарная точка (единственная) дает глобальный минимум $Ax/y + B/x$ при ограничении $C \ln x + D \ln y = \varphi$, достаточно просто.

Применим неравенство (4.3) для оценки снизу (4.2). Заметим сначала, что знак неравенства (4.3) не изменится после домножения на $Q_1 > 0$. Таким образом, применяя (4.3) к (4.2), можно утверждать, что

$$\frac{Q_1}{2} \frac{d^2 R}{d\alpha^2} \geq - \frac{l(n+l)}{n-l} \|x_1\|^2 + (2n-l) \exp \left(\frac{E - R(\alpha)}{2n-l} \right),$$

где

$$E = l \cdot \ln \frac{2l \|x_1\|^2 \hat{Q}_1}{n-l} + (n-l) \cdot \ln \frac{2l \hat{Q}_1 \|x_1\|^2 \|x_2\|^2}{n-l}.$$

Поэтому, если

$$R(\alpha) < E - (2n-l) \cdot \ln \frac{l(n+l) \|x_1\|^2}{(n-l)(2n-l)} = R_{LU}, \quad (4.4)$$

то $d^2R/d\alpha^2 > 0$ при условии, что $dR/d\alpha = 0$. Можно показать, что для (4.1) $\bar{R}_E = \infty$, поэтому на основании теоремы 1.2 утверждаем, что на множестве $S = \{\alpha \in R^1: R(\alpha) < R_{LU}\}$ функция (4.1) локально одноэкстремальна, т.е. на любом интервале, содержащемся в S , функция (4.1) имеет не более одного локального минимума.

Обобщим формулу (4.4) на многомерный случай. Пусть $\nu \in R^m$, $\nu \neq 0$. Домножим гессиан $R(\alpha)$ слева на ν^T и справа на ν , а градиент слева на ν^T . Обозначим $T_j = \nu^T X_j^T e_j$. Действуя теперь, как и в одномерном случае, придем к выражению

$$\frac{1}{2} \nu^T \frac{\partial^2 R}{\partial \alpha^2} \nu = \frac{lP_1}{Q_1} + \frac{(n-l)P_2}{Q_2} - \frac{2nl}{n-l} \cdot \frac{T_1^2}{Q_1^2},$$

где $P_j = \nu^T X_j^T X_j \nu$, $j = 1, 2$. Докажем теперь следующее неравенство:

$$(y - X\alpha, X\nu)^2 \leq \nu^T X^T X\nu (Q(\alpha) - \hat{Q}), \quad (4.5)$$

где $\alpha, \nu \in R^m$, $y \in R^n$, X — матрица $n \times m$, $Q(\alpha) = \|y - X\alpha\|^2$, $\hat{Q} = \min_{\alpha} Q(\alpha)$.

Действительно, пусть

$$a = \arg \min_{\alpha} Q(\alpha).$$

Тогда легко проверить, что $(y - Xa, X\nu) = 0$ для любого $\nu \in R^m$, поэтому, применяя неравенство Коши — Буняковского, получим

$$\begin{aligned} (y - X\alpha, X\nu)^2 &= ((y - Xa) - X(\alpha - a), X\nu)^2 = \\ &= (X(\alpha - a), X\nu)^2 \leq \nu^T X^T X\nu (\alpha - a)^T X^T X(\alpha - a). \end{aligned}$$

Также нетрудно установить (известный факт линейного регрессионного анализа), что

$$Q(\alpha) - \hat{Q} = (\alpha - a)^T X^T X(\alpha - a).$$

Последнее окончательно доказывает неравенство (4.5). Применяя его к T_1^2 , получим $T_1^2 \leq P_1(Q_1 - \hat{Q}_1)$, что приведет нас к оценке снизу для $\nu^T (\partial^2 R / \partial \alpha^2) \nu / 2$, аналогичной одномерному случаю. Применяя неравенство (4.3), приходим к следующему ответу:

$$R_{LU}(\nu) = E(\nu) - (2n - l) \cdot \ln \frac{l(n+1)P_1}{(n-l)(2n-l)},$$

где

$$E(\nu) = l \cdot \ln \frac{2lP_1\hat{Q}_1}{n-l} + (n-l) \cdot \ln \frac{2l\hat{Q}_1P_1P_2}{n-l},$$

$$P_j = \nu^T X_j^T X_j \nu, \quad j = 1, 2; \quad \hat{Q}_1 = \min Q_1(\alpha).$$

Для получения окончательного ответа осталось найти минимум $R_{LU}(\nu)$ по ν . Для этого перепишем $R_{LU}(\nu)$ следующим образом:

$$R_{LU}(\nu) = (n-l) \cdot \ln \frac{\nu^T X_2^T X_2 \nu}{\nu^T X_1^T X_1 \nu} - F,$$

где

$$F = l \cdot \ln \frac{2l\hat{Q}_1}{n-l} - (2n-l) \cdot \ln \frac{l(n+l)}{(n-l)(2n-l)}.$$

Очевидно,

$$\min_{\nu} \frac{\nu^T X_2^T X_2 \nu}{\nu^T X_1^T X_1 \nu} = \lambda_{\min}(X_2^T X_2) (X_1^T X_1)^{-1} = \lambda_1,$$

поэтому окончательно уровень локальной одноэкстремальности для $R(\alpha)$ в многомерном случае будет

$$R_{LU} = (n-l) \cdot \ln \lambda_1 - F. \quad (4.6)$$

На основании теоремы 1.2 утверждаем, что на любом связном множестве, содержащимся в $\{\alpha: R(\alpha) < R_{LU}\}$, минимизируемая функция имеет не более одного локального минимума.

Теперь все готово, чтобы применить для функции (4.1) теорему 4.3. Осталось найти минорирующий квазивыпуклый функционал. Имеем

$$R(\alpha) \geq l \cdot \ln Q_1(\alpha) + (n-l) \cdot \ln \hat{Q}_2 = P_1(\alpha),$$

$$R(\alpha) \geq l \cdot \ln \hat{Q}_1 + (n-l) \cdot \ln Q_2(\alpha) = P_2(\alpha),$$

поэтому $R(\alpha) \geq P_3(\alpha) = \max(P_1(\alpha), P_2(\alpha))$, т.е., как было выше отмечено $P_3(\alpha)$ – квазивыпуклый функционал. На основании этого

$$P_3(\alpha) \leq R(\alpha) \leq P(\alpha), \quad \alpha \in R^m;$$

поэтому, положив

$$R'_{LU} = \frac{1}{2} (R_{LU} + l \cdot \ln \hat{Q}_1 + (n-l) \ln \hat{Q}_2),$$

где R_{LU} задается выражением (4.6), $\hat{Q}_j = \min Q_j(\alpha)$, будем иметь $\{\alpha: P_3(\alpha) \leq R'_{LU}\} \subset \{\alpha: P(\alpha) \leq R_{LU}\}$. Итак, критерий глобальности для функции (4.1) имеет следующий вид: *если a – точка локального минимума $R(\alpha)$, причем $R(a) \leq R'_{LU}$, то a – точка глобального минимума $R(\alpha)$.*

Другие примеры использования доказанных теорем приводятся в гл.7 при построении критериев глобальности для минимизируемых функций вида сумм неквадратических невязок линейной модели.

ОБЛАСТИ ВЫПУКЛОСТИ И ОДНОСТАЦИОНАРНОСТИ СУММЫ КВАДРАТОВ В ПРОСТРАНСТВЕ НАБЛЮДЕНИЙ

В предыдущих главах мы искали такое пороговое значение суммы квадратов, ниже которого эта сумма становилась выпуклой (или одностационарной) функцией. Таким образом, задача нахождения подобных областей решалась в пространстве параметров на множествах уровня минимизируемой функции.

В данной главе область выпуклости (одностационарности) будет искать в пространстве наблюдений. Задача, таким образом, сводится к тому, чтобы для данной нелинейной регрессии найти в R^n такое подмножество наблюдений Y_C , для каждого y из которого функция

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\alpha))^2, \quad \alpha \in \Lambda,$$

является выпуклой на Λ ; здесь Λ — выпуклое априорное множество параметров из R^m .

Как использовать, например, построенную область выпуклости суммы квадратов? Во-первых, если данный, конкретный набор наблюдений y принадлежит этой области, то на Λ минимизируемая функция является выпуклой со всеми вытекающими отсюда последствиями. Во-вторых, область выпуклости определяет те качественные условия, которые накладываются на наблюдения, при которых задача оптимизации будет "хорошей". Таким образом, можно сказать, какими должны быть данные, чтобы соответствующая модель регрессии была адекватной. Таким способом можно априори определять адекватность выбранной модели.

§ 1. Область выпуклости $Q(\alpha)$

Областью выпуклости $Q(\alpha)$ в пространстве наблюдений называем множество Y_C такое, что для любого $y \in Y_C$ функция $Q(\alpha)$ выпукла на Λ . Найдем область выпуклости сначала для одномерной регрессии, т.е. в случае $\Lambda \subset R^1$. Как легко видеть, тогда

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 Q}{d\alpha^2} = \| \dot{f}(\alpha) \|^2 + (f(\alpha), \ddot{f}(\alpha)) - (y, \ddot{f}(\alpha)),$$

поэтому $d^2 Q/d\alpha^2 > 0$, $\alpha \in \Lambda$, для всех y из множества ¹⁾

$$\bar{Y}_C = \bigcap_{\alpha \in \Lambda} \{y \in R^n: (y, \ddot{f}(\alpha)) < \|\dot{f}(\alpha)\|^2 + (\ddot{f}(\alpha), f(\alpha))\}. \quad (1.1)$$

Это множество выпукло как пересечение полупространств. Множество (1.1) – *максимальная область выпуклости* в том смысле, что если $y \in \bar{Y}_C$, то найдется такое $\alpha_0 \in \Lambda$, что $d^2 Q(\alpha)/d\alpha^2 \leq 0$ (в дальнейшем именно так и будем называть это множество, а его подмножества – *областями выпуклости*).

В некоторых, весьма простых случаях максимальная область выпуклости регрессии может быть установлена аналитически. Рассмотрим, например, параболическую регрессию $f(\alpha) = \alpha^2 z + \alpha x$, $\alpha \in R^1$, $x, z \in R^n$, для которой

$$\dot{f}(\alpha) = 2\alpha z + x, \quad \ddot{f}(\alpha) = 2z.$$

Для этой регрессии

$$\bar{Y}_C = \bigcap_{\alpha} \{y \in R^n: 2(y, z) < \|2\alpha z + x\|^2 + 2(z, \alpha^2 z + \alpha x)\}.$$

Таким образом, \bar{Y}_C состоит из тех $y \in R^n$, для которых квадратный трехчлен

$$\|2\alpha z + x\|^2 + 2(z, \alpha^2 z + \alpha x) - 2(y, z) > 0, \quad -\infty < \alpha < \infty,$$

что возможно лишь в случае отрицательности его дискриминанта

$$D = 36(x, z)^2 - 24\|z\|^2 (\|x\|^2 - 2(y, z)) < 0.$$

Таким образом, максимальной областью выпуклости $Q(\alpha)$ для параболической регрессии будет полупространство

$$\bar{Y}_C = \left\{ y \in R^n: (y, z) < \|x\|^2 \left[\frac{1}{2} - \frac{3}{4} \cos^2(\hat{x}, z) \right] \right\}. \quad (1.2)$$

Итак, если данный набор наблюдений y попадает в множество (1.2), то сумма квадратов $Q(\alpha)$ для параболической регрессии с этим набором наблюдений является строго выпуклой функцией на $(-\infty, \infty)$ (см. рис.10, с. 84).

Разумеется, в других случаях аналитически найти множество (1.1) бывает не просто. В лучшем случае можно поставить себе задачу найти хотя бы подмножество этого множества, чем мы сейчас и займемся. Максимальную область выпуклости (1.1) обозначаем \bar{Y}_C , тогда как ее подмножества Y_C (без верхней черты).

Помимо области выпуклости функции в пространстве наблюдений, можно построить *область корректности минимизации* $Q(\alpha)$, $\alpha \in \Lambda$, т.е. то множество наблюдений $y \in R^n$, для которых нижняя грань $Q(\alpha)$ на Λ достигается (вопросам построения соответствующих критериев посвящена первая глава книги). Обозначим это множество через \bar{Y}_E . Таким

¹⁾ Индекс C в обозначении Y_C есть первая буква англ. Convex – выпуклый.

образом, если $y \in \bar{Y}_E$, то существует $a \in \Lambda$ такое, что

$$Q(a) = \inf_{\alpha \in \Lambda} Q(\alpha).$$

Для каждого $y \in \bar{Y}_C \cap \bar{Y}_E = \bar{Y}_{CE}$ сумма квадратов $Q(\alpha)$ выпукла на Λ , причем нижняя грань $Q(\alpha)$ достигается, т.е. оценка МНК существует.

Перейдем к вопросу нахождения области выпуклости суммы квадратов. Рассмотрим для начала случай $m=1$. Прежде всего заметим, что множество выпуклости может быть пустым. Необходимым условием того, чтобы $\bar{Y}_C \neq \emptyset$, является

$$\inf_{\alpha \in \Lambda} T(\alpha) = T^* \neq -\infty, \quad (1.3)$$

где

$$T(\alpha) = \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^2 + (f(\alpha), \ddot{f}(\alpha))}{\|\ddot{f}(\alpha)\|}. \quad (1.4)$$

Здесь и далее предполагается, что $\|\dot{f}(\alpha)\| \neq 0 \quad \forall \alpha \in \Lambda$, поэтому в случае $\|\ddot{f}(\alpha)\| = 0$ под знаком \inf понимаем $+\infty$. Условие $\bar{Y}_C \neq \emptyset$ следует из неравенства Коши – Буняковского:

$$\frac{(y, \ddot{f}(\alpha))}{\|\ddot{f}(\alpha)\|} \geq -\|y\|.$$

Поэтому, если $y_0 \in \bar{Y}_C$, то $T(\alpha) > -\|y_0\|$.

Итак, для того чтобы множество выпуклости было не пусто, необходимо, чтобы $T^* \neq -\infty$. Последнее условие выполнено, в частности, для регрессий с конечными хвостами (см. гл. 2). Действительно, тогда $\|f(\alpha)\| \leq A$, $\alpha \in \Lambda$, поэтому применяя неравенство Коши – Буняковского, получим

$$T(\alpha) \geq \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^2}{\|\ddot{f}(\alpha)\|} - \frac{\|f(\alpha)\| \|\dot{f}(\alpha)\|}{\|\ddot{f}(\alpha)\|} \geq -A.$$

Самым простым способом отыскания подмножеств \bar{Y}_C является следующий. Выберем некоторую точку $\pi \in R^n$ – ”центр” искомой области выпуклости. Тогда \bar{Y}_C можно переписать как

$$\bar{Y}_C = \bigcap_{\alpha \in \Lambda} \{y \in R^n: (y - \pi, \ddot{f}(\alpha)) < \|\dot{f}(\alpha)\|^2 + (f(\alpha) - \pi, \ddot{f}(\alpha))\}. \quad (1.5)$$

Пользуясь неравенством Коши – Буняковского

$$(y - \pi, \ddot{f}(\alpha)) \leq \|y - \pi\| \|\ddot{f}(\alpha)\|,$$

можно утверждать, что шар

$$\{y: \|y - \pi\| < T_\pi^*\} \subset \bar{Y}_C,$$

где

$$T_\pi^* = \inf_{\alpha} T_\pi(\alpha) = \inf_{\alpha} \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^2 + (f(\alpha) - \pi, \ddot{f}(\alpha))}{\|\ddot{f}(\alpha)\|}. \quad (1.6)$$

Итак, для любой точки y из шара

$$Y_C = \{y: \|y - \pi\| < T_\pi^*\} \quad (1.7)$$

сумма квадратов $Q(\alpha)$ является выпуклой на Λ . Разумеется, для того чтобы $Y_C \neq \emptyset$, необходимо, чтобы $T_\pi^* > 0$. Последнее условие может быть ориентиром при выборе точки $\pi \in R^n$.

Область выпуклости можно построить в виде эллипсоида. Для этого выберем любые положительные w_1, w_2, \dots, w_n . По неравенству Коши – Буняковского

$$\begin{aligned} (y - \pi, \ddot{f}(\alpha)) &= \sum [(y_i - \pi_i)/\sqrt{w_i}] [\ddot{f}_i(\alpha)\sqrt{w_i}] \leq \\ &\leq [\sum (y_i - \pi_i)^2/w_i]^{1/2} [\sum \ddot{f}_i^2(\alpha)w_i]^{1/2}. \end{aligned}$$

Тогда, если обозначить

$$T_\pi^* = \inf_\alpha \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^2 + (f(\alpha) - \pi, \ddot{f}(\alpha))}{[\sum \ddot{f}_i^2(\alpha)w_i]^{1/2}},$$

то областью выпуклости будет эллипсоид

$$Y_C = \{y \in R^n: \sum (y_i - \pi_i)^2/w_i < (T_\pi^*)^2\}.$$

У этого эллипсоида направление осей совпадает с осями координат. Этого можно избежать и построить область выпуклости в виде эллипсоида с произвольным направлением осей. Пусть A – некоторая положительно определенная матрица $n \times n$. Тогда

$$\begin{aligned} (y - \pi, \ddot{f}(\alpha)) &= (y - \pi)^T \ddot{f}(\alpha) = [A^{-1/2}(y - \pi)]^T [A^{1/2} \ddot{f}(\alpha)] \leq \\ &\leq [(y - \pi)^T A^{-1}(y - \pi)]^{1/2} [\ddot{f}(\alpha)^T A \ddot{f}(\alpha)]^{1/2}. \end{aligned}$$

В этом случае

$$T_\pi^* = \inf_\alpha \frac{\|\dot{f}(\alpha)\|^2 + (f(\alpha) - \pi, \ddot{f}(\alpha))}{[\ddot{f}^T(\alpha) A \ddot{f}(\alpha)]^{1/2}},$$

и область выпуклости имеет вид произвольного эллипсоида:

$$Y_C = \{y \in R^n: (y - \pi)^T A^{-1}(y - \pi) < (T_\pi^*)^2\}.$$

Выбор области выпуклости для данной конкретной регрессии в виде сферы или эллипсоида (другими словами, выбор вектора π и матрицы A) должен быть таким, чтобы область выпуклости была наиболее "широкой". В частности, этот выбор должен приводить к $T_\pi^* > 0$, разумеется, если это в принципе возможно. Примеры выбора π и A читатель найдет ниже.

Построение множества выпуклости в виде сферы (1.7) основано на неравенстве Коши – Буняковского и не учитывает "направленность" векторов $\ddot{f}(\alpha)$, $\alpha \in \Lambda$. Множество выпуклости можно сделать намного "шире", если учесть эту направленность.

Итак, предположим, что $\dot{f}(\alpha)$, $\alpha \in \Lambda$, лежит в некотором конусе $K \subset R^n$. Этот конус может быть, например, многогранным или круговым. В случае многогранного конуса он может быть задан системой неравенств вида $(c_i, \dot{f}_i(\alpha)) \geq 0$, $i = 1, \dots, n$. Если конус круговой, то он задается осью и углом раствора (за дальнейшими ссылками по теории конусов отсылаем читателя к § 2, гл. 1).

Итак, будем считать, что

$$\dot{f}(\alpha) \in K, \quad \alpha \in \Lambda, \tag{1.8}$$

где $R^n \supset K$ – замкнутый заостренный конус. Как следует из (1.5), множество выпуклости одномерной нелинейной регрессии \bar{Y}_C совпадает с множеством решений линейной по $y \in R^n$ бесконечной системы неравенств (полагаем для простоты в (1.5) $\pi = 0$):

$$\frac{(y, \ddot{f}(\alpha))}{\|\ddot{f}(\alpha)\|} < T(\alpha) \quad = \quad \frac{[\|\dot{f}(\alpha)\|^2 + (f(\alpha), \ddot{f}(\alpha))]}{\|\ddot{f}(\alpha)\|}. \quad (1.9)$$

Наша задача – найти подмножества решений этой системы неравенств. Заменим правую часть (1.9) ее нижней гранью, $T^* = \inf_{\alpha \in \Lambda} T(\alpha) \neq -\infty$;

решения полученной таким образом системы неравенств будут решениями системы (1.9):

$$\left(y, \frac{u}{\|u\|} \right) < T^* \quad \forall u \in K. \quad (1.10)$$

Будем искать множество решений (1.10) относительно $y \in R^n$. На рис. 15 показано множество выпуклости \bar{Y}_C и два его подмножества: круг с радиусом T^* и скругленный конус (см. ниже). Граница \bar{Y}_C является огибающей семейства прямых, ортогональных $\ddot{f}(\alpha)$, отстоящих от 0 на расстояние $T(\alpha)$.

Рассмотрим три случая.

Если $T^* = 0$, то решением (1.10) относительно y по определению есть K^- – открытый отрицательно сопряженный конус. Для того чтобы $K^- \neq \emptyset$, необходимо, чтобы система векторов $\{\ddot{f}(\alpha), \alpha \in \Lambda\}$ была однонаправленной (см. § 2, гл. 1).

Допустим, $T^* < 0$. Отметим, что в этом случае система (1.10) имеет решение тогда и только тогда, когда конус K заострен. Действительно,

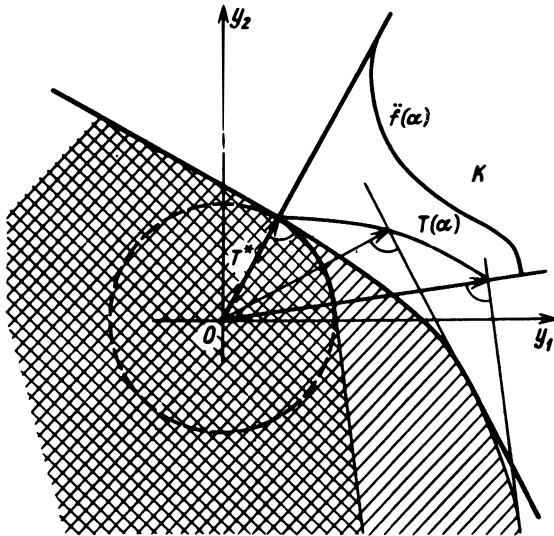


Рис. 15. Множество выпуклости \bar{Y}_C и его подмножества ($n = 2, m = 1$): заштрихованная область – множество \bar{Y}_C , область с двойной штриховкой – скругленный конус

предположим, что K не заострен, т.е. $u \in K$, $-u \in K$, $u \neq 0$. Тогда, если y – решение системы (1.10), то $(y, u/\|u\|) < T^* < 0$, а с другой стороны,

$$\left(y, \frac{-u}{\|u\|}\right) = -\left(y, \frac{u}{\|u\|}\right) < T^*,$$

– противоречие. Обратное утверждение будет доказано конструктивно ниже. Итак, пусть K – заостренный конус. Решение (1.10) будем искать, сдвигая отрицательно сопряженный конус K^- (в силу заостренности K этот конус также будет заострен). Как было показано в § 2, гл. 1, конус K заострен тогда и только тогда, когда существует $v \in R^n$: $(u, v) > 0 \quad \forall u \in K$. Покажем, что подмножеством решения (1.10) в этом случае будет открытый конус с вершиной в $\lambda^* v$:

$$K^- + \lambda^* v, \tag{1.11}$$

$$\lambda^* = \frac{T^*}{\min_{u \in K} (v, u/\|u\|)}.$$

Действительно, если $w \in K^- + \lambda^* v$, то $w = y + \lambda^* v$, где $y \in K^-$, поэтому

$$\begin{aligned} \left(w, \frac{u}{\|u\|}\right) &= \left(y + \lambda^* v, \frac{u}{\|u\|}\right) = \frac{1}{\|u\|} (y, u) + \lambda^* \left(v, \frac{u}{\|u\|}\right) < \\ &< \lambda^* \left(v, \frac{u}{\|u\|}\right) = T^* \left(\frac{(v, u/\|u\|)}{\min_u (v, u/\|u\|)}\right) \leq T^*, \end{aligned}$$

т.е. множество $K^- + \lambda^* v$ принадлежит множеству решений (1.10).

Пусть, наконец, $T^* > 0$. Как ранее было показано, в этом случае \bar{Y}_C содержит сферу ненулевого радиуса. Ближайшей нашей задачей является нахождение более "широких" подмножеств множеств решений системы бесконечных неравенств (1.9) в условиях однонаправленности системы векторов $\{\dot{f}(\alpha), \alpha \in \Lambda\}$.

Допустим сначала, что K – круговой заостренный конус:

$$K = \{u \in R^n: \cos(u, \hat{z}) \geq \cos \gamma\}, \tag{1.12}$$

где z – ось конуса, $0 \leq \gamma < \pi/2$. В этом случае решением (1.10) будет *скругленный конус* (рис. 16). Если u пробегает множество K , гиперплоскость $(y, u/\|u\|) = T^*$ скользит по сфере радиуса T^* . При этом пересечение полупространств $\{y: (y, u/\|u\|) < T^*\}$, $u \in K$, содержит шар $\|y\| < T^*$. Крайние положения гиперплоскости $(y, u/\|u\|) = T^*$ отвечают крайним направлениям конуса K , они в свою очередь соответствуют ребрам конуса K . Таким образом, в условиях, когда u принадлежит круговому конусу, множеством решений является скругленный круговой конус, отрицательно сопряженный к K . Опишем его аналитически.

Как следует из вышеизложенного, областью скругления кругового конуса является часть сферы радиуса T^* (см. рис. 16). Вершина H этого конуса лежит на луче λz . Очевидно $|OH| = T^*/\cos \gamma$, поэтому $H = T^* z / (\|z\| \cos \gamma)$.

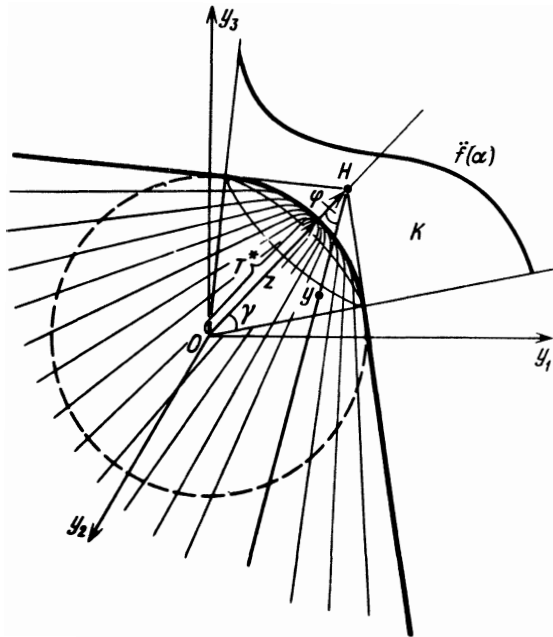


Рис. 16. Скругленный круговой конус ($n = 3, m = 1$)

Таким образом, решением системы неравенств (1.10) будет круговой конус

$$G = \left\{ u \in R^n: \cos(u, \widehat{-z}) > \cos\left(\frac{\pi}{2} - \gamma\right) \right\} + \frac{zT^*}{\|z\| \cos \gamma}, \quad (1.13)$$

за исключением той его части, которая лежит вне куска сферы радиуса T^* . Аналитически последнее условие может быть описано следующим образом. Пусть $y \in G$, причем

$$\left(y - \frac{zT^*}{\|z\| \cos \gamma}, \widehat{-z} \right) = \varphi < \frac{\pi}{2} - \gamma.$$

Тогда, если к тому же

$$\begin{aligned} \left\| y - \frac{zT^*}{\|z\| \cos \gamma} \right\|^2 &> (T^*)^2 + \frac{(T^*)^2}{\cos^2 \gamma} + \\ &+ 2 \cos\left(\arcsin\left(\frac{\sin \varphi}{\cos \gamma}\right) + \varphi\right) \frac{(T^*)^2}{\cos \gamma}, \end{aligned} \quad (1.14)$$

то $y \in Y_C$ – решение системы неравенств (1.10). Формула (1.14) получается из решения треугольника OHC (рис. 17).

Вместо точного решения (1.10) в условиях (1.12) можно ограничиться приближенным. Для этого произведем сечение кругового конуса (1.13) гиперплоскостью $\{u: (u, z/\|z\|) < T^* \cos \gamma\}$. Таким образом, в качестве

подмножества \overline{Y}_C можно взять усеченный конус

$$G \cap \{u \in R^n: (u, z) < T^* \|z\| \cos \gamma\},$$

где круговой конус G задается (1.13).

В общем случае, т.е. когда конус (1.8) не является круговым, решением (1.10) по-прежнему является скругленный отрицательно сопряженный конус K^- , сдвинутый на некоторый вектор (т.е. с вершиной, не совпадающей с началом координат). Аналитически описать это множество в общем

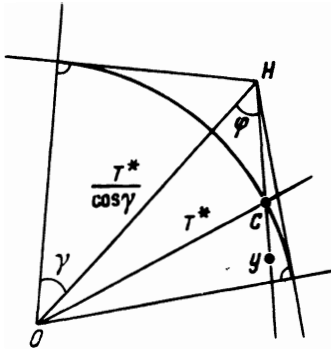


Рис. 17. Сечение скругленного кругового конуса плоскостью $OHу$

случае весьма трудно. Ограничимся опять нахождением подмножеств решения (1.10), которое будем искать в виде обычного конуса, сдвинутого на определенный вектор.

Рассмотрим сначала случай заостренного конуса K , когда существует такой вектор v , что $(u, v) > 0, u \in K$. Требуется определить некоторое (по возможности наиболее широкое) подмножество решений u системы бесконечных неравенств (1.10). Покажем, что в качестве такого подмножества можно взять отрицательно сопряженный конус, сдвинутый относительно начала координат:

$$K^- + \lambda^* v, \quad (1.15)$$

где

$$\lambda^* = T^* / \|v\|.$$

Действительно, пусть $y \in K^- + \lambda^* v$, т.е. $y = w + \lambda^* v$, где $(w, u) < 0$ для всех $u \in K$. Тогда по неравенству Коши – Буняковского

$$\left(y, \frac{u}{\|u\|}\right) = \frac{1}{\|u\|} (w, u) + \lambda^* \left(v, \frac{u}{\|u\|}\right) < T^* \frac{(v, u)}{\|v\| \|u\|} \leq T^*,$$

что и требовалось показать.

Теперь найдем множество, которое, наоборот, содержит множество решений (1.10). Покажем, что им будет тот же конус, но сдвинутый на другой вектор:

$$K^- + \lambda^{**} v, \quad (1.16)$$

где

$$\lambda^{**} = T^* / \min_{u \in K} \left(v, \frac{u}{\|u\|}\right).$$

Действительно, пусть $(y, u/\|u\|) < T^*$. Для того чтобы $y \in K^- + \lambda^{**}v$, необходимо и достаточно, чтобы для любого $u \in K$ $(y - \lambda^{**}v, u) < 0$. Но

$$\begin{aligned} \left(y - \lambda^{**}v, \frac{u}{\|u\|} \right) &= \frac{1}{\|u\|} (y, u) - \lambda^{**} \left(v, \frac{u}{\|u\|} \right) < T^* - \\ &- T^* \frac{(v, u/\|u\|)}{\min_u (v, u/\|u\|)} < T^* - T^* = 0, \end{aligned}$$

что и требовалось показать.

Конус (1.15) может оказаться достаточно плохой аппроксимацией, особенно в тех случаях, когда угол поворота конуса достаточно велик.

Вектор v , для которого $(u, v) > 0$, $u \in K$, может быть выбран многими способами. Какой из этих способов предпочесть? Для ответа на этот вопрос сравним два конуса (1.15) и (1.16). Первый минорирует множество решений (1.10), второй — мажорирует. Поскольку

$$\begin{aligned} \min_u \left(v, \frac{u}{\|u\|} \right) &= \|v\| \min_u \left(\frac{v}{\|v\|}, \frac{u}{\|u\|} \right) = \\ &= \|v\| \min_u \cos(\hat{v}, u), \end{aligned}$$

то для того, чтобы разница в множестве (1.15) и (1.16) была "наименьшей", необходимо, чтобы v было выбрано из условия

$$\max_v \min_{u \in K} \cos(\hat{v}, u),$$

что эквивалентно минимизации максимального угла v при $u \in K^1$.

В случае кругового конуса (1.12) в качестве v для выполнения этого условия необходимо взять ось конуса z , что и было ранее сделано (см. (1.13)).

Теперь изучим множество решений системы (1.10), когда конус K не является заостренным и $T^* > 0$. Как было ранее показано, в этом случае множество решений (1.10) содержит шар $\{y: \|y\| < T^*\}$. Этот шар в точности совпадает с множеством решений (1.10), если K совпадает со всем пространством. Если K совпадает с некоторым подпространством меньшей размерности $p < n$, то множеством решений (1.10) является цилиндр; основанием цилиндра служит p -мерный шар радиуса T^* , образующие цилиндра ортогональны подпространству, в котором лежит $\hat{f}(\alpha)$. Таким образом, если ортонормированный базис в R^n выбран таким образом, что K лежит в пространстве, натянутом на векторы r_1, r_2, \dots, r_p , то множеством решений (1.10) в этой системе координат будет цилиндр $\{u \in R^n: u_1^2 + u_2^2 + \dots + u_p^2 < (T^*)^2\}$.

В том случае, когда в (1.5) $\pi \neq 0$, система (1.9) запишется в виде

$$\left(y - \pi, \frac{\hat{f}(\alpha)}{\|\hat{f}(\alpha)\|} \right) < T(\alpha), \quad \alpha \in \Lambda, \quad (1.17)$$

¹⁾ Таким образом, в оптимальном варианте v совпадает с осью конуса (см. § 2, гл. 1).

решение которой относительно (1.9) будет сдвинуто на вектор π . В частности, если векторы $\dot{f}(\alpha)$, $\alpha \in \Lambda$, строго разнонаправлены, то решение (1.17) содержит шар (1.7), если $\dot{f}(\alpha)$, $\alpha \in \Lambda$, однонаправлены, то решение (1.17) содержит скругленный конус решения системы (1.9), сдвинутый на вектор π .

Перейдем к примерам. Начнем с параболической регрессии, для которой область выпуклости можно построить точно (ранее она была построена непосредственным образом). В этом случае $\dot{f}(\alpha) = 2z$, поэтому соответствующим конусом будет луч, порожденный вектором z . Значение (1.3) для параболической регрессии равно

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} T(\alpha) &= \frac{1}{2\|z\|} \min_{\alpha} [\|2\alpha z + x\|^2 + 2\alpha^2\|z\|^2 + 2\alpha(x, z)] = \\ &= \frac{1}{2\|z\|} \left[\|x\|^2 - \frac{3}{4} \frac{(x, z)^2}{\|z\|^2} \right]. \end{aligned}$$

Конусом, сопряженным к лучу λz , $\lambda > 0$, будет полупространство, поэтому решением системы неравенств (1.9) для параболической регрессии будет полупространство

$$\bar{Y}_C = \left\{ y \in R^n: (y, z) < \frac{1}{2} \|x\|^2 - \frac{3}{4} \frac{(x, z)^2}{\|z\|^2} \right\},$$

что совпадает с ранее полученным результатом (1.2). Практически этим результатом необходимо пользоваться следующим образом. Пусть $y_0 \in R^n$ – фактический набор наблюдений; если

$$(y_0, z) < \frac{1}{2} \|x\|^2 - \frac{3}{4} \frac{(x, z)^2}{\|z\|^2},$$

то функция $Q(\alpha) = \sum (y_{0i} - \alpha^2 z_i - \alpha x_i)^2$ является выпуклой на R^1 .

Рассмотрим теперь более интересный пример. Найдем область выпуклости для следующей одномерной регрессии:

$$f_i(\alpha) = (1 + \alpha x_i)^p, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.18)$$

где p фиксировано ($p \neq 0$, $p \neq 1$). Будем считать $x_i > 0$; за априорное множество параметров для (1.18) возьмем $\Lambda = (0, \infty)$. Прежде всего установим условия существования оценки МНК для этой модели, т.е. достижимости нижней грани функции

$$Q(\alpha) = \sum_1^n [y_i - (1 + \alpha x_i)^p]^2, \quad \alpha > 0. \quad (1.19)$$

Исследование модели (1.18) необходимо разбить на ряд случаев в зависимости от значений p . Будем в дальнейшем считать $p > 0$. Анализ для случая $p < 0$ проводится аналогичными методами. Тогда $Q(\alpha) \rightarrow \infty$ при $\alpha \rightarrow \infty$. Поэтому при $p > 0$ нижняя грань (1.18) достигается, если $Q'(0) < 0$. Но

$$Q'(\alpha) = -2p \sum_1^n [y_i - (1 + \alpha x_i)^p] (1 + \alpha x_i)^{p-1} x_i,$$

поэтому $Q'(0) = -2p \sum (y_i - 1) x_i < 0$ тогда и только тогда, когда $\sum (y_i - 1) x_i > 0$, т.е. $\sum y_i x_i > \sum x_i$. Итак, в случае $p > 0$ в качестве области существования оценки МНК в пространстве наблюдений можно взять полупространство

$$Y_E = \{ y \in R^n: (y, x) > (x, 1) \}, \quad (1.20)$$

где $1 = (1, \dots, 1)^T$, $y, x \in R^n$ – соответствующие векторы.

Займемся теперь нахождением величины T^* . Положим в формуле (1.6) $\pi = 0$; тогда, как нетрудно проверить,

$$T_0(\alpha) = \frac{2p-1}{|p-1|} \frac{\sum x_i^2 (1 + \alpha x_i)^{2(p-1)}}{[\sum x_i^4 (1 + \alpha x_i)^{2(p-2)}]^{1/2}}, \quad \alpha > 0. \quad (1.21)$$

1. $p > 2$. Оценим снизу выражение $\sum x_i^2 (1 + \alpha x_i)^{2(p-1)}$ в терминах выражения $\sum x_i^4 (1 + \alpha x_i)^{2(p-2)}$. Используем для этого оптимизационный метод (§ 2, гл. 3). Обозначим $x_i^2 = s_i$, $(1 + \alpha x_i)^2 = w_i$. Построим функцию Лагранжа

$$L(w_1, \dots, w_n; \lambda) = \sum s_i w_i^{p-1} - \lambda (\sum s_i^2 w_i^{p-2} - \varphi).$$

Найдем необходимые условия экстремума:

$$\frac{\partial L}{\partial w_i} = (p-1) s_i w_i^{p-2} - \lambda s_i^2 (p-2) w_i^{p-3} = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

откуда

$$w_i = \frac{p-2}{p-1} s_i \lambda.$$

Значение λ найдем из условия $\sum s_i^2 w_i^{p-2} = \varphi$:

$$\lambda = \frac{p-1}{p-2} (\sum s_i^p)^{-\frac{1}{p-2}} \frac{1}{\varphi^{p-2}}.$$

Подставляя полученные значения в L , получаем необходимое неравенство (при $p > 2$)¹⁾:

$$\sum s_i w_i^{p-1} \geq \left(\frac{p-1}{p-2}\right)^{p-1} \frac{(\sum s_i^2 w_i^{p-2})^{\frac{p-1}{p-2}}}{(\sum s_i^p)^{p-2}}. \quad (1.22)$$

Для того чтобы убедиться, что найденные значения дают минимум, достаточно найти вторые частные производные и проверить их положительность:

$$\frac{\partial^2 L}{\partial w_i^2} = (p-1)(p-2) s_i w_i^{p-3} - \lambda (p-2)(p-3) s_i^2 w_i^{p-4} > 0$$

при найденных значениях $w_i, \lambda; p > 2$.

Применяя неравенство (1.22) для оценки (1.21) снизу, получим

$$T_0(\alpha) \geq \frac{2p-1}{|p-1|} \cdot \left(\frac{p-1}{p-2}\right)^{p-1} \cdot \frac{1}{(\sum x_i^{2p})^{\frac{1}{p-2}}} \times \\ \times (\sum (1 + \alpha x_i)^{2(p-2)})^{\frac{p}{p(p-2)}}.$$

Функция от α , стоящая справа в этом неравенстве, является возрастающей по $\alpha \geq 0$, поэтому ее минимум достигается при $\alpha = 0$. Итак, окончательно имеем оценку снизу для (1.21):

$$T_0(\alpha) \geq \frac{2p-1}{p-1} \cdot \left(\frac{p-1}{p-2}\right)^{p-1} \cdot \frac{n^{\frac{p}{2(p-2)}}}{(\sum x_i^{2p})^{\frac{1}{p-2}}} = T_*^{(1)}. \quad (1.23)$$

2. $1 < p \leq 2$. В этом случае $T_0(\alpha)$ является возрастающей функцией, поскольку числитель (1.21) – возрастающая, а знаменатель – убывающая функция α . Отсюда

¹⁾ Это неравенство можно вывести из неравенства Гёльдера. Преимущество оптимизационного метода в том, что он сразу приводит к решению.

следует, что для значений $1 < p < 2$

$$\min_{\alpha} T_0(\alpha) = \frac{2p-1}{|p-1|} \cdot \frac{\sum x_i^2}{(\sum x_i^4)^{1/2}} = T_*^{(2)}. \quad (1.24)$$

3. $1/2 < p < 1$. Положим в неравенстве (1.22) $w_i = (1 + \alpha x_i)^{-2}$. Тогда

$$T_0(\alpha) \geq \frac{2p-1}{|p-1|} \cdot \left(\frac{1-p}{2-p} \right)^{1-p} \frac{1}{\frac{1}{(\sum x_i^{2p})^{2-p}}} \times$$

$$\times \left[\sum_{i=1}^n \frac{1}{(1 + \alpha x_i)^{2(2-p)}} \right]^{\frac{p}{2(2-p)}}.$$

Слева стоит возрастающая функция α , поэтому

$$\min_{\alpha} T_0(\alpha) \geq T_*^{(3)} = \frac{2p-1}{|p-1|} \left(\frac{1-p}{2-p} \right)^{1-p} \frac{1}{\frac{1}{(\sum x_i^{2p})^{2-p}}}. \quad (1.25)$$

4. $0 < p < 1/2$. В этом случае $T_0(\alpha) < 0$ из-за того, что $2p-1 < 0$. К сожалению, в этом случае $\inf T_0(\alpha) = -\infty$.

Перейдем к исследованию вектора вторых производных $\ddot{f}(\alpha)$. Для исследуемой регрессии он равен

$$\ddot{f}(\alpha) = p(p-1)(x_1^2(1+\alpha x_1)^{p-2}, x_2^2(1+\alpha x_2)^{p-2}, \dots, x_n^2(1+\alpha x_n)^{p-2}).$$

Как и прежде, рассмотрим те же случаи.

1. $p > 2$. Тогда $\ddot{f}_i(\alpha) > 0$, поэтому $\ddot{f}(\alpha) \in R_+^n$ (положительный ортант n -мерного евклидова пространства). Конусом, отрицательно сопряженным к R_+^n , является отрицательный ортант R_-^n . Поэтому областью выпуклости Y_C суммы квадратов регрессии (1.18) является многогранный конус

$$Y_C = \{y \in R^n: y_i < T_*^{(1)}, i = 1, \dots, n\},$$

скругленный в R_+^n сферой $\{y \in R^n: \|y\| = T_*^{(1)}\}$ (см. рис. 18, а); значение $T_*^{(1)}$ задается формулой (1.23). Как было уже ранее обнаружено, для исследуемой регрессии областью существования Y_E является полупространство (1.20). Пересечение множеств Y_C и Y_E даст нам область Y_{CE} . Заметим, что эта область может быть пустым множеством (разумеется, для предлагаемых способов нахождения областей Y_E и Y_C). Для того чтобы $Y_{CE} \neq \emptyset$, необходимо и достаточно показать, что $T_*^{(1)} > \|x\|/(x, 1)$. Область Y_{CE} похожа на многомерный сегмент.

2. $1 < p < 2$. Ситуация здесь повторяет предыдущую, за исключением того, что $T_*^{(2)}$ рассчитывается по формуле (1.24).

3. $1/2 < p < 1$. Этот случай наиболее благоприятный. Областью выпуклости будет прямоугольный конус

$$Y_C = \{y \in R^n: y_i > -T_*^{(3)}, i = 1, \dots, n\},$$

скругленный сферой $\{y \in R^n: \|y\| = T_*^{(3)}\}$, где $T_*^{(3)}$ задается формулой (1.25) (см. рис. 18, б). Теперь область выпуклости содержит полностью положительный ортант R_+^n . Областью Y_{CE} будет усеченный многогранный конус. "Благоприятность" этого случая заключается в том, что область Y_{CE} почти полностью совпадает с областью существования.

4. $0 < p < 1/2$. Этот случай самый неблагоприятный, поскольку $T_* = -\infty$, а значит, $Y_C = \emptyset$. Нетрудно показать, что при $0 < p < 1/2$ $Y_C = \emptyset$, т.е. для любого $y \in R^n$

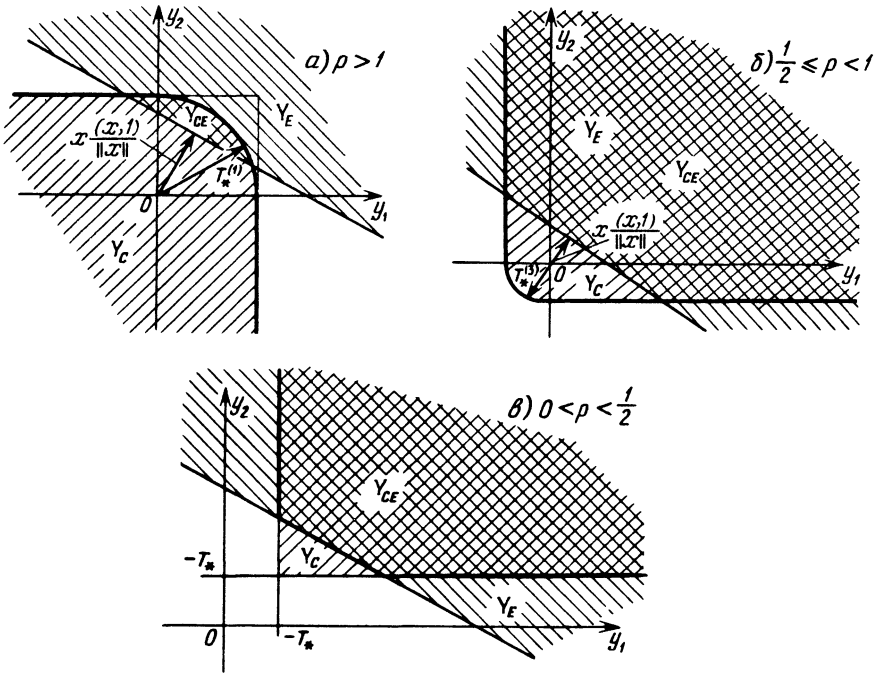


Рис. 18. Области выпуклости и существования для регрессии $(1 + \alpha x_i)^p$, $p > 0$, $n = 2$

существует такое $\alpha_0 > 0$, что $d^2 Q(\alpha_0)/d\alpha^2 \leq 0$. Это следует непосредственно из выражения для второй производной исследуемой функции:

$$\frac{d^2 Q}{d\alpha^2} = 2p [(1-p) \Sigma (1 + \alpha x_i)^{p-2} x_i y_i - (1-2p) \Sigma (1 + \alpha x_i)^{2p-2} x_i^2].$$

Поскольку $p - 2 < 2p - 2$ при $p > 0$, то для любого $y \in R^n$ при $\alpha \rightarrow \infty$ начиная с некоторого α_0 вторая производная $Q(\alpha)$ будет отрицательной.

Как выйти из этого положения? Естественно ограничить априорное множество параметров Λ сверху, т.е. рассмотреть $\Lambda = (0, a)$. Найдем

$$\min_{0 \leq \alpha \leq a} T_0(\alpha) = T_*. \quad (1.26)$$

Заметим теперь, что $-\infty < T_* < 0$. Как было показано в начале этого параграфа, область выпуклости в этом случае будет прямоугольный конус

$$Y_C = \{ y \in R^n : y_i > -T_*, \quad i = 1, \dots, n \}$$

(см. рис. 18, в). Ниже этот случай будет исследован более детально.

Практически пользоваться построенными областями выпуклости можно следующим образом. Пусть $y^0 \in R^n$ – фактический набор наблюдений. Тогда если $y^0 \in Y_C$, то $Q(\alpha)$ с функцией (1.18) является выпуклой для $\alpha > 0$. Если к тому же $y^0 \in Y_C \cap Y_E$, то минимум $Q(\alpha)$ достигается.

В данном примере мы воспользовались элементарным (знаковым) сведением относительно вектора вторых производных функции-регрессии, а именно его положительностью ($\dot{f}(\alpha) \in R_+^n$ при $p > 1$) или отрицательностью ($\dot{f}(\alpha) \in R_-^n$ при $0 < p < 1$). Можно было учесть другие, менее три-

виальные свойства этого вектора, которые существенно расширяют область выпуклости, типа возрастания (убывания), выпуклости (вогнутости) вектора $\ddot{f}(\alpha)$. Таким способом в § 4, гл. 3 мы строили суженное априорное множество (см. определение монотонности первого и второго порядка).

Например, предположим, что вектор второй производной возрастает по i равномерно по $\alpha \in \Lambda$ (монотонность первого порядка). В дополнение к этому допустим, что координаты этого вектора положительны. Последнее может быть записано как

$$0 < \dot{f}_1(\alpha) < \dot{f}_2(\alpha) < \dots < \dot{f}_n(\alpha), \quad \alpha \in \Lambda, \quad (1.27)$$

или системой неравенств

$$(r_i, \ddot{f}(\alpha)) > 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.28)$$

где

$$r_1 = (1, 0, \dots, 0), \quad r_2 = (-1, 1, 0, \dots, 0), \dots, r_n = (0, \dots, 0, -1, 1).$$

Системе неравенств (1.28) соответствует заостренный многогранный конус

$$K = \{u \in R^n: (u, r_i) > 0, \quad i = 1, \dots, n\}. \quad (1.29)$$

Этот конус лежит в R_+^n и намного "уже" конуса R_+^n (который соответствует условию положительности координат $\ddot{f}_i(\alpha)$). Отрицательно сопряженным к (1.29) будет конус

$$K^- = \{y \in R^n: \sum_{i=1}^n y_i < 0, \quad j = 1, 2, \dots, n\}. \quad (1.30)$$

Этот конус будет намного "шире" конуса R_-^n , поэтому область выпуклости, построенная с использованием условия возрастания (1.27), будет шире области выпуклости, построенной на основе одного условия положительности $\ddot{f}_i(\alpha)$, $i = 1, \dots, n$.

Проиллюстрируем это предложение на регрессии (1.18). Перенумеруем наблюдения в порядке возрастания x_i . Итак, будем считать $0 < x_1 < \dots < x_n$; рассмотрим для простоты только случай $p > 2$. Введем функцию

$$\psi(x) = x(1 + \alpha x)^{p-1}, \quad \alpha > 0, \quad p > 2.$$

Элементарно проверяется, что эта функция является возрастающей поч $x > 0$. Поскольку $x_{i+1} > x_i$ и $\dot{f}_i(\alpha) = p\psi(x_i)$, то можно считать, что для (1.18) условие возрастания (1.27) выполнено. Как следует из (1.15), решением системы неравенств (1.9) будет множество

$$K^- + \frac{\nu}{\|\nu\|} T^*,$$

где $\nu \in R^n$ такой, что $(\nu, u) > 0$ для любого $u \in K$. Последнее условие для многогранного конуса (1.29) эквивалентно тому, чтобы $(\nu, r_i) > 0$, $i = 1, \dots, n$. Выбор ν может быть осуществлен многими способами, при этом будут получаться разные

ответы. Для исследуемой регрессии имеет смысл положить $\nu = x = (x_1, \dots, x_n) \in R^n$. В силу принятого соглашения $x_{i+1} > x_i > 0$, поэтому условие $(\nu, r_i) > 0$ для этого вектора выполнено. Окончательно область выпуклости $Q(\alpha)$ для регрессии с функцией (1.18) при $p > 2$ будет сдвинутый конус

$$K^- + T^* \frac{x}{\|x\|}$$

– множество тех наблюдений y_1, \dots, y_n , для которых имеют место следующие неравенства:

$$\sum_{i=j}^n \left(y_i - \frac{T^*}{\|x\|} x_i \right) < 0, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Перейдем теперь к многомерному случаю; для простоты будем считать, что априорное множество параметров Λ совпадает с R^m . Воспользуемся старым приемом сведения многомерных задач регрессии к одномерной. А именно, рассмотрим в пространстве параметров R^m всевозможные прямые и соответствующие ей одномерные регрессии. Покажем, что пересечение максимальных областей выпуклости одномерных нелинейных регрессий по всем прямым совпадает с максимальным множеством выпуклости исходной многомерной регрессии \bar{Y}_C .

Итак, выберем $\alpha_0 \in R^m$ и $\|\nu\| = 1$ и рассмотрим соответствующую прямую $l = l(\lambda) = \alpha_0 + \lambda\nu$, $-\infty < \lambda < \infty$. Соответствующую одномерную нелинейную регрессию записываем в виде $\varphi(\lambda) = \varphi(\lambda; \alpha_0, \nu) = f(\alpha + \lambda\nu) \in R^n$. Выберем некоторую точку $\pi \in R^n$, тогда максимальным множеством выпуклости для полученной одномерной регрессии $\varphi(\lambda)$ будет

$$\begin{aligned} \bar{Y}_C(\alpha_0, \nu) = & \bigcap_{-\infty < \lambda < \infty} \{y \in R^n: (y - \pi, \dot{\varphi}(\lambda)) < \\ & < \|\dot{\varphi}(\lambda)\|^2 + (\varphi(\lambda) - \pi, \ddot{\varphi}(\lambda))\}. \end{aligned}$$

Теперь найдем пересечение всех этих "одномерных" множеств выпуклости; нетрудно показать, что

$$\bar{Y}_C = \bigcap_{\substack{\alpha_0 \in R^m \\ \nu \in R^m \\ \|\nu\| = 1}} \bar{Y}_C(\alpha_0, \nu). \quad (1.31)$$

Этот факт позволяет в принципе рассматривать области выпуклости только одномерных регрессий, однако не всегда такое сведение упрощает задачу.

Простейшую область выпуклости в виде шара можно построить, опираясь на неравенство Коши – Буняковского, как и в случае одномерной регрессии, поскольку

$$\sum (y_i - \pi_i) \nu^T H_i \nu \leq (\sum (y_i - \pi_i)^2)^{1/2} (\sum (\nu^T H_i \nu)^2)^{1/2}.$$

Отсюда следует, что областью выпуклости будет открытый шар

$$Y_C = \{y \in R^n: \|y - \pi\| < T^*\}, \quad (1.32)$$

где

$$T^* = \inf_{\alpha, \nu} T_\pi(\alpha, \nu), \quad (1.33)$$

$$T_\pi(\alpha, \nu) = \frac{\nu^T [F^T(\alpha)F(\alpha) + \sum (f_i(\alpha) - \pi_i)H_i(\alpha)]\nu}{[\sum (\nu^T H_i(\alpha)\nu)^2]^{1/2}}.$$

Как и в одномерном случае, можно показать, что необходимым условием непустоты области выпуклости является условие $T^* \neq -\infty$.

Более широкие области выпуклости для многомерных регрессий можно построить, привлекая знание о матрицах вторых производных $H_i(\alpha)$. Рассмотрим систему векторов $n \times 1$

$$P(\alpha, \nu) = (\nu^T H_1(\alpha)\nu, \nu^T H_2(\alpha)\nu, \dots, \nu^T H_n(\alpha)\nu), \quad (1.34)$$

$$\alpha \in R^m, \quad \|\nu\| = 1.$$

Допустим теперь, что вместо условия принадлежности (1.8) в случае одномерной регрессии известно, что для многомерной регрессии для любых $\alpha \in R^m$, $\|\nu\| = 1$ имеет место

$$P(\alpha, \nu) \in K, \quad (1.35)$$

причем K — заостренный конус. Тогда, как и в случае одномерной регрессии, область выпуклости $Q(\alpha)$ имеет вид конусоподобного множества.

Как и в одномерном случае, можно выбрать вектор $\pi \in R^n$, служащий "центром" области выпуклости. Аналогично можно строить вместо шара (1.32) эллипсоиды, задаваясь положительно определенной матрицей.

Пользуясь матричным аналогом неравенства Коши — Буняковского (2.29) из гл. 3, можно предложить оценку снизу для $T_\pi(\alpha, \nu)$, сняв один \inf по ν в формуле (1.33). Нетрудно показать, что имеет место следующая оценка снизу:

$$\inf_{\alpha} \lambda_{\min}^2(R(\alpha)(\sum H_i^2(\alpha))^{-\frac{1}{2}}) \leq (T^*)^2, \quad (1.36)$$

где

$$R(\alpha) = F^T(\alpha)F(\alpha) - \sum (f_i(\alpha) - \pi_i)H_i(\alpha).$$

В качестве примера рассмотрим класс квазилинейных регрессий (см. § 3, гл. 1). В этом случае

$$f_i(\alpha) = g(\alpha^T x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Ранг системы векторов $x_1, \dots, x_n \in R^m$ считаем, как и прежде, равным m , g — строго возрастающая дважды непрерывно дифференцируемая

функция действительного переменного. Для этого класса регрессии

$$\frac{\partial f_i}{\partial \alpha} = x_i \dot{g}(\alpha^T x_i), \quad \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha^2} = H_i(\alpha) = x_i x_i^T \ddot{g}(\alpha^T x_i).$$

Вектор $P(\alpha, \nu)$ в этом случае равен

$$P(\alpha, \nu) = ((\nu, x_1)^2 \ddot{g}(\alpha^T x_1), (\nu, x_2)^2 \ddot{g}(\alpha^T x_2), \dots, (\nu, x_n)^2 \ddot{g}(\alpha^T x_n)).$$

Допустим, что $\ddot{g} > 0$. Последнее приводит к n линейным (относительно $P(\alpha, \nu)$) неравенствам

$$(e_i, P(\alpha, \nu)) \geq 0, \quad i = 1, \dots, n \quad \forall \alpha, \nu \in R^m, \quad (1.37)$$

где e_i — единичный орт (вектор, у которого на i -м месте стоит 1, остальные компоненты равны нулю). Система неравенств (1.37) эквивалентна принадлежности $P(\alpha, \nu)$ заостренному конусу — положительному ортанту R_+^n .

Предположим далее, что g ограничена снизу числом \underline{g} . В этом случае в качестве π целесообразно взять $\underline{g} \cdot 1$ (это будет видно из дальнейшего). Тогда для квазилинейной регрессии

$$T(\alpha, \nu) = \frac{\sum (\nu, x_i)^2 [\dot{g}^2(\alpha^T x_i) + (g(\alpha^T x_i) - \underline{g}) \ddot{g}(\alpha^T x_i)]}{[\sum (\nu, x_i)^4 \ddot{g}^2(\alpha^T x_i)]^{1/2}}, \quad (1.38)$$

$$T^* = \inf_{\alpha, \nu} T(\alpha, \nu) \geq 0.$$

Конусом, отрицательно сопряженным к положительному ортанту, будет отрицательный ортант, т.е. конус, порожденный отрицательными ортвекторами $(-e_1, -e_2, \dots, -e_n)$. На основании этого можно утверждать, что область выпуклости такой квазилинейной регрессии будет множество

$$\{y \in R^n: y_i < \underline{g} + T^*, \quad i = 1, \dots, n\},$$

скругленное сферой $y: \|y - \underline{g} \cdot 1\| = T^*$ (рис. 19).

Как следует из § 3, гл. 1, нижняя грань суммы квадратов для квазилинейной регрессии с нижней асимптотой \underline{g} достижима, если $y_i > \underline{g}$.

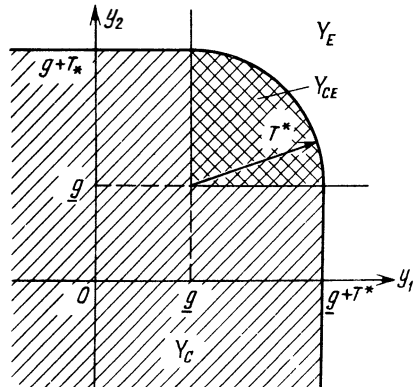


Рис. 19. Области выпуклости и существования для квазилинейной регрессии ($n = 2$)

Область существования решения, таким образом, есть

$$Y_E = \{y \in R^n: y_i > \underline{g}, i = 1, \dots, n\},$$

а пересечением области выпуклости и области существования в этом случае будет сектор шара

$$Y_{CE} = \{y \in R^n: y_i > \underline{g}, i = 1, \dots, n\} \cap$$

$$\cap \{y \in R^n: \sum (y_i - \underline{g})^2 < (T^*)^2\}$$

(см. рис. 19) Разумеется, в конкретном случае, используя другие специфические особенности функции g , можно построить более широкие области выпуклости.

Второй пример многомерной регрессии посвящен связным регрессиям (см. § 3, гл. 3). Рассмотрим наиболее простой случай $(m, m + 1)$ -связной регрессии, ее функция имеет вид

$$f_i(\alpha) = (\alpha, x_i) + g(\alpha)z_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

$\alpha \in R^m$, $g(\alpha)$ — дважды непрерывно дифференцируемая функция, $x_i \in R^m$, $z_i \in R^1$, $z = (z_1, \dots, z_n) \neq 0$. В этом случае

$$P(\alpha, \nu) = \nu^T \frac{\partial^2 g}{\partial \alpha^2} \nu \cdot z.$$

Будем считать $g(\alpha)$ выпуклоопределенной, допустим, выпуклой, т.е. $\partial^2 g(\alpha) / \partial \alpha^2 > 0$, поэтому конусом принадлежности для $P(\alpha, \nu)$ будет полупространство $\{y \in R^n: (y, z) > 0\}$, соответственно открытым отрицательно сопряженным конусом будет полупространство $\{y \in R^n: (y, z) < 0\}$. Для определения области выпуклости осталось найти значение (1.33). Для $(m, m + 1)$ -связной регрессии имеем ($\pi = 0$)

$$T(\alpha, \nu) = \frac{\nu^T (X + zr^T(\alpha))^T (X + zr^T(\alpha)) \nu}{\|z\| \nu^T h(\alpha) \nu} + V(\alpha),$$

где

$$r(\alpha) = \frac{\partial g}{\partial \alpha}, \quad h(\alpha) = \frac{\partial^2 g}{\partial \alpha^2},$$

$$V(\alpha) = \frac{1}{\|z\|} \sum z_i(\alpha, x_i) + \|z\| g(\alpha).$$

Предположим, что существует минимум $V(\alpha)$, $\alpha \in R^m$; точка минимума находится из решения системы уравнений

$$r(\alpha) = - \frac{\sum z_i x_i}{\|z\|^2}.$$

Если это решение обозначить α_* , то $\min V(\alpha) = V(\alpha_*)$. Таким образом, можно считать

$$T^* \geq V(\alpha_*) + \frac{1}{\|z\|} \min_{\nu} \frac{\nu^T (X + z r^T(\alpha))^T (X + z r^T(\alpha)) \nu}{\nu^T h(\alpha) \nu}.$$

Минимизация подобной функции уже встречалась ранее в § 3, гл. 3. Аналитическое нахождение минимума этой функции опирается на знание о матрице $h(\alpha)$. Так, допустим, что $h(\alpha) \leq h$ – положительно определенная матрица. Таким образом, можно считать

$$0 \leq \nu^T h(\alpha) \nu \leq h_*, \quad \|\nu\| = 1. \quad (1.39)$$

Найдем оценку снизу выражения

$$\nu^T (X + z r^T(\alpha))^T (X + z r^T(\alpha)) \nu = \|X\nu + z(r(\alpha), \nu)\|^2, \quad \|\nu\| = 1.$$

Очевидно,

$$\|X\nu + z(r(\alpha), \nu)\|^2 \geq \min_{\theta \in R^1} \|X\nu + \theta z\|^2 =$$

$$= \nu^T X^T \left(I - \frac{z z^T}{\|z\|^2} \right) X \nu,$$

поэтому в условиях (1.39) окончательно можно считать

$$T^* \geq V(\alpha_*) + \frac{1}{\|z\| h_*} \lambda_{\min}(X_z^T X_z) = T', \quad (1.40)$$

где

$$X_z = \left(I - \frac{1}{\|z\|} z z^T \right) X.$$

Окончательно область выпуклости для $(m, m + 1)$ -связной регрессии будет полупространство

$$Y_C = \{ y \in R^n: (y, z) < T' \},$$

где T' задается выражением (1.40).

§ 2. Критерий одностационарности. Метод конусов

В предыдущем параграфе этой главы искалось множество таких наблюдений $y \in R^n$, для каждого из которых функция $Q(\alpha)$ становилась выпуклой на всем априорном множестве параметров Λ . При этом ответом являлась область выпуклости. Можно пойти обратным путем: исходя из свойств функций регрессии, построить так называемую *естественную область наблюдений* – такое множество наблюдений, которое имеет "те же свойства",

что и система функций $\{f_i(\alpha), i = 1, \dots, n\}$. Для него затем необходимо доказать выпуклость или одностационарность $Q(\alpha), \alpha \in \Lambda$. Другими словами, если ранее "благоприятные" области наблюдений находились из накладываемых условий на функцию $Q(\alpha)$ типа "выпуклость", то теперь эти области в некотором роде угадываются. В этом параграфе будет показано, как можно осуществить этот подход для построения областей одностационарности $Q(\alpha)$.

Сначала допустим, что функции-регрессии положительны:

$$f_i(\alpha) > 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad \alpha \in \Lambda. \quad (2.1)$$

Для положительных функций-регрессий "естественными" (адекватными) наблюдениями следует считать наблюдения $y_i > 0, i = 1, \dots, n$. Вопрос ставится следующим образом: для данной регрессии найти условия, при которых $Q(\alpha)$ будет одностационарной для всех $y_i > 0$ при условии (2.1).

Говорим, что $Q(\alpha), \alpha \in \Lambda$, не является одностационарной на множестве $y_1 > 0, \dots, y_n > 0$, если существуют такие $\alpha_1, \alpha_2 \in \Lambda, y_1 > 0, \dots, y_n > 0$, что

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha}(\alpha_1) = 0, \quad \frac{\partial Q}{\partial \alpha}(\alpha_2) = 0, \quad \alpha_1 \neq \alpha_2. \quad (2.2)$$

Введем следующие составные векторы из R^{2m} :

$$d_i = d_i(\alpha_1, \alpha_2) = \begin{pmatrix} d_i^1 \\ d_i^2 \end{pmatrix}, \quad d_i^k = d_i^k(\alpha_k) = \frac{\partial f_i(\alpha_k)}{\partial \alpha},$$

$$b = b(\alpha_1, \alpha_2) = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad b_k = b(\alpha_k) = \sum f_i(\alpha_k) \frac{\partial f_i(\alpha_k)}{\partial \alpha}, \quad k = 1, 2.$$

Система (2.2) тогда переписывается как

$$\sum y_i d_i = b. \quad (2.3)$$

Пусть $K = K(\alpha_1, \alpha_2)$ – конус в пространстве R^{2m} , натянутый на n векторов d_1, d_2, \dots, d_n , т.е.

$$K(\alpha_1, \alpha_2) = \{s \in R^{2m}: s = \sum v_i d_i, \quad v_i \geq 0\}.$$

На геометрическом языке одностационарность $Q(\alpha)$ на множестве положительных наблюдений, как следует из (2.3), равносильна следующему условию принадлежности:

$$b(\alpha_1, \alpha_2) \in K(\alpha_1, \alpha_2), \quad \alpha_1 \neq \alpha_2 \in \Lambda. \quad (2.4)$$

Метод построения области одностационарности, основанный на условии принадлежности (2.4), в дальнейшем будем называть *методом конусов*. Первый результат, связанный с этим методом, состоит в том, что для того чтобы сумма квадратов отклонений была одностационарной, необходимо, чтобы векторы d_1, \dots, d_n были однонаправлены при всех $\alpha_1, \alpha_2 \in \Lambda$. В противном случае K совпадает со всем пространством и (2.4) не имеет места для любого $b(\alpha_1, \alpha_2)$. Докажем более сильный результат.

Теорема 2.1. Если существует такая пара векторов $\alpha_1, \alpha_2 \in \Lambda$, что векторы d_1, \dots, d_n разнонаправлены, то для любых положительных v_1, \dots, v_n (w_1, \dots, w_n) найдется набор наблюдений y_1, \dots, y_n такой, что $y_i \geq v_i$ ($0 < y_i \leq w_i$) и сумма квадратов отклонений имеет две стационарные точки α_1 и α_2 .

Доказательство. Достаточно показать, что в условиях теоремы система линейных уравнений (2.3) относительно y_1, y_2, \dots, y_n совместна при $y_i \geq v_i > 0, i = 1, \dots, n$. Обозначим через D матрицу $2m \times n$, вектор-столбцы которой суть векторы d_1, \dots, d_n . Тогда (2.3) переписывается как

$$Dy = b \text{ или } D(y - v) = b - Dv.$$

На геометрическом языке совместность этой системы при $y - v > 0$ означает, что $b - Dv \in K$. Но в силу разнонаправленности d_1, \dots, d_n $K = R^{2m}$, поэтому условие принадлежности выполнено, $\partial Q(\alpha_i)/\partial \alpha = \partial Q(\alpha_2)/\partial \alpha = 0$.

В случае $0 < y_i \leq w_i$ систему (2.3) перепишем как $D(w - y) = Dw = b$. Опять же $Dw - b \in K = R^{2m}$. Доказательство теоремы закончено.

Нетрудно показать, что если составляющие векторов $\{d_i\}$, т.е. $\{d_i^1\}$ и $\{d_i^2\}$, однонаправлены, то такой является и система $\{d_i\}$. Действительно, пусть d_1^1, \dots, d_n^1 и d_1^2, \dots, d_n^2 однонаправлены в R^m . Тогда существует такая пара векторов γ_1 и γ_2 , что $(\gamma_1, d_i^1) > 0$ и $(\gamma_2, d_i^2) > 0$. Положим $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2) \in R^{2m}$. Тогда $(\gamma, d_i) = (\gamma_1, d_i^1) + (\gamma_2, d_i^2) > 0$, т.е. d_1, \dots, d_n однонаправлены. Обратное, вообще говоря, неверно: разнонаправленность составляющих $\{d_i^k\}, k = 1, 2$ не означает разнонаправленности $\{d_i\}$.

Перейдем к примерам. Особенно просто метод конусов применяется в случае одного оцениваемого параметра, т.е. в случае $m = 1$. Общий путь построения критериев одностационарности тогда заключается в следующем. Сначала для данных α_1, α_2 находим ребра конуса K в R^2 . Этим ребрам отвечают граничные значения тангенса угла наклона векторов d_i . Затем сравнением тангенса угла наклона вектора b с граничными устанавливается условие непринадлежности вектора b конусу K .

Начнем с ранее исследовавшейся функции (см. § 1)

$$f_i(\alpha) = (1 + \alpha x_i)^p, \quad \alpha > 0, \quad x_i > 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.5)$$

p — фиксировано, $y_i > 0$. Напомним, что оценка МНК соответствующей регрессии существует, если $\sum y_i x_i > \sum x_i$, в частности, если $y_i > 1$. Как и ранее, исследование (2.5) разбивается на несколько случаев в зависимости от значения p . Мы не будем проводить полное исследование, ограничимся лишь некоторыми случаями.

1. $p > 1$. Легко проверить, что для функции регрессии (2.5)

$$d_i = \begin{pmatrix} (1 + \alpha_1 x_i)^{p-1} x_i \\ (1 + \alpha_2 x_i)^{p-1} x_i \end{pmatrix}, \quad b = p \begin{pmatrix} \sum (1 + \alpha_1 x_i)^{2p-1} x_i \\ \sum (1 + \alpha_2 x_i)^{2p-1} x_i \end{pmatrix}.$$

В силу положительности x_i векторы d_1, d_2, \dots, d_n лежат в первом квадранте. Поэтому конус K , натянутый на эти векторы, является остроугольным. Найдем его ребра. Для определенности будем считать $0 < \alpha_1 < \alpha_2$. Ранжируем наблюдения в порядке возрастания x_i , таким образом, счи-

таем $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. Тогда максимальный тангенс угла наклона d_i соответствует x_n , а минимальный x_1 . Итак,

$$\min_i \operatorname{tg}(d_i) = \operatorname{tg}(d_1) = \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1} \right)^{p-1},$$

$$\max_i \operatorname{tg}(d_i) = \operatorname{tg}(d_n) = \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1} \right)^{p-1},$$

где $\delta = \alpha_2 - \alpha_1 > 0$, $\operatorname{tg}(d_i)$ – тангенс угла наклона вектора $d_i \in R^2$ к оси абсцисс. Таким образом, ребра конуса K – векторы d_1 и d_n . Поэтому $b \in K$, если выполнено одно из двух условий: $\operatorname{tg}(b) \geq \operatorname{tg}(d_n)$, либо $\operatorname{tg}(b) \leq \operatorname{tg}(d_1)$, где

$$\operatorname{tg}(b) = \frac{\sum (1 + \alpha_2 x_i)^{2p-1} x_i}{\sum (1 + \alpha_1 x_i)^{2p-1} x_i}.$$

Оценим сначала сверху и снизу значение $\operatorname{tg}(b)$. Имеем

$$\begin{aligned} (1 + \alpha_2 x_i)^{2p-1} x_i &= [(1 + \alpha_1 x_i) + \delta x_i]^{2p-1} x_i = \\ &= x_i (1 + \alpha_1 x_i)^{2p-1} \left(1 + \frac{\delta x_i}{1 + \alpha_1 x_i} \right)^{2p-1}. \end{aligned}$$

Поэтому при условии, что $p > 1$,

$$\left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1} \right)^{2p-1} \leq \operatorname{tg}(b) \leq \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1} \right)^{2p-1}.$$

Как уже отмечалось, $b \in K$ может произойти в двух случаях:

$$\text{а) } \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1} \right)^{2p-1} \leq \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1} \right)^{p-1},$$

$$\text{б) } \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1} \right)^{2p-1} \geq \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1} \right)^{p-1}.$$

Нетрудно показать, что случай а) не может иметь места. Неравенство б) определяет условие одностационарности суммы квадратов. Очевидно, $Q(\alpha)$ не является для исследуемой функции регрессии одностационарной на R^1 при $y_1 > 0, \dots, y_n > 0$; $x_1, \dots, x_n > 0$. На основе б) найдем простые достаточные условия одностационарности. Возведем обе части последнего неравенства в степень $1/(p-1)$ и к левой части применим неравенство $(1+x)^\theta \geq 1+\theta x$, где $x, \theta \geq 0$. Прделав эти преобразования, найдем, что неравенство б) является следствием более сильного неравенства $p\alpha_1 \geq (p-1)/x_1 - (2p_1-1)/x_n$. Последнее неравенство определяет то мно-

жество значений параметра, на котором сумма квадратов отклонений одно- стационарна при любых положительных наблюдениях. Учитывая, что $\alpha_1 > 0$, это неравенство будет иметь место, если

$$(p-1)x_1 < (2p-1)x_n, \quad (2.6)$$

что является следствием другого неравенства, не содержащего p : $x_n \leq 2x_1$.

2. $1/2 \leq p \leq 1$. В этом случае

$$\max_i \operatorname{tg}(d_i) = \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1}\right)^{p-1},$$

$$\min_i \operatorname{tg}(d_i) = \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1}\right)^{p-1}.$$

Условие непринадлежности (2.4) выполнено тогда и только тогда, когда имеет место одно из двух неравенств:

$$\text{а) } \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1}\right)^{2p-1} \leq \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1}\right)^{p-1},$$

$$\text{б) } \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1}\right)^{2p-1} \geq \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1}\right)^{p-1}.$$

Поскольку $p-1 \leq 0$, но $2p-1 \geq 0$, первое неравенство не может иметь места. Наоборот, второе неравенство всегда верно.

3. $0 < p < 1/2$. Аналогично предыдущим случаям можно показать, что условие (2.4) выполнено, если имеет место хотя бы одно из двух неравенств:

$$\text{а) } \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1}\right)^{2p-1} \leq \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1}\right)^{p-1},$$

$$\text{б) } \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_n} + \alpha_1}\right)^{2p-1} \geq \left(1 + \frac{\delta}{\frac{1}{x_1} + \alpha_1}\right)^{p-1}.$$

Первое неравенство опять неверно. Второе задает условие одностационарности $Q(\alpha)$. На основе его, применяя тот же метод, что и в случае 1, можно получить более грубое неравенство: $p\alpha_1 > (1-2p)/x_1 - (1-p)/x_n$. Ясно, что если

$$(1-2p)x_1 < (1-p)x_n, \quad (2.7)$$

то $Q(\alpha)$ будет одностационарной при $0 < p < 1/2$ для всех $y_i > 0$ на множестве $\alpha > 0$. Очевидно, (2.7) является следствием неравенства $x_n < 2x_1$.

Итак, нами установлено, что $Q(\alpha)$ для функции-регрессии (2.5) одно-стационарна для любых положительных наблюдений y_1, \dots, y_n на множестве $\alpha > 0$, если имеет место неравенство (2.6) при $p > 1$, неравенство (2.7) – при $0 < p < 1/2$; при $1/2 \leq p < 1$ функция $Q(\alpha)$ одностационарна при любых $y_1, \dots, y_n, x_1, \dots, x_n > 0$. Напомним, что (2.6) и (2.7) имеют место, если выполнено условие (компактности)

$$\max_i x_i < 2 \min_i x_i. \quad (2.8)$$

Следующий пример представляет собой простейший случай логлинейной модели (регрессия линейная в логарифмах). В экономических приложениях к регрессии с такой функцией приводит задача оценивания производственных функций Кобба–Дугласа (см. (5.1), гл. 1) с известным коэффициентом масштаба $A > 0$. Например, если ряды выпуска, основных фондов и затрат труда перевести в индексную форму, то этот коэффициент можно положить равным единице. Итак, пусть

$$f_i(\alpha) = \exp(\alpha x_i), \quad -\infty < \alpha < \infty, \quad (2.9)$$

где не теряя общности можно считать $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n$. Как показано в первой главе, уравнение $dQ/d\alpha = 0$ для этой функции имеет хотя бы одно решение для любых положительных наблюдений y_1, \dots, y_n . Исследуем единственность этого решения методом конусов. Естественной областью наблюдений, как и ранее, является множество положительных наблюдений. Прежде всего заметим, что можно считать $x_i \neq 0$, так как в противном случае квадрат отклонения с соответствующим индексом равен $(y_i - 1)^2$, не зависит от параметра и меняет значение $Q(\alpha)$ лишь на постоянную величину. Для модели (2.9) имеем

$$d_i = \begin{pmatrix} x_i \exp(\alpha_1 x_i) \\ x_i \exp(\alpha_1 x_i) \exp(\delta x_i) \end{pmatrix},$$

$$b = \begin{pmatrix} \sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i) \\ \sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i) \exp(2\delta x_i) \end{pmatrix},$$

где не теряя общности можно считать $\alpha_1 < \alpha_2$ и $\delta_1 = \alpha_2 - \alpha_1 > 0$. Одно-стационарность $Q(\alpha)$ в решающей степени зависит от однонаправленности (знака) последовательности x_1, \dots, x_n . В соответствии с этим рассмотрим три возможности.

1. $x_i > 0$ для всех $i = 1, \dots, n$ (последовательность $\{x_i\}$ однонаправлена). Конус K в R^2 тогда является заостренным, причем

$$\max_i \operatorname{tg}(d_i) = \exp(\delta x_n), \quad \min_i \operatorname{tg}(d_i) = \exp(\delta x_1).$$

Как и ранее, будем считать наблюдения ранжированными по x_i . Условие (2.4) выполнено тогда и только тогда, когда имеет место хотя бы одно из двух неравенств:

а) $\sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i) \exp(2\delta x_i) / \sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i) \leq \exp(\delta x_1)$,

б) $\sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i) \exp(2\delta x_i) / \sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i) \geq \exp(\delta x_n)$.

Поскольку

$$\sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i) \exp(2\delta x_i) \geq \exp(2\delta x_1) \sum x_i \exp(2\alpha_1 x_i),$$

первое неравенство не имеет места. Рассмотрим неравенство б). Применяя к его левой части ту же оценку снизу, приходим к более грубому: $\exp(2\delta x_1) \geq \exp(\delta x_1)$. Поэтому, если $x_n \leq 2x_1$, то нелинейное уравнение $dQ/d\alpha = 0$ имеет единственное решение относительно α при любых положительных наблюдениях. Это утверждение обратимо: если $x_n > 2x_1$, то существуют такие $y_1, \dots, y_n > 0$ и такие $\alpha_1 \neq \alpha_2$, что $dQ(\alpha_1)/d\alpha = 0$, $dQ(\alpha_2)/d\alpha = 0$. Действительно, рассмотрим левую часть б) как функцию α_1 . При $\alpha_1 \rightarrow -\infty$ ее предел равен $\exp(2\delta x_1)$. Поэтому, если $x_n > 2x_1$, то существует такое $\alpha_1 < 0$, что б) неверно. А это и означает многостационарность суммы квадратов для некоторого набора y_1, \dots, y_n .

2. $x_i < 0$, $i = 1, \dots, n$. Этот случай сводится к предыдущему репараметризацией модели. Положим $\beta = -\alpha$, $z_i = -x_i$; как следует из предыдущего, $Q(\alpha)$ одностационарна для любых положительных наблюдений тогда и только тогда, когда $x_1 \geq 2x_n$.

3. Последовательность x_1, \dots, x_n содержит как положительные, так и отрицательные значения. Хотя набор чисел x_1, \dots, x_n , рассматриваемый как последовательность векторов в R^1 , является разнонаправленным, векторы d_1, d_2, \dots, d_n , будут однонаправлены в R^2 , а конус K заостренным. Докажем это. Векторы $\{d_i\}$ лежат в первом и третьем квадранте R^2 . Максимальный тангенс угла наклона для положительных x_i равен $\exp(\delta x_1)$; максимальный тангенс угла наклона для отрицательных x_i равен $\exp(\delta x_n^-)$, минимальный — $\exp(\delta x_1)$, где $x_n^- = \max\{x_i, x_i < 0\}$. Поскольку $\exp(\delta x_1) \leq \exp(\delta x_n^-) \leq \exp(\delta x_n)$, конус K будет заостренным, а векторы d_i однонаправленными. Тем не менее, как сейчас будет установлено, в рассматриваемом случае для любой последовательности x_1, x_2, \dots, x_n существуют такие положительные наблюдения, что $Q(\alpha)$ имеет несколько стационарных точек. Действительно, предел левой части неравенства б) при $\alpha_1 \rightarrow +\infty$ равен $\exp(2\delta x_n)$, а при $\alpha_1 \rightarrow -\infty$ равен $\exp(2\delta x_1)$. Поэтому выбором некоторого $\alpha_1 > 0$ можно добиться того, чтобы $b \in K$, что и приведет к многостационарности $Q(\alpha)$.

Суммируя вышеизложенное, приходим к следующему результату. В логлинейной модели с одним оцениваемым параметром (2.9) для одностационарности суммы квадратов с произвольными положительными наблюдениями необходимо и достаточно, чтобы, во-первых, последовательность x_1, x_2, \dots, x_n была одного знака и, во-вторых, для нее было выполнено условие (компактности): $\max_i x_i \leq 2 \min_i x_i$ ($x_i > 0$) и

$$2 \max_i x_i \leq \min_i x_i \quad (x_i < 0).$$

В рассмотренных примерах условие одностационарности находилось в терминах последовательности x_1, x_2, \dots, x_n . Существует другая возможность — искать условия одностационарности суммы квадратов в терминах выбора подходящего априорного множества параметров. Эта возможность будет проиллюстрирована нами на частном случае модели (2.9), модели экспоненциального тренда

$$f_i(\alpha) = e^{\alpha i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.10)$$

Регрессия с такой функцией отклика встречается в экономических приложениях при выделении экспоненциальных трендов с известным коэффициентом пропорциональности. Как уже отмечалось, эту гипотезу можно принять, если ряд y_i перевести в индексную форму. Модель экспоненты интересна тем, что для нее не выполнено условие (2.8), поэтому $Q(\alpha)$ не является одностационарной для всех $y_i > 0$ и $-\infty < \alpha < \infty$. Тем не менее можно найти такие интервалы изменения параметра α , в которых $Q(\alpha)$ одностационарна. Легко видеть, что для (2.10)

$$\operatorname{tg}(b) = \sum i \exp(2\alpha_1 i) \exp(2\delta i) / \sum i \exp(2\alpha_1 i),$$

$$\max_i \operatorname{tg}(d_i) = \exp(\delta n).$$

Поскольку $\operatorname{tg}(b) \rightarrow \exp(2\delta n) > \exp(\delta n)$ при $\alpha_1 \rightarrow +\infty$, то при достаточно большом α_1 условие (2.4) будет выполнено, и $Q(\alpha)$ является одностационарной для всех $y_i > 0$. Найдем это пороговое значение параметра. Таким образом, мы ищем такое $\alpha^* = \alpha_n^*$, что на интервале (α_n^*, ∞) при любых положительных y_1, \dots, y_n сумма квадратов является одностационарной. Интервал (α_n^*, ∞) называем коротко *интервалом одностационарности*.

Рассмотрим числитель разности $\operatorname{tg}(b) - \exp(\delta n)$ и определим, в каком случае он является положительным. Обозначим $\exp(2\alpha_1) = a > 0$, $\exp(\delta) = c > 1$. Тогда интересующая нас величина после сокращения на ac^2 будет равна

$$P = \sum_{i=1}^n ia^{i-1} c^{2(i-1)} - c^{n-2} \sum_{i=1}^n ia^{i-1}.$$

Задача заключается в том, чтобы найти такое пороговое значение $a^* = a_n^*$, что для всех $a \geq a^*$ и $c > 1$ имеем $P \geq 0$. Фиксируем a , тогда относительно c получим полином степени $2(n-1)$, который обозначим $P_{2n-2}(c)$. Очевидно, $P_{2n-2}(0) = 1 > 0$, $P_{2n-2}(1) = 0$, т.е. $c = 1$ — корень полинома ($n > 2$).

Расположив коэффициенты полинома в порядке убывания степени c , можно заметить, что в этой последовательности имеется две перемены знаков, поэтому по теореме Декарта [17] полином $P_{2n-2}(c)$ на интервале $c > 0$ имеет два корня. Первый из найденных нами корней равен 1. Для установления факта одностационарности $Q(\alpha)$ важно, чтобы не было корней, больших единицы. А для этого, как легко догадаться, необходимо и достаточно, чтобы производная рассматриваемого полинома в точке $c = 1$ была неотрицательной. Но

$$P'_{2n-2}(1) = \sum_{i=1}^{n-1} (i+1)(2i+2-n)a^i - (n-2) = P_{n-1}(a).$$

Исследуем теперь корни полинома $P_{n-1}(a)$. По теореме Декарта он имеет единственный положительный корень. Этот корень лежит на интервале $(0, 1)$, поскольку $P_{n-1}(0) = -(n-2) < 0$, $P_{n-1}(1) > 0$. Обозначим этот корень через a_n^* . В силу проделанных рассуждений для всех $a \geq a_n^*$ и $c > 1$ имеем $P \geq 0$. Таким образом, получен следующий результат. *Сумма квадратов отклонений модели (2.10) для любых положительных наблюдений*

одностационарна на интервале $[\alpha_n^*, \infty)$, где $a_n^* = \exp(2\alpha_n^*)$ является корнем полинома

$$P_{n-1}(a) = \sum_1^{n-1} (i+1)(2i+2-n)a^i - (n-2). \quad (2.11)$$

Значения α_n^* для $n = 3, \dots, 26$ приведены ниже.

n	α_n^*	n	α_n^*	n	α_n^*
3	-0,7130	11	-0,1342	19	-0,0745
4	-0,4566	12	-0,1220	20	-0,0706
5	-0,3385	13	-0,1118	21	-0,0671
6	-0,2695	14	-0,1032	22	-0,0639
7	-0,2241	15	-0,0958	23	-0,0610
8	-0,1919	16	-0,0894	24	-0,0584
9	-0,1678	17	-0,0839	25	-0,0559
10	-0,1491	18	-0,0789	26	-0,0537

Для $n \geq 5$ хорошее приближение полинома на интервале $(0,1)$ получается заменой сумм $\sum ia^i$ и $\sum i^2 a^i$ их предельными значениями при $n \rightarrow \infty$. Задача определения корня полинома приводит нас тогда к кубическому уравнению. На основе этого приближения можно показать, что $\alpha_n^* \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Практически использовать найденный интервал одностационарности можно следующим образом. Пусть итеративный процесс минимизации $Q(\alpha)$ или решения нелинейного уравнения $dQ/d\alpha = 0$ для конкретного набора положительных наблюдений привел нас к стационарной точке $a \geq \alpha_n^*$. Тогда, если $y_i \geq \exp(\alpha_n^* i)$ (в частности, если $y_i \geq 1$) для всех $i = 1, 2, \dots, n$, то $Q(\alpha)$ одностационарна и a – точка глобального минимума. Доказательство этого утверждения следует из того, что, если $y_i \geq \exp(\alpha_n^* i)$, то $Q(\alpha)$ на интервале $(-\infty, \alpha_n^*)$ является строго убывающей функцией.

Вернемся к логлинейной модели (2.9) и найдем для нее интервал одностационарности. Как следует из проведенного выше анализа, при условии (2.8) $Q(\alpha)$ одностационарна для любых положительных наблюдений. Пусть теперь (2.8) неверно. Для простоты рассмотрим случай, когда $x_i > 0$, $i = 1, \dots, n$. Как и в случае экспоненты при $\alpha_1 \rightarrow \infty$, получаем $\text{tg}(b) \rightarrow \exp(2\delta x_n) > \exp(\delta x_n)$, т.е. в пределе условие непринадлежности выполнено, а $Q(\alpha)$ одностационарна. В соответствии с этим замечанием ищем такое α_n^* , что на интервале $[\alpha_n^*, \infty)$ уравнение $dQ/d\alpha = 0$ имело бы не более одного решения для любых $y_i > 0$. Рассмотрим числитель разности $\text{tg}(b) - \exp(\delta x_n)$. Разделим его на $\exp(2\delta x_1 + 2\alpha_1 x_1)$ и обозначим

$$p(\alpha_1, \delta) = \sum_1^n x_i e^{2\alpha_1(x_i - x_1)} e^{2\delta(x_i - x_1)} - e^{\delta(x_n - x_1)} \sum_1^n x_i e^{2\alpha_1(x_n - x_i)}.$$

Мы изучаем случай, когда условие компактности не выполнено, т.е. $x_n > 2x_1$. Фиксируем α_1 и рассмотрим p как функцию δ . Легко видеть, что $p(\alpha_1, -\infty) = x_1 > 0$, $p(\alpha_1, \infty) = \infty$, $p(\alpha_1, 0) = 0$, т.е. $\delta = 0$ – корень уравнения $p(\alpha_1, \delta) = 0$. Докажем, что уравнение имеет ровно два корня. Для этого нам потребуется одно обобщение теоремы Декарта.

Обобщенная теорема Декарта. Пусть

$$P(\delta) = \sum_{i=1}^n a_i e^{\delta z_i} + a_0, \quad 0 < z_1 < \dots < z_n.$$

Тогда число корней трансцендентного уравнения $P(\delta) = 0$ с учетом их кратностей равно числу перемен знаков в системе коэффициентов a_1, a_2, \dots, a_n или меньше этого числа на четное число.

Идея доказательства этого утверждения заключается в приближении функции $P(\delta)$ полиномом высокого порядка. Если z_i – рациональные числа, их можно привести к общему знаменателю, и тогда $z_i = m_i/N$. После обозначения $x = \exp(\delta/N) > 0$ функция $P(\delta)$ превращается в полином степени m_n , к которому применяем теорему Декарта. Если среди z_i есть иррациональные числа, с любой степенью точности можно найти их рациональное приближение и приблизить $P(\delta)$ соответствующим полиномом.

Применим эту теорему для выяснения числа корней уравнения $p(\alpha_1, \delta) = 0$. Расположим одночлены p в порядке возрастания показателей (в случае равных показателей приведем подобные члены). Если существует такое i_0 , что $2(x_{i_0} - x_1) = x_n - 2x_1$, то приводя подобные члены при этой степени, получим отрицательный коэффициент:

$$x_i e^{2\alpha_1(x_{i_0} - x_i)} - \sum_1^n x_i e^{2\alpha_1(x_{i_0} - x_i)} < 0.$$

Если такой индекс отсутствует, то и подавно коэффициент при степени с показателем $2x_n - 2x_1$ будет отрицательным. Таким образом, число перемен знака в функции p равно двум, чему и равно по обобщенной теореме Декарта число корней $p(\alpha_1, \delta) = 0$ (нуль является корнем p). Для того чтобы $p(\alpha_1, \delta) \geq 0$ для всех $\delta = 0$, необходимо и достаточно, чтобы $\partial p(\alpha_1, \delta) / \partial \delta > 0$ в точке $\delta = 0$. После несложных вычислений устанавливаем, что это имеет место для всех $\alpha \geq \alpha_n^*$, где α_n^* – корень уравнения

$$\sum_1^n x_i (2x_i - x_n) e^{2\alpha(x_i - x_1)} = 0. \quad (2.12)$$

Уравнение (2.12) не всегда имеет отрицательное решение. Можно показать, что $\alpha_n^* \leq 0$ тогда и только тогда, когда $2\sum x_i^2 \geq x_n \sum x_i$. Таким образом, приходим к следующему результату. Для модели (2.9) при условии $x_i > 0$, $2\min_i x_i < \max_i x_i$ интервалом одностационарности $Q(\alpha)$ является $[\alpha_n^*, \infty)$, где α_n^* – корень уравнения (2.12); $\alpha_n^* \leq 0$ тогда и только тогда, когда

$$(\max_i x_i) \sum_1^n x_i \leq 2 \sum_1^n x_i^2.$$

Метод конусов выше был реализован в предположении положительных наблюдений, т.е. в том случае, когда естественная область наблюдений представляла собой положительный ортант R_+^n . Этот подход, однако, нетрудно обобщить и на более сложные области, в частности, на области в виде многогранника в R^n .

Итак, допустим, на априорном множестве параметров имеют место некоторые линейные неравенства относительно функций отклика

$$Mf(\alpha) = Mf > r, \quad \alpha \in \Lambda, \quad (2.13)$$

где M – невырожденная матрица $n \times n$, r – вектор (знак неравенства между векторами понимается как неравенство между координатами векторов). Естественной областью наблюдений тогда является множество $\{y \in R^n: My > r\}$ – многогранник в R^n .

В матричном виде градиент суммы квадратов равен

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha} = -2F^T(y - f),$$

где $F = F(\alpha)$ – матрица производных $n \times m$, $F_{ij} = \partial f_i / \partial \alpha_j$. Систему $\partial Q / \partial \alpha = 0$, очевидно, можно переписать следующим образом:

$$0 = F^T(y - f) = F^T M^{-1}(My - Mf) = F^T M^{-1}[(My - r) - (Mf - r)],$$

или

$$F^T M^{-1}v = F^T M^{-1}(Mf - r),$$

где $v = (v_1, \dots, v_n)^T$, $v_i > 0$. Окончательно

$$F^T M^{-1}v = F^T(f - M^{-1}r), \quad v > 0. \quad (2.14)$$

Тогда одностационарность $Q(\alpha)$ на множестве $My > r$ равносильна условию непринадлежности (2.4), где теперь вектор d_i^k равен i -му столбцу матрицы $F^T M^{-1} = F^T(\alpha_k)M^{-1}$, $b_k = F^T(\alpha_k)(f(\alpha_k) - M^{-1}r)$, $k = 1, 2$.

Рассмотрим некоторые частные случаи. Пусть функции отклика ограничены снизу: $f_i(\alpha) > r_i$. Тогда $M = I$ и конус K остается без изменения, меняется лишь вектор b . Этот случай сводится к $f_i(\alpha) > 0$ простым преобразованием. Действительно, систему (2.3) можно переписать как

$$\sum (y_i - r_i)d_i = b - \sum r_i d_i,$$

или

$$\sum v_i d_i = b - \sum r_i d_i, \quad v_i > 0.$$

Поэтому $Q(\alpha)$ одностационарна для $y_i > r_i$ тогда и только тогда, когда

$$b - \sum r_i d_i \in K,$$

где K – конус, натянутый на векторы d_1, \dots, d_n .

Ограниченность сверху или снизу функций отклика может быть следствием ограниченности априорного множества параметров Λ . Например, пусть $\alpha \in R^1$, причем известно, что $f_i(\alpha)$ – возрастающие функции по α для любого $i = 1, \dots, n$. Допустим, что $\Lambda = (a, c)$, тогда

$$f_i(a) < f_i(\alpha) < f_i(c).$$

Естественной областью наблюдений тогда можно считать прямоугольник в R^n :

$$f_i(a) < y_i < f_i(c), \quad i = 1, \dots, n.$$

Тогда $Q(\alpha)$ будет одноstationарной на (a, c) тогда и только тогда, когда $b - \sum f_i(a)d_i \in K$, либо $\sum f_i(c)d_i - b \in K$.

Рассмотрим другой случай. Пусть априорное множество таково, что для всех $\alpha \in \Lambda$ имеем $f_{i+1}(\alpha) > f_i(\alpha) > h$, $i = 1, \dots, n-1$. Очевидно, за естественную область наблюдений тогда разумно взять множество $\{y \in R^n: y_{i+1} > y_i > h, i = 1, \dots, n-1\}$. Матрица M и обратная к ней, как легко проверить, равны

$$M = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & \\ -1 & 1 & & & & & & \\ & 0 & -1 & 1 & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & -1 & 1 & \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad M^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & 0 & & & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & 1 & 1 & & & & & \\ & & 1 & 1 & 1 & & & \\ & & & 1 & & \ddots & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Заметим, что этот же результат можно получить простым преобразованием системы (2.3):

$$\begin{aligned} \sum y_i d_i &= (y_1 - h)(d_1 + \dots + d_n) + (y_2 - y_1)(d_2 + \dots + d_n) + \dots \\ &+ \dots + (y_n - y_{n-1})d_n + h \sum_1^n d_i. \end{aligned}$$

Таким образом, "новыми" векторами, образующими конус K , являются $p_i = \sum_{j=i}^n d_j$, $i = 1, \dots, n$. Понятно, что конус, натянутый на векторы p_1, \dots, p_n , будет подмножеством конуса, порожденного векторами d_1, \dots, d_n , поскольку первые являются положительными комбинациями последних.

Наконец, разберем следующий интересный пример естественной области наблюдений. Условие монотонности наблюдений может явиться слишком обременительным. Говорим, что y_1, \dots, y_n являются слабо *монотонными в среднем*, если существует такое $1 < k < n$, что $y_i < \bar{y}$, $i = 1, \dots, k$, но $y_i > \bar{y}$, $i = k + 1, \dots, n$, где $\bar{y} = \sum_1^n y_i/n$ — среднее наблюдений (ср. с

похожим определением из § 5, гл. 1). Понятно, что если y_i — монотонно возрастающие, то они слабо монотонны в среднем. Матрица M устроена следующим образом. До k -й строки диагональные элементы равны $1/n - 1$, вне диагонали элементы матрицы равны 1, после k -й строки структура повторяется, но с обратным знаком.

На языке линейных неравенств можно записать выпуклость (вогнутость) последовательности наблюдений y_1, \dots, y_n , а также другие характерные особенности наблюдений и функций откликов. Успех в нахождении критериев одноэкстремальности во многом зависит от удачного выбора естественной области наблюдений. С помощью ограничений типа линейных неравенств можно описывать области с достаточно сложной структурой.

Теперь перейдем к многомерному случаю $m > 1$. Покажем, что этот случай в некотором смысле сводится к одномерному. Итак, пусть $f_i(\alpha)$,

$i = 1, \dots, n$, $\alpha \in \Lambda \subset R^m$. Сделаем одно простое, но для нас важное замечание: $\partial Q/\partial \alpha = 0$ равносильно $(\partial Q/\partial \alpha, \nu) = 0$ для любого $\nu \in R^m$. Система (2.2) записывается как

$$\begin{aligned} \Sigma \frac{\partial f_i(\alpha_1)}{\partial \alpha} y_i &= b(\alpha_1), \\ \Sigma \frac{\partial f_i(\alpha_2)}{\partial \alpha} y_i &= b(\alpha_2), \end{aligned} \quad (2.15)$$

где $b(\alpha) = \Sigma \frac{\partial f_i(\alpha)}{\partial \alpha} f_i(\alpha)$. Допустим, как и ранее, $f_i(\alpha) > 0$. Будем считать $y_i > 0$. Поэтому система (2.15) не имеет решения для любых $y_i > 0$ тогда и только тогда, когда выполнено условие непринципиальности (2.4). Домножим теперь первое уравнение (2.15) скалярно на ν_1 , а второе на $\nu_2 \in R^m$. Тогда

$$\begin{aligned} \Sigma \left(\frac{\partial f_i(\alpha_1)}{\partial \alpha}, \nu_1 \right) y_i &= (b(\alpha_1), \nu_1), \\ \Sigma \left(\frac{\partial f_i(\alpha_2)}{\partial \alpha}, \nu_2 \right) y_i &= (b(\alpha_2), \nu_2). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Поэтому с учетом сделанного выше замечания можно утверждать, что $Q(\alpha)$ одностационарна на Λ при любых положительных наблюдениях, если

$$\forall \alpha_1 \neq \alpha_2 \in \Lambda \quad \exists \nu_1, \nu_2 \in R^m: b(\alpha_1, \alpha_2; \nu_1, \nu_2) \notin K(\alpha_1, \alpha_2; \nu_1, \nu_2), \quad (2.17)$$

где $b(\alpha_1, \alpha_2; \nu_1, \nu_2) = ((b(\alpha_1), \nu_1), (b(\alpha_2), \nu_2)) \in R^2$, $K(\alpha_1, \alpha_2; \nu_1, \nu_2)$ – конус в R^2 , натянутый на векторы

$$\left(\left(\frac{\partial f_1(\alpha_1)}{\partial \alpha}, \nu_1 \right) \right), \dots, \left(\left(\frac{\partial f_n(\alpha_1)}{\partial \alpha}, \nu_1 \right) \right) \in R^2.$$

Таким образом, задача непринципиальности в R^{2m} сведена к задаче о непринципиальности (2.17) в R^2 .

МИНИМИЗАЦИЯ СУММЫ КВАДРАТОВ, ОСНОВАННАЯ НА МЕТОДЕ НЬЮТОНА–ГАУССА

Методы минимизации суммы квадратов отклонений – наиболее изученный и продвинутый круг проблем, связанных с оцениванием параметров в нелинейных регрессиях [6, 15, 37, 41, 67]. Разумеется, для решения этой задачи можно применять общие методы минимизации: градиентные, сопряженных градиентов, ньютоновские, квазиньютоновские и т.п. [11, 24, 34, 36, 41]. Однако для суммы квадратов существует более экономный и эффективный метод. Таким классическим методом является метод Ньютона–Гаусса (§ 1), его модификации рассматриваются в § 2. Учет специфики конкретной модели регрессии позволяет, однако, строить еще более экономные, специальные методы. Эти методы рассматриваются в следующей главе.

§ 1. Метод Ньютона–Гаусса

Выпишем еще раз гауссиан суммы квадратов в матричной форме

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} = F^T(\alpha) F(\alpha) - \Sigma(y_i - f_i(\alpha)) \frac{\partial^2 f_i(\alpha)}{\partial \alpha^2}, \quad (1.1)$$

где $F_{ij}(\alpha) = \partial f_i / \partial \alpha_j$, $F(\alpha) = \|\partial f_i / \partial \alpha_j\|$ – матрица $n \times m$. Метод Ньютона приводит к итерациям вида

$$a_{k+1} = a_k - \left(\frac{\partial^2 Q(a_k)}{\partial \alpha^2} \right)^{-1} \left(\frac{\partial Q(a_k)}{\partial \alpha} \right), \quad k = 0, 1, \dots \quad (1.2)$$

Допустим, что: а) начальное приближение a_0 выбрано достаточно хорошо, т.е. $Q(a_0)$ достаточно мало, что ведет к малости отклонений $y_i - f_i(a_0)$; б) $\partial^2 f_i / \partial \alpha^2$ не очень велики (регрессия ”не очень нелинейна”). Тогда второй суммой в (1.1) можно пренебречь и считать

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \approx 2F^T(\alpha)F(\alpha).$$

Учитывая, что

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha} = -2F^T(\alpha)(y - f(\alpha)),$$

итерации (1.2) переписываются как

$$a_{k+1} = a_k + (F_k^T F_k)^{-1} F_k^T (y - f_k), \quad k = 0, 1, \dots, \quad (1.3)$$

где $F_k = \partial f(a_k) / \partial \alpha$ – матрица $n \times m$, $f_k = f(a_k) \in R^n$. В формуле (1.3) неявно предполагается, что

$$\text{rank } F(\alpha) = m, \quad \alpha \in R^m. \quad (1.4)$$

Это предположение будет на протяжении этого параграфа принято.

Итерации (1.3), собственно, и являются основой метода Ньютона–Гаусса. К этой же формуле можно прийти с других позиций. Линеаризуем регрессию в окрестности $\alpha = a_k$, тогда

$$f(\alpha) \approx f(a_k) + F_k(\alpha - a_k).$$

Найдем a_{k+1} из условия

$$\|y - F(a_k)(\alpha - a_k) - f(a_k)\|^2 \Rightarrow \min_{\alpha},$$

откуда приходим к той же формуле (1.3).

К сожалению, итерации (1.3) не всегда сходятся (особенно если матрицы $\partial^2 f / \partial \alpha^2$ сильно отличаются от нулевой, а $|y_i - f_i(\alpha)| \gg 0$). Это приводит к необходимости введения изменяющейся длины шага, т.е. к итерациям вида

$$a_{k+1} = a_k + \lambda_k (F_k^T F_k)^{-1} F_k^T (y - f_k), \quad (1.5)$$

или

$$a_{k+1} = a_k + \lambda_k p_k, \quad k = 0, 1, \dots,$$

где

$$p_k = (F_k^T F_k)^{-1} F_k^T (y - f_k)$$

– направление минимизации (оно такое же, как в методе Ньютона–Гаусса), $\lambda_k > 0$ определяет длину шага минимизации. Длину шага можно выбирать разными способами. Наиболее простой и надежный – *метод редукции* (о других методах выбора шага см., например, в [36]). Он заключается в следующем: выберем две константы (параметры метода редукции) $0 < \tau < 1$ и $0 < \kappa < 1$. Далее:

- 1) полагаем $\lambda = 1$;
- 2) проверяем неравенство

$$Q(a_k + \lambda p_k) - Q(a_k) < -\tau \lambda (q_k, p_k), \quad (1.6)$$

где $q_k = -\partial Q(a_k) / \partial \alpha$ – антиградиент ($q_k \neq 0$);

3) если неравенство (1.6) для этого значения λ выполнено, то полагаем $\lambda_k = \lambda$ и $a_{k+1} = a_k + \lambda_k p_k$. В противном случае уменьшаем длину шага в κ раз, т.е. полагаем $\lambda' = \kappa \lambda$ и возвращаемся к 2), т.е. проверяем (1.6) для $\lambda = \lambda'$. Подобные итерации производим до тех пор, пока неравенство (1.6) не будет выполнено.

Покажем, что для любого $0 < \tau < 1$ при условии, что $q_k \neq 0$, существует такое $\bar{\lambda}$, что для всех $0 < \lambda < \bar{\lambda}$ неравенство (1.6) имеет место. Для этого,

во-первых, покажем, что метод (1.5) является *квазиградиентным*, т.е. что $(p_k, q_k) > 0$. Действительно, $q_k = 2 F_k(y - f_k)$, поэтому

$$(p_k, q_k) = 2(y - f_k)^T F_k (F_k^T F_k)^{-1} F_k^T (y - f_k) > 0, \quad (1.7)$$

поскольку из условия (1.4) следует, что матрица $(F_k^T F_k)^{-1}$, $k = 0, 1, \dots$, положительно определена. Разлагая далее $Q(\alpha)$ в окрестности точки $\alpha = a_k$ в ряд Тейлора по лучу $a_k + \lambda p_k$ до линейных членов, получим

$$Q(a_k + \lambda p_k) - Q(a_k) = -\lambda(p_k, q_k) + o(\lambda) < -\tau\lambda(p_k, q_k),$$

$$0 < \lambda < \bar{\lambda}, \quad 0 < \tau < 1,$$

что и приводит нас к (1.6).

Из (1.6) следует, в частности, что

$$\begin{aligned} Q(a_{k+1}) &< Q(a_k), \\ q_k &\neq 0. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Такие процессы минимизации будем называть *строго релаксационными*.

В теории оптимизации доказывается, что квазиградиентные процессы сходятся. Более точно соответствующее утверждение выглядит следующим образом.

Теорема 1.1. Пусть $F(x)$ — непрерывно дифференцируемая, ограниченная снизу функция на R^m , а итеративный процесс минимизации имеет вид: $x_{k+1} = x_k + \lambda_k p_k$, где $p_k \in R^m$ — направление минимизации, $\lambda_k > 0$ определяет длину шага и выбирается из условия

$$F(x_{k+1}) - F(x_k) < -\lambda_k \tau (p_k, q_k), \quad 0 < \tau < 1,$$

причем

$$\begin{aligned} \cos(p_k, \hat{q}_k) &\geq \delta > 0, \\ q_k &= -\partial F(x_k)/\partial x \neq 0. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Тогда, если начальное приближение x_0 выбрано так, что $F(x_0) < \bar{F}_E$, \bar{F}_E — нижняя грань функции на бесконечности (см. § 1, гл. 1), то а) $\|x_{k+1} - x_k\| \rightarrow 0$, б) $\|q_k\| \rightarrow 0$, $k \rightarrow \infty$, в) если x_* — предельная точка $\{x_k\}$, то $\partial F(x_*)/\partial x = 0$, $F(x_*) = \text{const}$.

Доказательство этого факта стандартно (см., например, [39], [15]).

Заметим лишь следующее. Условие $F(x_0) < \bar{F}_E$ влечет компактность множества уровня $S_0 = \{x \in R^m: F(x) \leq F(x_0)\}$, поэтому существует хотя бы одна предельная точка $x_* \in S_0$ последовательности $\{x_k\}$.

Для того чтобы воспользоваться теоремой 1.1 для доказательства сходимости метода Ньютона—Гаусса при минимизации суммы квадратов, необходимо доказать, что для него имеет место условие (1.9), более жесткое, чем (1.7). В рамках принятого предположения (1.4) это доказатель-

ство тривиально:

$$\begin{aligned} \cos(p_k, \hat{q}_k) &= \frac{q_k^T (F_k^T F_k)^{-1} q_k}{\|q_k\| (q_k^T (F_k^T F_k)^{-2} q_k)^{1/2}} \geq \\ &\geq \frac{\lambda_{\min}(F_k^T F_k)^{-1}}{(\lambda_{\max}(F_k^T F_k)^{-2})^{1/2}} = \frac{\lambda_{\min}(F^T F_k)}{\lambda_{\max}(F_k^T F_k)} \geq \frac{M_1}{M_2} > 0, \end{aligned}$$

где

$$M_1 = \inf_{\alpha \in S_0} \lambda_{\min}(F^T(\alpha)F(\alpha)) > 0,$$

$$M_2 = \sup_{\alpha \in S_0} \lambda_{\max}(F^T(\alpha)F(\alpha)) < \infty,$$

$$S_0 = \{\alpha \in R^m: Q(\alpha) \leq Q(\alpha_0)\}.$$

Теоремы "о сходимости" методов минимизации наподобие теоремы 1.1 в общем случае (например, без наложения ограничения типа выпуклости функции) несут на себе печать неудовлетворенности. В действительности сходимость итераций не доказывается, доказывается лишь, что предельные точки последовательности, вырабатываемой рассматриваемым методом минимизации, являются стационарными. Ниже будет показано, что, за исключением патологических случаев, сходимость (в обычном смысле слова) все же имеет место¹⁾.

Лемма 1.1. Пусть дана последовательность $x_1, x_2, \dots \in R^m$, причем $\|x_{n+1} - x_n\| \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Известно, что эта последовательность имеет непустое конечное множество предельных точек. Тогда последовательность $\{x_n\}$ сходится (т.е. число предельных точек этой последовательности равно 1).

Доказательство. Допустим противное, т.е. что $\{x_n\}$ имеет более одной предельной точки; обозначим их через $z_1, \dots, z_k, k \geq 2$. Разобьем все члены последовательности $\{x_n\}$ на k непересекающихся бесконечных классов $\{x_{r_j(n)}\}, 1 \leq j \leq k, n = 1, 2, \dots$, где $r_j(n)$ для каждого j есть возрастающая функция по n , причем $\bigcup_{j=1}^k \bigcup_{n=1}^{\infty} \{r_j(n)\}$ – множество всех натуральных чисел и

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_{r_j(n)} = z_j, \quad j = 1, \dots, k. \quad (1.10)$$

Это можно сделать следующим образом. Представим R^m в виде объединения k непересекающихся множеств, для каждого из которых z_k – внутрен-

¹⁾ См. также Михалевич В.С., Гупал А.М., Норкин В.И. Методы невыпуклой оптимизации. – М.: Наука, 1987.

няя точка этого множества. Члены последовательности, принадлежащие каждому такому множеству, и образуют свой класс. Докажем тогда, что существует такое $\delta > 0$, что для любого достаточно большого N найдется такое $n \geq N$, что $\|x_{n+1} - x_n\| \geq \delta$. Положим

$$\delta = \frac{1}{3} \min_{j \neq l} \|z_j - z_l\|. \quad (1.11)$$

Тогда из условия сходимости (1.10) начиная с N для всех $n \geq N$

$$\|x_{r_j(n)} - z_j\| < \delta, \quad j = 1, \dots, k.$$

Рассмотрим последовательность из первого класса $\{x_{r_1(n)}\}$. Поскольку $r_1(n) \rightarrow \infty$, то найдется такое n , что $l = r_1(n) > N$, причем x_{l+1} не принадлежит первому классу, а принадлежит, например, второму. Но тогда $\|x_{l+1} - x_l\| \geq \delta$, так как в противном случае

$$\|z_1 - z_2\| \leq \|z_1 - x_l\| + \|x_{l+1} - x_l\| + \|z_2 - x_{l+1}\| < 3\delta,$$

что противоречит (1.11). Лемма доказана.

Как следствие получаем, что, если условие теоремы 1.1 выполнено, причем число стационарных точек $Q(\alpha)$ на любом ограниченном множестве конечно, то последовательность a_1, a_2, \dots , вырабатываемая процессом (1.5), сходится (ср. с [36, с. 457]).

Можно показать, что множество предельных точек последовательности $x_k \in R^m$, удовлетворяющей условию $\|x_{k+1} - x_k\| \rightarrow 0$, замкнуто и связано [36, с. 459]. Как показано в теореме 1.1, предельные точки a_* процесса минимизации (1.5) удовлетворяют соотношению $Q(a_*) = \text{const}$. Поэтому в условиях непрерывной дифференцируемости функций регрессии можно утверждать, что последовательность a_k сходится, если не существует такой непрерывно дифференцируемой кривой $\varphi: R^1 \rightarrow R^m$, что $\partial Q / \partial \varphi = 0$, $Q(\varphi(\lambda)) = \text{const}$, $-\infty < \lambda < \infty$. Последнее геометрически означает, что по некоторой кривой поверхность регрессии удалена от y на одинаковое расстояние.

Наличие неограниченного числа стационарных точек минимизируемой функции на ограниченном множестве в R^m — случай, на практике патологический (как следует из гл. 2, можно считать, что вероятность этого события равна нулю).

В практических задачах в условиях сильной овражности минимизируемой функции для выполнимости неравенства (1.6) или (1.8) значение λ требуется дробить большое число раз. Значение функции при этом уменьшается незначительно, вместе с тем требуя большого количества вычислений. В таких задачах почти весь объем вычислений падает на расчет подходящей длины шага. Существуют, однако, задачи, где длину шага можно предсказать. Соответствующие методы имеют другую, неградиентную идеологию, подробнее они излагаются в § 1 следующей главы. Часто они приводят к итерациям со свойством (1.8). Приводят ли эти методы к сходимости в смысле сходимости теоремы 1.1? Ответом (положитель-

ным) на этот вопрос служит следующая теорема. Изложение ведем для общего случая безусловной минимизации непрерывно дифференцируемой функции $F(x)$, $x \in R^m$.

Итерационный процесс минимизации функции F задается отображением $d: R^m \rightarrow R^m$. Имея некоторое приближение $x \in R^m$, новое приближение строится по правилу $x' = x + d(x)$. В большинстве случаев вектор поправки d в свою очередь можно представить в виде $d(x) = A(x)q(x)$, где $A(x)$ — положительно определенная симметрическая матрица $m \times m$, элементы которой непрерывны на R^m ; $q(x)$ — антиградиент F , т.е. $q(x) = -\partial F/\partial x$. В дискретной форме процесс минимизации тогда выглядит как

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + A(x_k)q(x_k), \\ k &= 0, 1, \dots \end{aligned} \tag{1.12}$$

Теорема 1.2. Пусть для итерационного процесса $x' = x + A(x)q(x)$ выполнены вышеприведенные условия, причем для любого $x \in R^m$ имеет место монотонность

$$\begin{aligned} F(x + A(x)q(x)) &< F(x), \\ q(x) &\neq 0, \end{aligned}$$

причем начальное приближение $x_0 \in R^m$ таково, что множество $S_0 = \{x \in R^m: F(x) \leq F(x_0)\}$ ограничено. Тогда для процесса (1.12) имеют место следующие утверждения: а) $\|q(x_k)\| \rightarrow 0$, $k \rightarrow \infty$; б) во всех предельных точках x_* последовательности $\{x_k\}$ имеем $q(x_*) = 0$, $F(x_*) = \text{const}$; в) $\|x_{k+1} - x_k\| \rightarrow 0$, $k \rightarrow \infty$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. В силу непрерывности функции $\nu^T A(x)\nu$, $\nu \in R^m$, можно утверждать, что для некоторых $0 < M_1 \leq M_2$

$$M_1 \|\nu\|^2 \leq \nu^T A(x)\nu \leq M_2 \|\nu\|^2,$$

$$x \in S_0.$$

Аналогично

$$M_1^2 \|\nu\|^2 \leq \nu^T A^2(x)\nu \leq M_2^2 \|\nu\|^2,$$

$$x \in S_0.$$

Пусть теперь $\delta > 0$ любое. Рассмотрим множество

$$E_\delta = \{x \in R^m: \|q(x)\| \geq \delta\}.$$

Оно замкнуто в силу предположенной непрерывности антиградиента $q(x)$.

Множество S_0 компактно в силу его ограниченности и непрерывности минимизируемой функции $F(x)$. Значит, пересечение множеств $E_\delta \cap S_0$ также будет компактным.

Рассмотрим на этом множестве функцию

$$T(x) = F(x + A(x)q(x)) - F(x).$$

По условию $T(x) < 0$ на $x \in E_\delta \cap S_0$. В силу непрерывности $A(x)$, $q(x)$ и $F(x)$ функция $T(x)$ также будет непрерывна, поэтому на $E_\delta \cap S_0$ она достигает своей верхней грани:

$$\tau = \sup T(x), \quad x \in E_\delta \cap S_0.$$

Поскольку $T(x) < 0$, то $\tau < 0$, т.е.

$$\begin{aligned} F(x + A(x)q(x)) &\leq F(x) + \tau, \\ x \in S_0, \quad \|q(x)\| &\geq \delta. \end{aligned} \tag{1.13}$$

Докажем сначала утверждение а). Допустим противное, а именно, существует такое $\delta > 0$ и такая подпоследовательность $n(k)$, $k = 1, 2, \dots$, что $\|q(x_{n(k)})\| \geq \delta$, $x_{n(k)} \rightarrow x^*$. Тогда

$$F(x_{n(k)}) + \tau \geq F(x_{n(k)+1}) \geq F(x_{n(k+1)}),$$

поскольку

$$F(x_{k+1}) \leq F(x_k)$$

для любого $k = 1, 2, \dots$.

Перейдем в предыдущем неравенстве к пределу при $k \rightarrow \infty$. Поскольку

$$F(x_{n(k+1)}) \leq \tau k + F(x_{n(1)}),$$

получаем, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F(x_{n(k+1)}) = F(x^*) = -\infty,$$

– противоречие с ограниченностью $F(x)$ на компакте S_0 , утверждение а) доказано. Поэтому, если $x_{n(k)} \rightarrow x_*$, $k \rightarrow \infty$, то в силу непрерывности $q(x)$ получаем $q(x_*) = 0$. Утверждение $F(x_*) = \text{const}$ для всех предельных точек последовательности $\{x_k\}$ есть следствие того, что пределы любой подпоследовательности монотонной последовательности совпадают; утверждение б) доказано. Утверждение в) следует из а) и из неравенства

$$\|x_{k+1} - x_k\| = [q^T(x_k)A^2(x_k)q(x_k)]^{1/2} \leq M_2 \|q(x_k)\|.$$

Теорема полностью доказана.

Доказанная теорема будет неоднократно использоваться в следующей главе и послужит основой построения некоторых специальных методов минимизации.

§ 2. Метод Левенберга – Марквардта

Напомним, что необходимым условием применимости метода Ньютона – Гаусса является условие полного ранга матрицы производных $F(a_k)$, $k = 0, 1, \dots$. Для некоторых нелинейных регрессий это условие не выполняется. Например, нелинейная регрессия

$$y_i = \alpha_1 e^{\alpha_2 x_i} + \alpha_3 e^{\alpha_4 x_i} + \epsilon_i, \quad x_i \neq \text{const},$$

являющаяся в некоторых случаях тестом для проверки программ по нелинейным регрессиям (см., например, [55]), не удовлетворяет условию

$$|F^T(\alpha)F(\alpha)| > 0, \quad \alpha \in R^m, \quad (2.1)$$

на линейном подпространстве $\alpha_2 = \alpha_4$.

Даже если для некоторой нелинейной регрессии неравенство (2.1) выполнено, определитель соответствующей матрицы может быть настолько мал, что фактически (учитывая конечность разрядной сетки ЭВМ) можно считать, что вместо строгого неравенства в (2.1) имеет место равенство для некоторых $\alpha \in R^m$. В этом случае программа обращения матрицы $F^T F$ может и сработать, однако теперь уже, и это самое опасное, нельзя утверждать, что обратная матрица $(F^T F)^{-1}$ будет положительно определена, в частности, что $(p_k, q_k) > 0$. Если же последнее неравенство не будет иметь места, весьма возможно, что значение λ , приводящее к минимальному значению функции вдоль выбранного направления, будет $\lambda_{\text{опт}} = 0$, и процесс минимизации заикнется.

Насколько вероятно на практике выполнение неравенства

$$\text{rang } F(\alpha) < m. \quad (2.2)$$

Случай, когда (2.2) имеет место для некоторой области R^m , следует, видимо, признать патологическим. Так, при $m = 1$ неравенство (2.2) на некотором интервале ведет к тому, что все функции регрессии на этом интервале будут постоянными и не будут зависеть от параметра. На практике (2.2) можно ожидать лишь на некоторых подмножествах нулевой лебеговой меры, как это имеет место в приведенном выше примере. Положение может оказаться действительно серьезным, если минимум $Q(\alpha)$ достигается как раз на множестве (2.2). Однако интуитивно понятно, что вероятность этого события (если наблюдения y_i считать случайными) будет равна нулю.

Более распространенной ситуацией является случай плохой определенности матрицы $F^T(\alpha)F(\alpha)$. Именно для подобных регрессий эффективны методы, излагаемые в этом параграфе. Еще в 1944 г. Левенбергом [64] была предложена процедура, которая, модифицируя метод Ньютона – Гаусса, позволяет применять его и для регрессий, для которых неравенство (2.1) выполнимо не для всех $\alpha \in R^m$. Суть предложенного им метода

проста. Подправим "слегка" матрицу $F^T(a_k)F(a_k)$ в методе (1.3), сделав ее положительно определенной. Этого можно добиться весьма простым способом, добавляя к ней матрицу, пропорциональную единичной¹⁾. Таким образом, в методе Левенберга итерации ведутся по формуле

$$a_{k+1} = a_k + (F_k^T F_k + \mu_k I)^{-1} F_k^T (y - f_k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (2.3)$$

Матрица $F_k^T F_k$ неотрицательно определена, поэтому матрица $F_k^T F_k + \mu_k I$ ($\mu_k > 0$) положительно определена (в том числе невырождена), а значит, направление минимизации в методе Левенберга составляет острый угол с антиградиентом.

В 1963 г. Марквардт [66] несколько модифицировал этот метод. Он предложил вместо единичной матрицы в качестве "довеска" брать диагональную матрицу с элементами, совпадающими с диагональными элементами матрицы $F_k^T F_k$. Таким образом, в методе Марквардта

$$a_{k+1} = a_k + (F_k^T F_k + \mu_k D_k)^{-1} F_k^T (y - f_k), \quad k = 0, 1, \dots,$$

где $(D_k)_{ii} = (F_k^T F_k)_{ii}$, $i = 1, \dots, m$, $(D_k)_{jl} = 0$ ($l \neq j$). Метод Марквардта принимает вид метода Левенберга, если перейти к масштабированию направления минимизации.

Какой смысл имеют коэффициенты μ_k в рассматриваемых методах? Для простоты речь будем вести о методе (2.3). Марквардтом было показано, что длина вектора поправки в методе (2.3) является убывающей функцией μ_k ; при изменении μ_k от 0 до $+\infty$ направление вектора поправки изменяется от направления вектора поправки в методе Ньютона – Гаусса до антиградиента (доказательство приведено также в [15]). Таким образом, при большом μ_k алгоритм (2.3) близок к градиентному, при $\mu_k \approx 0$ – к методу Ньютона – Гаусса. На основе этого Марквардтом была предложена следующая эвристическая процедура. Она в свою очередь опирается на довольно часто наблюдающуюся на практике ситуацию: в начале итерационного процесса вполне удовлетворительным оказывается простой градиентный метод; в конце, т.е. в непосредственной близости минимума, более быстрым является метод Ньютона – Гаусса. Отсюда следует, что эффективным был бы выбор падающих значений $\mu_k \downarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$ (этого можно добиться, например, уменьшением μ_k на каждой итерации в некоторое число раз).

Практика, однако, показала, что методы Левенберга – Марквардта довольно часто не сходятся. Основным недостатком этих методов является постоянство длины шага. Более аргументированным является модифицированный метод Левенберга – Марквардта с переменной длиной шага, а именно

$$a_{k+1} = a_k + \lambda_k (F_k^T F_k + \mu_k D_k)^{-1} F_k^T (y - f_k), \quad (2.4)$$

¹⁾ Идея подобной поправки имеет глубокие корни. В вычислительной математике она составляет суть решения некорректных задач [46]. В статистике такая поправка приводит к так называемым гребневым оценкам (см., например, [15]), которые имеют лучшие в некотором смысле статистические свойства оценок.

где в варианте Левенберга $D_k = I$, в варианте Марквардта $D_k = \text{diag}(F_k^T F_k)$; $\lambda_k > 0$ определяет длину шага и выбирается, например, из условия (1.6), что влечет монотонность (1.8).

Вопрос о выборе параметра μ_k все же остается открытым. Ниже будет предложен один из способов решения этой задачи. Еще раз зададимся вопросом, зачем, собственно, необходима добавка $\mu_k I$ или $\mu_k D_k$? Она нужна для того, чтобы направление минимизации не оказалось ортогональным к антиградиенту, так как в противном случае может оказаться, что значения $\lambda_k > 0$, удовлетворяющего неравенству (1.6) или даже (1.8), не существует.

Зададимся некоторым предельным углом $0^\circ < \gamma < 90^\circ$ и выберем $\mu_k > 0$ так, чтобы на каждой итерации

$$\cos(q_k, p_k(\mu_k)) = \cos \gamma, \quad (2.5)$$

где $p_k(\mu_k)$ — вектор поправки в методе (2.3), q_k — антиградиент. Исследуем левую часть (2.5) как функцию μ . Очевидно (индекс k для простоты опускаем; $R = F^T F$)

$$c(\mu) = \cos(q, p(\mu)) = \frac{q^T(R + \mu I)^{-1} q}{\|q\| [q^T(R + \mu I)^{-2} q]^{1/2}}. \quad (2.6)$$

Обозначим

$$s_r = q^T(R + \mu I)^{-r} q, \quad r \geq 1. \quad (2.7)$$

Легко проверить, что

$$\frac{ds_r}{d\mu} = -rs_{r+1}. \quad (2.8)$$

Пользуясь формулой (2.7), функцию (2.6) можно переписать в виде

$$c(\mu) = \frac{1}{\|q\|} \frac{s_1}{\sqrt{s_2}}.$$

С помощью (2.8) легко найти первые и вторые производные функции (2.6):

$$c'_\mu = s_2^{-3/2} (s_1 s_3 - s_2^2) / \|q\|,$$

$$c''_\mu = 3 s_1 s_2^{-5/2} (s_3^2 - s_2 s_4) / \|q\|.$$

Докажем неравенство

$$s_{(r_1 + r_2)/2}^2 \leq s_{r_1} s_{r_2} \quad (2.9)$$

для любых $r_1, r_2 \geq 1$. Оно является следствием неравенства Коши — Буяковского

$$\begin{aligned} s_{(r_1 + r_2)/2}^2 &= [q^T(R + \mu I)^{-(r_1 + r_2)/2} q]^2 = \\ &= \{ [(R + \mu I)^{-r_1/2} q]^T [(R + \mu I)^{-r_2/2} q] \}^2 \leq s_{r_1} s_{r_2}. \end{aligned}$$

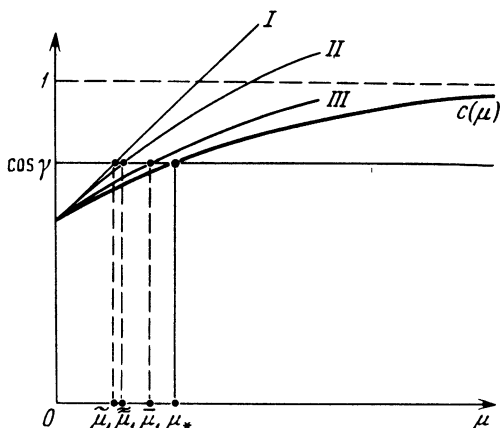


Рис. 20. Разные аппроксимации функции $c(\mu)$: I – линейная, II – квадратичная, III – гиперболическая

Как следует из неравенства (2.9), $c'_\mu \geq 0$, $c''_\mu \leq 0$. Таким образом, функция $c(\mu)$ является неубывающей и вогнутой (рис. 20).

Как найти значение μ , удовлетворяющее уравнению (2.5)? Пусть $\tilde{\mu}$ – некоторое приближение к точному решению μ_* . Аппроксимируем $c(\mu)$ в окрестности $\tilde{\mu}$ прямой

$$c(\mu) \approx c(\tilde{\mu}) + (\mu - \tilde{\mu})c'(\tilde{\mu}).$$

Решая линейное уравнение относительно μ , найдем

$$\mu = \tilde{\mu} + \frac{\cos \gamma - c(\tilde{\mu})}{c'(\tilde{\mu})}.$$

Таким образом, итеративный процесс решения (2.5) имеет вид

$$\tilde{\mu}_{l+1} = \tilde{\mu}_l + \frac{\cos \gamma - c(\tilde{\mu}_l)}{c'(\mu_l)}, \quad l = 0, 1, \dots \quad (2.10)$$

При этом $\tilde{\mu}_{l+1} \rightarrow \mu_*$, для которого $c(\mu_*) = \cos \gamma$. Заметим, что все $\tilde{\mu}_l$ оценивают μ_* с недостатком, т.е. $\tilde{\mu}_l \leq \mu_*$.

Взамен точного корня (2.5) можно ограничиться приближенным решением, например, $\tilde{\mu}_1$. Очевидно

$$\tilde{\mu}_1 = \frac{\cos \gamma - c(0)}{c'(0)}. \quad (2.11)$$

В этом случае $c(0)$ равно косинусу угла между антиградиентом и вектором поправки в методе Ньютона–Гаусса,

$$c'(0) = \frac{(p, q)p^T R^{-1}p - \|p\|^4}{\|q\| \|p\|^3},$$

где $p = R^{-1}q$ – вектор поправки в методе Ньютона – Гаусса. Очевидно, последняя формула имеет место в случае $|R| \neq 0$, т.е. при условии (2.1).

Функцию $c(\mu)$ можно аппроксимировать не прямой, а параболой; тогда

$$c(\mu) \approx c(\tilde{\mu}) + (\mu - \tilde{\mu})c'(\tilde{\mu}) + \frac{1}{2}(\mu - \tilde{\mu})^2 c''(\tilde{\mu}),$$

и приближенное значение $\tilde{\mu}$, удовлетворяющее уравнению (2.5), находится решением квадратного уравнения

$$c(\tilde{\mu}) + (\mu - \tilde{\mu})c'(\tilde{\mu}) + \frac{1}{2}(\mu - \tilde{\mu})^2 c''(\tilde{\mu}) = \cos \gamma.$$

Наконец, существует еще один способ приближенного решения уравнения (2.5). Аппроксимируем $c(\mu)$ гиперболической функцией

$$\bar{c}(\mu) = 1 - \frac{a}{\mu + b}, \quad (2.12)$$

где $a, b > 0$ – параметры. Подберем их так, чтобы

$$\bar{c}(0) = c(0), \quad \bar{c}'(0) = c'(0).$$

Имеем

$$\bar{c}(0) = 1 - \frac{a}{b} = c(0), \quad \bar{c}'(0) = \frac{a}{b^2} = c'(0),$$

откуда

$$a = \frac{(1 - c(0))^2}{c'(0)}, \quad b = \frac{1 - c(0)}{c'(0)}. \quad (2.13)$$

Гипербола (2.12) уместна здесь по той причине, что она, как и функция $c(\mu)$, является возрастающей и вогнутой с асимптотой, равной 1. После того как параметры a, b найдены по формулам (2.13), решить уравнение $\bar{c}(\mu) = \cos \gamma$ не составляет труда. Решением будет

$$\bar{\mu}_1 = \frac{a}{1 - \cos \gamma} - b. \quad (2.14)$$

Можно показать, что $\bar{\mu}_1 > \tilde{\mu}_1$. Итак, на k -й итерации значение μ_k находим следующим образом. Если $\cos(p_k, q_k) \geq \cos \gamma$, то $\mu_k = 0$. Если $\cos(p_k, q_k) < \cos \gamma$, причем $|F_k^T F_k| \neq 0$, решаем уравнение (2.5). По желанию можно ограничиться первым приближением (2.14). Если $|F_k^T F_k| = 0$, то полагаем $\mu_0 = \mu_0^* > 0$, где μ_0^* – заранее выбранное, достаточно малое число. Практика показывает, что гиперболическая аппроксимация оказывается наиболее удовлетворительной, поэтому можно ограничиться первой итерацией. Программа на языке ФОРТРАН описанного алгоритма приведена в [16].

Перейдем теперь к обобщению метода Ньютона – Гаусса и его модификаций на случай декомпозиционных функций (или, короче, D -функций).

Напомним (см. § 3, гл. 4), что D -функцией называем функцию вида

$$F(x) = V(f(x)), \quad x \in R^m,$$

где $f: R^m \rightarrow R^n$ – инъективное отображение $n \geq m$, V – выпуклая функция на R^n , $\partial^2 V / \partial f^2 > 0$. Нетрудно видеть, что для такой функции

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = G^T(x) W(f) G(x) + \sum_1^n \frac{\partial V}{\partial f_i} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2},$$

где

$$G(x) = \frac{\partial f}{\partial x}, \quad W(f) = \frac{\partial^2 V}{\partial f^2}$$

– матрицы $n \times m$ и $n \times n$ соответственно. Естественным обобщением метода Ньютона – Гаусса на случай минимизации D -функции является метод

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k (G_k^T W_k G_k)^{-1} G_k^T q_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (2.15)$$

где $\lambda_k > 0$ выбирается, например, по правилу, аналогичному (1.6), и

$$G_k = G(x_k), \quad W_k = W(f(x_k)), \quad q_k = \frac{\partial V}{\partial f}(f(x_k)).$$

Пользуясь непрерывностью производных с учетом предположения, аналогичного (1.4), а именно

$$\text{rang } G(x) = m, \quad x \in R^m,$$

можно установить квазиградиентность процесса минимизации (2.15), т.е. направление минимизации составляет с антиградиентом острый угол. Таким образом, на основе теоремы 1.1 из гл. 6 можно показать, что процесс (2.15) сходится (в смысле теоремы 1.1).

Совершенно аналогично можно модернизировать алгоритм (2.15) по примеру методов Левенберга – Марквардта, а именно

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k (G_k^T W_k G_k + \mu_k D_k)^{-1} G_k^T q_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

Выбор μ_k можно осуществлять, как и прежде, задаваясь некоторым пороговым углом γ .

§ 3. Метод минимизации суммы квадратов без вычисления производных

Простейший способ обойтись без вычисления производных – заменить их разностями. Проблема тогда будет заключаться в выборе оптимального вида разностей. Например, можно использовать право-, левосторонние или центральные разности; существуют и более сложные методы приближенно-

го дифференцирования (см., например, [17]). Мы ограничимся рассмотрением правосторонних разностей. В этом случае производную функции регрессии заменяем на

$$\frac{\partial f_i(\alpha_0)}{\partial \alpha_j} \approx \frac{1}{h_j} (f_i(\alpha_0 + h_j e_j) - f_i(\alpha_0)), \quad (3.1)$$

$$i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, m,$$

где $e_j \in R^m$ — “единичный” вектор, т.е. вектор, на j -м месте которого стоит 1, а остальные координаты равны 0, $h_j > 0$. Центральным вопросом применения приближенной формулы (3.1) является выбор поправок h_j . При очень малых h_j в силу ошибок вычислений правая часть (3.1) может резко расходиться с левой. При больших h_j правая часть (3.1) не будет соответствовать левой по определению. Удовлетворительным в некоторых случаях оказывается выбор $h_j = (1 + |\alpha_{0j}|)\delta$, где $\delta > 0$ (например, $\delta = 0,01$). В рамках регрессии существуют и другие способы выбора h_j [16]. Была доказана локальная сходимость методов типа Ньютона — Гаусса с выбором приближения для производных в виде (3.1) [36].

Остановимся теперь на идее более интересном подходе минимизации суммы квадратов. Отличительной чертой рассматриваемого ниже метода является его экономичность: в нем оценивается сразу вся матрица производных $F = \partial f / \partial \alpha$ на основе вычислений функции регрессии не менее чем на m предыдущих итерациях. Итак, пусть в $p + 1$ точке a_0, a_1, \dots, a_p вычислены векторы функций регрессии $f(a_0), f(a_1), \dots, f(a_p)$; обозначим искомую матрицу производных P_0 . Тогда по определению производных в окрестности a_0

$$f(\alpha) - f(a_0) \approx P_0(\alpha - a_0),$$

в частности,

$$f(a_i) - f(a_0) \approx P_0(a_i - a_0), \quad i = 1, \dots, p. \quad (3.2)$$

Обозначим через A — матрицу $m \times p$, i -м вектор-столбцом которой будет вектор $a_i - a_0$; через Φ — матрицу $n \times p$, i -м вектор-столбцом которой будет $f(a_i) - f(a_0)$. Тогда приближенное равенство переписывается как

$$P_0 A \approx \Phi. \quad (3.3)$$

Наложим на систему точек a_0, \dots, a_p следующее ограничение. Говорим, что эта система точек имеет *общее положение*, если p векторов $a_1 - a_0, a_2 - a_0, \dots, a_p - a_0$ линейно независимы в R^m . В этих условиях $\text{rank } A = m$.

Найдем P_0 из (3.3), исходя из условия максимально возможного приближения. Например, в качестве меры близости между левой и правой частью (3.3) можно взять следующий функционал:

$$\text{tr}(PA - \Phi)^T(PA - \Phi) \Rightarrow \min_P. \quad (3.4)$$

Дифференцируя последнее выражение по P , найдем искомое решение

$$P_0 = \Phi A^T (A A^T)^{-1}. \quad (3.5)$$

Вместо (3.4) можно взять след взвешенной матрицы

$$\text{tr}(PA - \Phi)^T(PA - \Phi)\Omega^{-1} \Rightarrow \min_P$$

с решением

$$P_0 = \Phi\Omega^{-1}A^T(A\Omega^{-1}A^T)^{-1}, \quad (3.6)$$

где Ω — $p \times p$ -матрица весов (например, можно считать Ω диагональной, $\Omega_{ii} = Q(a_i) - Q(a_0)$ при условии, что $Q(a_i) > Q(a_0)$, $i = 1, \dots, p$). В частном случае, когда матрица производных P_0 оценивается по m предыдущим итерациям, формула (3.6) упрощается:

$$P_0 = \Phi\Omega^{-1}A^T(A^T)^{-1}\Omega A^{-1} = \Phi A^{-1},$$

т. е.

$$P_0 = \Phi A^{-1}. \quad (3.7)$$

Как видим, результат в случае $p = m$ не зависит от взвешивания.

Имея приближенное выражение матрицы производных, в виде (3.5), (3.6) или (3.7), легко записать формулу итераций по методу Ньютона — Гаусса. Так, в случае $p = m$ эта формула будет иметь весьма простой вид:

$$a_{k+1} = a_k + A_k(\Phi_k^T \Phi_k)^{-1} \Phi_k(y - f_k)$$

или, в условиях изменяющейся длины шага,

$$a_{k+1} = a_k + \lambda_k A_k(\Phi_k^T \Phi_k)^{-1} \Phi_k(y - f_k). \quad (3.8)$$

Описанный выше алгоритм, следуя [36], будем называть *методом секущих*. Это название объясняется тем, что здесь вместо касательной плоскости, требующей вычисления точного значения производных, берется секущее линейное многообразие. Широкое распространение этот метод (DUD -метод) получил после появления работы [69]. Как это ни странно, авторы [69] не делают ссылки на книгу [36], вышедшую на 8 лет раньше, где этот метод был описан.

Корректное применение (3.8) возможно при условии невырожденности матрицы $\Phi_k^T \Phi_k$. В связи с этим дадим следующее определение. Регрессию называем *линейно невырожденной*, если для любых $m + 1$ точек a_0, a_1, \dots, a_m , находящихся в общем положении, матрица Φ , i -й вектор-столбец которой есть $f(a_i) - f(a_0)$, имеет полный ранг (равный m). Для линейной регрессии $f(\alpha) = X\alpha$ линейная невырожденность эквивалентна условию $\text{rank } X = m$. Говорим, что регрессия *локально линейно невырождена*, если она линейно невырождена в некоторой достаточно ма-

лой окрестности любой точки. Для локальной линейной невырожденности регрессии необходимо и достаточно, чтобы $\text{rank } \partial f(a_0)/\partial \alpha = m$. Корректное применение метода секущих возможно только для линейно невырожденных регрессий.

Алгоритм минимизации суммы квадратов по методу секущих при $p = m$ выглядит следующим образом.

0. Выберем вначале $m + 1$ точку в некоторой окрестности a_0 . Найдем среди них точку, имеющую минимальное значение суммы квадратов, и примем ее за базовую (соответствующую a_0 в прежних обозначениях). Построим матрицы A_0, Φ_0 . Естественно, $m + 1$ начальных приближений выбраны так, что $\text{rank } A_0 = m$.

1. Строим новое приближение по формуле (3.8), полагая вначале $\lambda_k = 1$. Если $Q(a_{k+1}) < Q(a_k)$, переходим к следующему шагу. В противном случае дробим λ_k с переменной знака до тех пор, пока $Q(a_{k+1}) < Q(a_k)$. Например, можно полагать $\lambda_k = 1, 1/2, -1/2, 1/4, -1/4$ и т.д.

2. Вектор параметров a_0 помещаем на место, соответствующее максимальному значению суммы квадратов (что означает запись в вектор-строку матрицы A_0 и вектор-столбец матрицы Φ_0). На место a_0 записываем новый вектор, найденный по формуле (3.8). Таким образом находим новые матрицы A_1 и Φ_1 и возвращаемся на шаг 1.

В [36] была доказана локальная сходимость метода (3.8). В [16] приводится описание соответствующих программ на языке ФОРТРАН, см. также [59].

Применение методов минимизации с приближенным вычислением производных сталкивается со следующей немаловажной проблемой. Напомним, использование квазиградиентных методов, т.е. таких, что $(p_k, q_k) > 0, k = 0, 1, \dots$, где

$$a_{k+1} = a_k + \lambda_k p_k, \quad (3.9)$$

q_k — антиградиент минимизируемой функции $Q(\alpha)$ на шаге k , гарантирует нам существование, может быть, достаточно малого, но положительного λ_k такого, что $Q(a_{k+1}) < Q(a_k)$ (при $q_k \neq 0$). В методах приближенного вычисления производных, особенно в тех случаях, когда точки, на основе которых оценивается матрица производных, не лежат в достаточно малой окрестности, условие $(p_k, q_k) > 0$ может быть нарушено. Таким образом, поиск λ_k в (3.8) уже нельзя ограничивать лучом $\lambda_k > 0$, а для выполнения условия убывания минимизируемой функции необходимо рассматривать варианты и отрицательного значения шага. Как было предложено ранее, выбор "знака шага" можно чередовать одновременно с уменьшением длины шага.

Практика счета по методу секущих приводит к еще одной проблеме. В плохо обусловленных, т.е. овражных задачах начальные приближения в результате итераций "выстраиваются в линию", т.е. векторы $a_1 - a_0, a_2 - a_0, \dots, a_m - a_0$ становятся почти линейно зависимыми. В этой ситуации матрица P_0 по формуле (3.7) оценивается с большими погрешностями, в результате чего вектор поправки p_k в (3.9) может стать практически ортогональным к q_k . Очевидно, в подобном случае совокупность точек

a_1, \dots, a_m должна быть обновлена. В некоторых программах осуществляется их выбор случайным образом из некоторой достаточно малой окрестности. Мы предлагаем другую процедуру обновления.

Рассматриваем m векторов $a_m - a_0, a_{m-1} - a_0, \dots, a_1 - a_0$. Пусть $Q(a_m) > Q(a_{m-1}) > \dots > Q(a_0)$. По условию система векторов $\{a_i - a_0\}$ плохо обусловлена. Для повышения обусловленности этой системы опустим из $a_m - a_0$ перпендикуляр на линейное пространство, натянутое на оставшиеся $m - 1$ векторов $a_{m-1} - a_0, \dots, a_1 - a_0$. Этот перпендикуляр обозначим $a'_m - a_0$. По определению

$$a'_m - a_0 \perp a_{m-1} - a_0, \dots, a_1 - a_0,$$

причем $\|a'_m - a_0\| \leq \|a_m - a_0\|$. Последнее условие, в частности, гарантирует нам то, что новая система приближений содержится в окрестности старой. Если опять $(p_k, q_k) \approx 0$, то же самое делаем со следующим вектором $a_{m-1} - a_0$ и т.д. до полной ортогонализации. Эта процедура обновления реализована в [16].

Метод секущих — очень экономный в вычислительном плане метод минимизации суммы квадратов. В этом его большое преимущество. Его следует применять при большом количестве параметров и наличии хорошего начального приближения. Если же число оцениваемых параметров не очень велико (например, меньше десятка), а овражность $Q(\alpha)$ достаточно велика, более предпочтительными оказываются методы с точным вычислением производных ¹⁾.

§ 4. Критерий стационарности и устойчивости

Процесс минимизации функции предполагает выбор критерия останова. Как правило, этот критерий основан на сравнении соседних итераций. Процесс минимизации функции $F(x)$ останавливают тогда, когда выполнены оба или одно из двух условий:

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \epsilon_x, \quad |F(x_{k+1}) - F(x_k)| \leq \epsilon_F, \quad (4.1)$$

где ϵ_x и ϵ_F — точности по аргументу и функции. Часто пользуются относительными критериями

$$\frac{\|x_{k+1} - x_k\|}{\|x_k\|} \leq \epsilon'_x, \quad \frac{|F(x_{k+1}) - F(x_k)|}{|F(x_k)|} \leq \epsilon'_F. \quad (4.2)$$

У практиков широко распространено заблуждение, по которому условия (4.1) или (4.2) при малых положительных значениях ϵ_x, ϵ_F или ϵ'_x, ϵ'_F влекут соответствующую малость градиента. Этот вывод обосновывается следующим образом. Итеративный процесс минимизации представим в виде

$$x_{k+1} = x_k + M(x_k)q(x_k), \quad (4.3)$$

¹⁾ В [25] предлагаются способы точного вычисления производных программными средствами.

где $M(x_k)$ – невырожденная положительно определенная матрица, $q(x_k)$ – антиградиент функции $F(x)$. Поэтому, если $x_{k+1} = x_k$, то $M(x_k)q(x_k) = 0$, откуда в силу невырожденности матрицы M получим $q(x_k) = 0$, т.е. x_k – стационарная точка. Если $x_{k+1} \approx x_k$, то опять же $q(x_k) \approx 0$ в силу непрерывности. Ошибка заключается в том, что последнее утверждение верно лишь для хорошо обусловленных задач минимизации (со слабой овражностью). Тогда линии уровня минимизируемой функции не очень вытянуты в одном направлении и не очень сжаты в другом. В противном случае линии уровня имеют бананоподобную форму. Матрица M , в большинстве случаев имея своим прототипом матрицу гессiana $(\partial^2 F / \partial x^2)^{-1}$, будет также плохо обусловленной. Как следует из (4.3),

$$\|q(x_k)\|^2 = (x_{k+1} - x_k)^T M^{-2}(x_k)(x_{k+1} - x_k).$$

В частности, если $x_{k+1} - x_k$ совпадает с направлением вектора, отвечающего максимальному собственному числу матрицы $M^{-2}(x_k)$, то

$$\|q(x_k)\| = \frac{1}{\lambda_{\min} M(x_k)} \|x_{k+1} - x_k\|. \quad (4.4)$$

При плохой обусловленности $\lambda_{\min} M(x_k) \approx 0$, поэтому условие $\|x_{k+1} - x_k\| \approx 0$ не влечет $\|q(x_k)\| \approx 0$. В условиях сильной овражности движение в процессе (4.3), как правило, и происходит поперек оврага, т.е. направление $x_{k+1} - x_k$ совпадает с направлением минимального собственного вектора матрицы $M(x_k)$, что и приводит к оценке (4.4).

Особенно опасно это заблуждение, когда процесс минимизации происходит в автоматическом режиме. Часто, задаваясь другим начальным приближением, приходят и к другому решению. Иногда можно слышать, что это результат многоэкстремальности. Скоропалительный вывод! Практика автора показывает, что в подавляющем большинстве случаев это есть не результат многоэкстремальности, а результат неправильного толкования (4.1) и (4.2).

Разумеется, более верной была бы непосредственная проверка малости нормы градиента

$$\|q(x_k)\| \leq \epsilon_g. \quad (4.5)$$

Часто (4.5) как раз и присовокупляют к (4.1) или (4.2). По этому поводу хочется сделать свое замечание. Для задач с несильной овражностью (4.5) следует из критериев схождения соседних итераций (4.1) или (4.2). Для задач с сильной овражностью процесс (4.3) нередко "циклится" или двигается очень медленно. Если ограничиться критериями (4.1) или (4.2), то в этом случае произойдет останов. Если в системе критериев присутствует (4.5) или ему подобный, то фактически вычисления будут производиться впустую. В этой ситуации процесс (4.3) действительно необходимо остановить, начав его либо с другого начального приближения, либо изменив управляющие параметры процесса, либо вообще перейти к другому методу минимизации. Таким образом, градиент или норму градиента необходимо

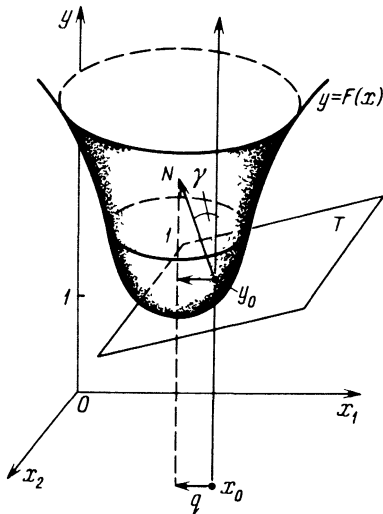


Рис. 21. Геометрическая интерпретация критерия стационарности для произвольной функции $F(x)$

учитывать лишь по окончании процесса минимизации (останова). Норма градиента функции, в частности,

$$\left\| \frac{\partial F}{\partial x} \right\| \quad (4.6)$$

неудобна тем, что по ней трудно сравнивать степень стационарности на разных функциях. Мы предлагаем следующую "нормировку" (4.6).

Как оценить степень стационарности функции $F(x)$ в точке $x_0 \in R^m$? Построим в точке x_0 в пространстве $(x, y) \in R^{m+1}$ касательную плоскость T к функции $y = F(x)$ в точке (x_0, y_0) , $y_0 = F(x_0)$ (рис. 21), уравнение которой запишем в виде

$$y - y_0 + (q, x - x_0) = 0, \quad (4.7)$$

где $q = -\partial F/\partial x$ — антиградиент. Чем "стационарнее" точка, тем параллельнее эта плоскость координатной плоскости x . Нормалью к касательной плоскости (4.7) является вектор $N = (q, 1)$. Естественно поэтому в качестве меры стационарности x_0 , т.е. параллельности (4.7) координатной плоскости x , взять угол, который составляет вектор N с вектор-осью y , т.е. с вектором $(0, \dots, 0, 1)$. Таким образом, в качестве критерия стационарности в общем случае предлагаем брать

$$\gamma = \arcsin \frac{\|q\|}{\sqrt{1 + \|q\|^2}}. \quad (4.8)$$

Напомним, что γ интерпретируется как угол уклонения касательной плоскости от плоскости, параллельной системе аргументов $x \in R^m$. Фактически (4.8) имеет смысл вводить для $\|q\|$, достаточно больших (при $\|q\| \approx 0$, легко видеть, $\gamma \approx \|q\|$). Критерий (4.8) позволяет сравнивать степени стационарности разных функций, он имеет наглядную геометрическую интерпретацию.

И все же показатель (4.8) не всегда оказывается удовлетворительным. Иногда задачи являются настолько чувствительными к малому изменению параметров, что достичь хорошей точности по этому критерию или тем более по критерию (4.5) физически невозможно (учитывая конечность разрядной сетки ЭВМ). Наиболее часто это происходит в случае, когда минимизируемая функция включает в себя экспоненты. Например, при нахождении минимума суммы квадратов для таких функций-регрессий, как экспоненциальная

нента, модифицированная экспонента, производственная функция CES (см. § 4, 5, гл. 1) и т.п., точки с нормой градиента порядка 10^3 оказывались весьма близкими к стационарным.

Учитывая специфику суммы квадратов, можно построить более удовлетворительный критерий стационарности, не уступающий по своей наглядности и простоте критерию (4.8). Приступим к его описанию [16, 57].

Напомним, что в случае минимизации суммы квадратов

$$Q(\alpha) = \sum (y_i - f_i(\alpha))^2, \quad \alpha \in R^m,$$

задача фактически сводится к поиску точки $f = f(a) \in f(\alpha)$ (m -мерная

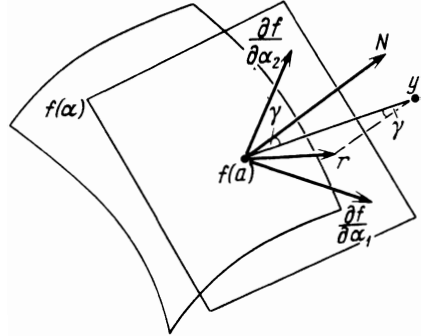


Рис. 22. Геометрическая интерпретация критерия стационарности для суммы квадратов

поверхность в n -мерном пространстве), наименее удаленной от фиксированной точки $y \in R^n$. Поскольку

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha} = \sum (y_i - f_i(\alpha)) \frac{\partial f_i}{\partial \alpha},$$

то равенство нулю градиента $Q(\alpha)$ означает ортогональность вектора $y - f$ касательной плоскости поверхности $f(\alpha)$. Касательная плоскость T порождена векторами-производными $\partial f / \partial \alpha_1, \dots, \partial f / \partial \alpha_m$ (рис. 22). Поэтому $y - f \perp T$, если $y - f(a) \perp \partial f(a) / \partial \alpha_j, j = 1, \dots, m$. Степень ортогональности будем мерить в углах. Таким образом, рассчитываем так называемые *уклонения от нормали в градусах* как углы, дополнительные к углам между векторами $y - f(a)$ и $\partial f(a) / \partial \alpha_j$. Критерием стационарности тогда будет малость этих углов для всех $j = 1, \dots, m$.

В рамках предлагаемого критерия стационарности можно обойтись одним показателем. Определим угол, который составляет вектор $y - f(a)$ с касательной плоскостью T , т.е. минимальный угол между $y - f(a)$ и $v \in T$. Нетрудно показать, что этот угол будет равен углу между вектором $y - f(a)$ и вектором

$$r = F(F^T F)^{-1} F^T (y - f) = Fp,$$

где $f = f(a)$, $p = (F^T F)^{-1} F^T (y - f)$ — вектор поправки в методе

Ньютона – Гаусса (1.3), а косинус угла между ними

$$\cos(\hat{r}, y - f) = \frac{(y - f, r)}{\|y - f\| \|r\|}.$$

Далее найдем

$$\begin{aligned} (y - f, r) &= (y - f)^T F (F^T F)^{-1} F^T (y - f), \\ \|r\|^2 &= (y - f)^T F (F^T F)^{-1} F^T F (F^T F)^{-1} F^T (y - f) = \\ &= (y - f)^T F (F^T F)^{-1} F^T (y - f). \end{aligned}$$

Поэтому косинус угла между вектором $y - f$ и касательной плоскостью равен

$$\cos(\hat{r}, y - f) = \frac{1}{\sqrt{Q}} [(y - f)^T F (F^T F)^{-1} F^T (y - f)]^{1/2}. \quad (4.9)$$

Окончательно критерий стационарности суммы квадратов выглядит следующим образом: процесс минимизации a_0, a_1, \dots считаем сошедшимся к стационарной точке на k -й итерации, если

$$\gamma = 90^\circ - \arccos \frac{1}{\sqrt{Q}} [(y - f_k)^T F_k (F_k^T F_k)^{-1} F_k^T (y - f_k)]^{1/2} \leq \epsilon_S, \quad (4.10)$$

где ϵ_S – предельный угол уклонения от нормали (\arccos вычисляется в градусах), $f_k = f(a_k)$, $F_k = \partial f(a_k) / \partial \alpha$.

Выражение (4.9) может быть записано в разной форме. Если обозначить

$$q = -\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha},$$

то (4.9) представимо в виде

$$\frac{1}{\sqrt{Q}} (p, q)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{Q}} [q^T (F^T F)^{-1} q]^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{Q}} (p^T F^T F p)^{1/2}.$$

Показатель (4.9) и соответствующий ему критерий стационарности суммы квадратов на практике зарекомендовал себя очень хорошо. Эмпирическая проверка ряда задач показала, что точки с малыми значениями (4.9) или левой части неравенства (4.10) действительно лежали в малой окрестности стационарной точки. Наоборот, в том случае, когда критерий (4.10) не срабатывал, оказывалось, что процесс минимизации просто заиклился, и дальнейшие поиски минимума $Q(\alpha)$ позволяли найти реальную стационарную точку.

Теперь обратимся к другому вопросу. Насколько устойчиво найденное решение (точка локального минимума функции) по отношению к воз-

можно малым изменениям исходных данных? Понятно, что если это решение неустойчиво, то ценность найденного минимума невелика; интерес представляет лишь то решение, которое малочувствительно к малым изменениям исходных данных. В рамках минимизации суммы квадратов интерес представляет зависимость решения от вектора данных $y \in R^n$.

Чтобы лучше понять идейную сторону, начнем с простейшего случая — одномерной линейной модели

$$Q(\alpha) = \sum (y_i - \alpha x_i)^2 = \|y - \alpha x\|^2 \Rightarrow \min, \quad \alpha \in R^1.$$

Решением этой задачи ($x \neq 0$) является оценка МНК

$$a = a(y) = \frac{(x, y)}{\|x\|^2}.$$

Естественно, в качестве меры чувствительности решения a по отношению к данным y взять вектор

$$\frac{\partial a}{\partial y} = \frac{x}{\|x\|^2}.$$

За совокупный показатель чувствительности (устойчивости) берем

$$\left\| \frac{\partial a}{\partial y} \right\| = \frac{1}{\|x\|}.$$

Это и есть та мера устойчивости решения квадратичной задачи, которая отвечает на вопрос, насколько вариабельно решение при изменении данных, т.е. вектора y .

В многомерном линейном случае

$$Q(\alpha) = \|y - X\alpha\|^2 \Rightarrow \min, \quad \alpha \in R^m,$$

где $y \in R^n$, X — матрица $n \times m$ полного ранга. Тогда решением будет

$$\hat{a} = (X^T X)^{-1} X^T y, \quad (4.11)$$

поэтому матрицей устойчивости естественно считать

$$\frac{\partial a}{\partial y} = (X^T X)^{-1} X^T = U.$$

В многомерном случае будем интересоваться частными коэффициентами устойчивости, т.е. векторами $\partial a_j / \partial y$, а конкретнее их нормами. Легко видеть, что $\partial a_j / \partial y$ есть j -я вектор-строка матрицы U , которую обозначим через U_j , $j = 1, \dots, m$. Как и в одномерном случае, в качестве меры чувствительности $a_j \in R^1$ к y возьмем $\|\partial a_j / \partial y\| = \|U_j\|$. Покажем, что для (4.11)

$$\left\| \frac{\partial a_j}{\partial y} \right\| = \sqrt{(X^T X)^{-1}_{jj}}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (4.12)$$

Это следует из того факта, что, если U_j – вектор-строка матрицы U , то

$$\|U_j\|^2 = (UU^T)_{jj} = [(X^T X)^{-1} X^T X (X^T X)^{-1}]_{jj} = (X^T X)^{-1}_{jj}.$$

Таким образом, в линейной модели регрессии точка минимума суммы квадратов (4.11) устойчива, если величины (4.12) достаточно малы. Замечательно, что эти величины составляют основу проверок статистических гипотез значимости параметров регрессии. В линейном регрессионном анализе [15] показывается, что среднеквадратическое отклонение оценок МНК (4.11) есть

$$s_j = s \sqrt{(X^T X)^{-1}_{jj}}, \quad j = 1, \dots, m,$$

где s – среднеквадратическое отклонение регрессии

$$s = \sqrt{\frac{\min Q(\alpha)}{n - m}}.$$

Таким образом, используя чисто вычислительные принципы, удалось получить ответ, который опирается на сугубо статистическую природу регрессии.

Рассмотрим теперь нелинейную регрессию. Как известно, с точностью до членов второго порядка малости нелинейную регрессию можно представить в виде

$$y = f(a) + F(a)(\alpha - a) + \epsilon, \quad (4.13)$$

где a – оценка МНК, $F(a) = \partial f(a) / \partial \alpha$. Поэтому показатель устойчивости определения МНК в нелинейной регрессии приближенно равен

$$\left\| \frac{\partial a_j}{\partial y} \right\| \approx \sqrt{(F^T F)^{-1}_{jj}}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (4.14)$$

где $F = \partial f / \partial \alpha$ – матрица первых производных нелинейной регрессии $n \times m$.

На практике замечено, что для точек, далеких от точек глобального минимума, правая часть неравенств (4.14) является достаточно большой. Таким образом, величины $\sqrt{(F^T F)^{-1}_{jj}}$ могут служить своеобразным индикатором качества решаемой задачи. Еще раз подчеркнем, что апелляция к величинам $\sqrt{(F^T F)^{-1}_{jj}}$ для статистика не является неожиданной, так как $s \sqrt{(F^T F)^{-1}_{jj}}$ есть не что иное, как стандартная ошибка j -го параметра регрессии. Интересно то, что эту величину здесь удалось интерпретировать в другом, чисто вычислительном, нестатистическом смысле.

СПЕЦИАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ МИНИМИЗАЦИИ И НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ

Учет специфики нелинейной регрессии иногда позволяет строить еще более экономные, специальные алгоритмы минимизации функционала идентификации (например, суммы квадратов). В настоящей главе предлагается три общих метода учета этой специфики: мажорирующего параболоида, расщепления и подстановки. Применение этих методов иллюстрируется следующими задачами: минимизация невязок линейной модели с неквадратичной функцией потерь, минимизация суммы квадратов для логлинейной модели регрессии и обобщенной ПФ CES, оценивание параметров гетероскедастичной регрессии.

§ 1. Некоторые общие подходы к построению специальных методов

Учет специфики конкретной модели регрессии позволяет строить специальные методы минимизации суммы квадратов. Как правило, специальные методы оказываются более экономными и эффективными, чем такие общие методы минимизации, как градиентный, сопряженных градиентов, ньютоновские, квазиньютоновские, а также метод Ньютона – Гаусса и его модификации. Часто специальные методы являются строго релаксационными, т.е. удовлетворяют условию монотонного падения минимизируемой функции в нестационарных точках:

$$Q(\alpha_{k+1}) < Q(\alpha_k), \quad q_k \neq 0, \quad (1.1)$$

где q_k – антиградиент $Q(\alpha)$ в точке $\alpha = \alpha_k$. Ниже будет предложено несколько общих подходов построения специальных методов. Сначала покажем, как может быть использована специфика нелинейной регрессии в плане построения специальных методов минимизации суммы квадратов.

Рассмотрим класс полилинейных регрессий (см. § 3, гл. 3) с функцией

$$f(\theta) = X\alpha + \rho u - \rho Z\alpha, \quad \theta = (\alpha, \rho), \quad (1.2)$$

для которой сумма квадратов равна

$$Q(\theta) = Q(\alpha, \rho) = \|y - X\alpha - \rho u + \rho Z\alpha\|^2.$$

Специфика (1.2) заключается в том, что при фиксировании параметра $\rho \in R^1$ функция $f(\theta)$ является линейной по α ; наоборот, при фиксирова-

нии α функция $f(\theta)$ линейна по ρ . Учтем это обстоятельство при построении метода минимизации. Итак, пусть ρ_k – k -е начальное приближение. Вектор α_k находим из условия

$$Q(\alpha, \rho_k) = \|y - X\alpha - \rho_k u + \rho_k Z\alpha\|^2 \Rightarrow \min_{\alpha} \text{откуда}$$

$$\alpha_k = [(X - \rho_k Z)^T (X - \rho_k Z)]^{-1} (X - \rho_k Z)^T (y - \rho_k u), \quad (1.3)$$

в предположении, что обратная матрица существует. Фиксируя α_k и учитывая квадратичность Q по ρ , можно найти новое приближение для ρ , минимизирующее $Q(\alpha_k, \rho)$ по ρ :

$$\rho_{k+1} = \frac{1}{\|u - Z\alpha_k\|^2} (u - Z\alpha_k)^T (y - X\alpha_k). \quad (1.4)$$

На основе теоремы 1.2 из предыдущей главы нетрудно показать, что этот процесс сходится. Действительно, из характера приближений (1.3), (1.4) следует, что

$$Q(\theta_{k+1}) < Q(\theta_k), \quad \frac{\partial Q(\theta_k)}{\partial \theta} \neq 0. \quad (1.5)$$

Остальные предположения этой теоремы также выполнены: вектор поправки – непрерывная функция точки – и составляет с антиградиентом острый угол.

Интересно сравнить процесс (1.3), (1.4) для регрессии (1.2) с методом Ньютона – Гаусса. В методе Ньютона – Гаусса вектор поправки имеет вид

$$\theta_{k+1} - \theta_k = (F_k^T F_k)^{-1} F_k^T (y - f(\theta_k)), \quad (1.6)$$

где $F_k = \partial f(\theta_k) / \partial \theta$. В случае модели (1.2) имеем

$$F_k = [X - \rho_k Z, \quad u - Z\alpha_k],$$

$$F_k^T F_k = \begin{bmatrix} (X - \rho_k Z)^T (X - \rho_k Z) & (X - \rho_k Z)^T (u - Z\alpha_k) \\ (u - Z\alpha_k)^T (X - \rho_k Z) & \|u - Z\alpha_k\|^2 \end{bmatrix}.$$

В процессе (1.3), (1.4) блок $(X - \rho_k Z)^T (u - Z\alpha_k)$ и ему симметричный как бы игнорируются. Тогда обратная матрица есть

$$(F_k^T F_k)^{-1} \approx P_k = \begin{bmatrix} [(X - \rho_k Z)^T (X - \rho_k Z)]^{-1} & 0 \\ 0 & \|u - Z\alpha_k\|^{-2} \end{bmatrix},$$

и при подстановке в (1.6) она приводит к процессу (1.3), (1.4).

Таким образом, для полилинейной модели (1.2) можно предложить три метода минимизации. Первый – специальный – описывается уравнениями (1.3) и (1.4), по построению он удовлетворяет условию монотонности (1.5) и сходится. Второй основан на общем методе Ньютона – Гаусса. Теперь уже для получения сходимости необходимо выбирать длину шага. Наконец, для минимизации суммы квадратов можно применять метод Ньютона. Для этого необходимо, чтобы матрица $\partial^2 Q / \partial \theta^2$ была положительно определена. Соответствующие критерии были предложены в § 3, гл. 3.

Теперь перейдем к изложению одного общего приема построения специальных алгоритмов минимизации, учитывающих специфику минимизи-

руемой функции. Учет этой специфики здесь проявляется в построении оценок сверху для гессиана функции. Соответствующий метод называем *методом мажорирующего параболоида*.

Итак, пусть $F(x)$ – минимизируемая функция, $x \in R^m$, x_k – k -е приближение. Рассмотрим следующую квадратичную форму:

$$P(x; x_k) = \frac{1}{2} (x - x_k)^T A_k (x - x_k) + (x - x_k)^T b_k + F(x_k), \quad (1.7)$$

где A_k – положительно определенная матрица $m \times m$, $b_k \in R^m$. Допустим, параболоид P , задаваемый квадратичной формой (1.7), мажорирует $F(x)$ на всем пространстве, т.е.

$$F(x) \leq P(x; x_k), \quad x \in R^m. \quad (1.8)$$

Метод мажорирующего параболоида основан на следующем простом замечании: если x_{k+1} уменьшает значение P , то оно уменьшает и значение функции. А именно, если $P(x_{k+1}; x_k) \leq P(x_k; x_k)$, то в силу (1.8)

$$F(x_{k+1}) \leq P(x_{k+1}; x_k) \leq P(x_k; x_k) = F(x_k).$$

Если в (1.7) $b_k = \partial F(x_k)/\partial x$, то параболоид называем *соприкасающимся*, в этом случае $\partial P(x_k; x_k)/\partial x = \partial F(x_k)/\partial x$.

Построение мажорирующего параболоида тесно связано с задачей оценки сверху гессиана минимизируемой функции $F(x)$. Так, предположим, что имеет место оценка

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \leq A, \quad x \in R^m, \quad (1.9)$$

где A – положительно определенная матрица (знак неравенства означает, что разность между правой и левой частью есть неотрицательно определенная матрица). На основании этой оценки мажорирующий соприкасающийся параболоид запишется так:

$$P(x; x_k) = \frac{1}{2} (x - x_k)^T A (x - x_k) - (x - x_k, q_k) + F(x_k),$$

где $q_k = -\partial F(x_k)/\partial x$. Неравенство (1.8) следует из оценки (1.9) и разложения $F(x)$ в точке $x = x_k$ в ряд Тейлора до квадратичных членов. Тогда можно утверждать, что итерационный процесс

$$x_{k+1} = x_k + A^{-1} q_k, \quad k = 0, 1, \dots,$$

является строго релаксационным, т.е.

$$F(x_{k+1}) < F(x_k), \quad q_k \neq 0, \quad (1.10)$$

и по теореме 1.2, гл. 6 он сходится.

За редким исключением может быть найдена оценка сверху (1.9) (верная для всех $x \in R^m$). Вместо (1.9) будем искать оценку сверху на множестве уровня:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \leq A_k, \quad x \in S_k = \{x: F(x) \leq F(x_k)\}. \quad (1.11)$$

Если $F(x_k) < \bar{F}_E$, \bar{F}_E – нижняя грань функции на бесконечности (см. § 1, гл. 1), то множество S_k компактно, значит, в условиях непрерывности гессиана его оценка сверху на S_k теоретически всегда существует. Построим соответствующий соприкасающийся параболоид

$$P(x; x_k) = \frac{1}{2} (x - x_k)^T A_k (x - x_k) - (q_k, x - x_k) + F(x_k). \quad (1.12)$$

Будет ли он мажорировать $F(x)$ на множестве S_k (в этом случае параболоид называем *частично мажорирующим*)? В частности, если $P(x_{k+1}; x_k) \leq P(x_k; x_k) = F(x_k)$, то в условиях (1.11) будет ли иметь место неравенство

$$F(x_{k+1}) \leq P(x_{k+1}; x_k) \leq F(x_k)? \quad (1.13)$$

Как будет показано ниже, ответ – положительный. Отсюда следует, что вместо равномерной оценки (1.9) можно перейти к оценке на множестве уровня (1.11). Рассмотрим сначала одномерный случай.

Лемма 1.1. Пусть $\Phi(\lambda)$ – дифференцируемая функция действительного переменного $-\infty < \lambda < \infty$. Пусть для квадратичной функции

$$P(\lambda) = \frac{1}{2} A' (\lambda - \lambda_0)^2 + \Phi'(\lambda_0) (\lambda - \lambda_0) + \Phi(\lambda_0),$$

где $A' > 0$, $\lambda_0 \in R^1$, имеет место неравенство

$$\Phi(\lambda) \leq P(\lambda), \quad \lambda \in S_0 = \{\lambda \in R^1: \Phi(\lambda) \leq \Phi(\lambda_0)\}. \quad (1.14)$$

Тогда, если $P(\lambda_*) \leq P(\lambda_0)$, то $\Phi(\lambda_*) \leq \Phi(\lambda_0)$.

Доказательство. Понятно, что если $\lambda_* \in S_0$, утверждение леммы следует из (1.14). Допустим, $\lambda_* \notin S_0$. Для определенности будем считать $\Phi'(\lambda_0) > 0$ (случай $\Phi'(\lambda_0) = 0$ очевиден). Тогда $P(\lambda_*) \leq P(\lambda_0) = \Phi(\lambda_0)$ тогда и только тогда, когда

$$\lambda_1 = \lambda_0 - \frac{2\Phi'(\lambda_0)}{A'} \leq \lambda_* < \lambda_0.$$

Пусть $\bar{\lambda}$ – наибольший корень уравнения $\Phi(\lambda) = \Phi(\lambda_0)$ на интервале $[-\infty; \lambda_0)$; если $\Phi(\lambda) < \Phi(\lambda_0)$ для всех $\lambda < \lambda_0$, то полагаем $\bar{\lambda} = -\infty$. Докажем, что $\bar{\lambda} \leq \lambda_1$. Действительно, допустим противное. Тогда $P(\bar{\lambda}) < \Phi(\lambda_0)$, но из условия леммы $P(\bar{\lambda}) \geq \Phi(\bar{\lambda}) = \Phi(\lambda_0)$, поскольку $\bar{\lambda} \in S_0$. Это противоречие и доказывает лемму.

Возвратимся к вопросу построения частично мажорирующего параболоида. Пусть имеет место оценка (1.11); построим соответствующий соприкасающийся параболоид (1.12). Пусть $P(x_{k+1}; x_k) \leq P(x_k; x_k) = F(x_k)$. Рассмотрим соответствующие одномерные функции

$$\Phi(\lambda) = F((1 - \lambda)x_k + \lambda x_{k+1}),$$

$$P(\lambda) = P((1 - \lambda)x_k + \lambda x_{k+1}; x_k), \quad -\infty < \lambda < \infty.$$

В обозначениях леммы 1.1 $\lambda_0 = 0$, $A' = (x_{k+1} - x_k)^T A_k (x_{k+1} - x_k)$, $\Phi' = (q_k, x_{k+1} - x_k)$, $\lambda_* = 1$. На основании этой леммы утверждаем, что если

x_{k+1} понижает значение квадратичной формы, то x_{k+1} понижает и значение функции, т.е. неравенство (1.13) выполнено. Очевидно, в рамках (1.11), (1.12), (1.13) в качестве "оптимального" значения x_{k+1} необходимо брать

$$x_{k+1} = x_k + A_k^{-1} q_k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (1.15)$$

Поскольку этот процесс удовлетворяет условию монотонности падения (1.10), то при условии непрерывности оценки сверху (1.11), т.е. непрерывной зависимости $A(x_k) = A_k$ от x_k , по теореме 1.2, гл. 6 он будет сходиться.

На основании оценки (1.11) можно автоматически выбирать длину шага в некотором итерационном процессе для обеспечения (1.10). Действительно, пусть некоторый итерационный процесс имеет вид

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k p_k, \quad p_k = G_k^{-1} q_k,$$

где G_k – положительно определенная матрица. Задача состоит в том, чтобы на основании оценки (1.11) выбрать $\lambda_k > 0$ так, чтобы стало выполненным условие монотонности (1.10). Нетрудно показать, это для этого λ_k необходимо взять из интервала

$$0 < \lambda_k < 2 \frac{q_k^T G_k^{-1} q_k}{q_k^T G_k^{-1} A_k G_k^{-1} q_k}, \quad (1.16)$$

В этом смысле "оптимальным" значением параметра λ_k будет

$$\lambda_k = \frac{q_k^T G_k^{-1} q_k}{q_k^T G_k^{-1} A_k G_k^{-1} q_k}. \quad (1.17)$$

На основании этого легко показать, что итерационный процесс с $\lambda_k = 1$, т.е.

$$x_{k+1} = x_k + G_k^{-1} q_k, \quad (1.18)$$

будет удовлетворять условию (1.10), если

$$A_k < 2G_k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (1.19)$$

(разность между правой и левой частью есть положительно определенная матрица).

В качестве иллюстрации построим с помощью метода мажорирующего параболоида специальный метод минимизации суммы квадратов невязок в параболической регрессии (см. также § 1, гл. 3 и § 1, гл. 5) с суммой квадратов

$$Q(\alpha) = \sum (y_i - \alpha^2 x_i - \alpha z_i)^2.$$

Главное – оценить сверху вторую производную $d^2 Q/d\alpha^2$ в терминах значений Q . В § 1, гл. 3 была получена оценка снизу для $d^2 Q/d\alpha^2$. Найдём теперь оценку сверху. По неравенству Коши – Буняковского

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 Q'}{d\alpha^2} = \sum [(2\alpha x_i + z_i)^2 - 2(y_i - \alpha^2 x_i - \alpha z_i)x_i] =$$

$$= \sum (z_i^2 + 4x_i y_i) - 6 \sum x_i e_i \leq \sum (z_i^2 + 4x_i y_i) + 6\sqrt{Q} \|x\|,$$

где $e_i = y_i - \alpha^2 x_i - \alpha z_i$, $Q = \sum e_i^2$. Таким образом, для параболической регрессии

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 Q}{d\alpha^2} \leq \sum (z_i^2 + 4x_i y_i) + 6\sqrt{Q} \|x\|, \quad Q(\alpha) \leq Q_k.$$

Поэтому можно утверждать, что итерационный процесс

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \frac{\sum (y_i - \alpha_k^2 x_i - \alpha_k z_i) (2\alpha_k x_i + z_i)}{\|z\|^2 + 4(x, y) + 6\sqrt{Q_k} \|x\|}, \quad k = 0, 1, \dots,$$

где $Q_k = Q(\alpha_k)$, сходится к стационарной точке $Q(\alpha)$, причем $Q(\alpha_{k+1}) < Q(\alpha_k)$, если $dQ(\alpha_k)/d\alpha \neq 0$ при любом выборе $\alpha_0 \in R^1$. Экспериментальные расчеты показали высокую скорость сходимости этого процесса.

В § 2 и 3 будут рассмотрены другие примеры применения метода мажорирующего параболоида.

Перейдем теперь к описанию другого общего метода построения специальных методов минимизации, который назовем *методом расщепления*.

Разумеется, мы не претендуем на общность решаемых задач. Этот метод, как и предыдущий, нужно рассматривать лишь как полуинтуитивное наставление.

Итак, пусть $F(x)$ – минимизируемая функция на R^m . Будем решать систему нелинейных уравнений

$$q(x) = 0, \quad x \in R^m, \quad (1.20)$$

где q – антиградиент $F(x)$. *Функцией расщепления* для (1.20) называем непрерывную вектор-функцию $2m$ аргументов $R(u; v)$, $u, v \in R^m$, такую, что

$$R(x; x) = q(x). \quad (1.21)$$

Функция расщепления должна обладать еще тем неформальным свойством, что при фиксированном v система уравнений

$$R(u; v) = 0 \quad (1.22)$$

относительно $u \in R^m$ должна решаться относительно просто (например, представлять собой систему линейных уравнений с невырожденной матрицей). Пусть $u = V(v)$ – решение системы (1.22). Итерационный процесс решения (1.20) тогда будет выглядеть следующим образом. Пусть x_0 – начальное приближение, R – функция расщепления со свойством (1.21). Решаем систему $R(x; x_0) = 0$ и полагаем $x_1 = V(x_0)$. Затем то же самое продельваем с приближением x_1 , получаем $x_2 = V(x_1)$ и т.д. Главное, чтобы получаемая таким образом последовательность сходилась. Как только это имеет место, т.е. $x_k \rightarrow x_*$, то в силу (1.21) можно утверждать, что x_* – стационарная точка $F(x)$, т.е. $q(x_*) = 0$. Действительно, по определению $R(x_{k+1}; x_k) = 0$. Поэтому, переходя к пределу при $k \rightarrow \infty$, получаем $R(x_*; x_*) = q(x_*) = 0$.

В общих чертах в методе расщепления можно выделить два момента: выделение в системе нелинейных уравнений (1.20) линейной части и доказательство сходимости.

Метод расщепления проиллюстрируем на примере задачи минимизации суммы p -х степеней модулей невязок линейной модели (p фиксировано):

$$Q_p(\alpha) = \sum_{i=1}^n |y_i - (\alpha, x_i)|^p \Rightarrow \min, \quad 1 \leq p \leq 2,$$

$x_1, \dots, x_n, \alpha \in R^m$. Избегая случаев вырождения, будем считать, что система векторов $\{x_i\}$ имеет ранг, равный m . Заметим прежде всего следующее. Во-первых, нетрудно показать, что нижняя грань функции $Q_p(\alpha)$ на бесконечности равна ∞ . Во-вторых, $Q_p(\alpha)$ – выпуклая, а при $p > 1$ – строго выпуклая функция (в частности, при $p > 1$ у $Q_p(\alpha)$ существует единственная стационарная точка, совпадающая с точкой минимума функции).

В-третьих, при $p > 1$ минимизируемая функция непрерывно дифференцируема.

Будем искать стационарные точки функции (из соображений корректности будем считать $p > 1$, хотя аналогичные утверждения верны и для случая $p = 1$):

$$-\frac{\partial Q_p}{\partial \alpha} = \sum |y_i - (\alpha, x_i)|^{p-1} \text{sign}(y_i - (\alpha, x_i)) x_i = 0. \quad (1.23)$$

Будем пока считать, что $y_i \neq (\alpha, x_i)$. Тогда i -й член этой суммы можно представить как

$$x_i (y_i - \alpha^T x_i) |y_i - (\alpha, x_i)|^{p-2}.$$

Поэтому в качестве функции расщепления для (1.23) разумно взять

$$R(u; v) = \sum x_i (y_i - u^T x_i) |y_i - v^T x_i|^{p-2}.$$

Тогда решением системы $R(u, v) = 0$ относительно u при фиксированном v будет

$$u = (X^T W(v) X)^{-1} X^T W(v) y, \quad (1.24)$$

где $W(v)$ – диагональная матрица, $W_{ii}(v) = |y_i - v^T x_i|^{p-2}$, X – матрица, i -я строка которой есть x_i^T , $i = 1, \dots, n$, $y_i \neq (v, x_i)$. На основе (1.24) итеративный процесс для решения системы (1.23) запишется следующим образом:

$$\alpha_{k+1} = (X^T W(\alpha_k) X)^{-1} X^T W(\alpha_k) y, \quad k = 0, 1, \dots \quad (1.25)$$

Описанный метод решения задачи минимизации $Q_p(\alpha)$ хорошо известен. В [60] он называется "итеративным методом наименьших квадратов", в [35] – "методом вариационно-взвешенных квадратических приближений". Покажем, что процесс (1.25) понижает значение минимизируемой функции на каждой итерации. Следуя [35] и применяя неравенство Гёльдера, получаем

$$\begin{aligned} Q_p(\alpha_{k+1}) &= \sum \frac{|y_i - (\alpha_{k+1}, x_i)|^p}{|y_i - (\alpha_k, x_i)|^{(2-p)/2}} |y_i - (\alpha_k, x_i)|^2 \leq \\ &\leq \left[\sum \frac{|y_i - (\alpha_{k+1}, x_i)|^2}{|y_i - (\alpha_k, x_i)|^{2-p}} \right]^{\frac{p}{2}} \left[\sum |y_i - (\alpha_k, x_i)|^p \right]^{\frac{2-p}{2}}. \end{aligned}$$

Решение (1.25) по условию означает, что

$$\min_{\alpha} \sum \frac{|y_i - (\alpha, x_i)|^2}{|y_i - (\alpha_k, x_i)|^{2-p}} = \sum \frac{|y_i - (\alpha_{k+1}, x_i)|^2}{|y_i - (\alpha_k, x_i)|^{2-p}},$$

т.е.

$$\sum \frac{|y_i - (\alpha_{k+1}, x_i)|^2}{|y_i - (\alpha_k, x_i)|^{2-p}} \leq \sum \frac{|y_i - (\alpha_k, x_i)|^2}{|y_i - (\alpha_k, x_i)|^{2-p}} = \sum |y_i - (\alpha_k, x_i)|^p.$$

Поэтому предыдущее неравенство можно переписать в виде

$$Q_p(\alpha_{k+1}) \leq Q_p^{\frac{p}{2}}(\alpha_k) Q_p^{\frac{2-p}{2}}(\alpha_k) = Q_p(\alpha_k),$$

причем знак неравенства будет строгим, если $\partial Q_p(\alpha_k)/\partial \alpha \neq 0$.

Строго говоря, итеративный процесс (1.25) некорректен, поскольку он определен лишь на тех итерациях, при которых $y_i \neq (\alpha_k, x_i)$, $i = 1, \dots, n$. Исследуем эту ситуацию более подробно. Начнем с простейшего случая $p = 1$, $m = 1$, $x_i = 1$, $i = 1, \dots, n$. Тогда

$$Q_1(\alpha) = \sum |y_i - \alpha| \Rightarrow \min_{\alpha} \quad (1.26)$$

Ответ этой задачи хорошо известен: значением, минимизирующим $Q_1(\alpha)$, будет медиана \tilde{y} — то значение α , для которого число y_i , меньших этого значения, равно числу y_i , больших этого значения (при четном n решением (1.26) является целый интервал). Очевидно, процесс (1.25) для этой задачи приобретает вид

$$\alpha_{k+1} = \frac{\sum y_i |y_i - \alpha_k|^{-1}}{\sum |y_i - \alpha_k|^{-1}}. \quad (1.27)$$

Обозначим

$$\varphi(\alpha) = \frac{\sum y_i |y_i - \alpha|^{-1}}{\sum |y_i - \alpha|^{-1}}, \quad -\infty < \alpha < \infty. \quad (1.28)$$

Тогда итерации (1.27) представляют собой не что иное, как итерации в методе последовательных приближений, опирающемся на принцип неподвижной точки отображения $\varphi(\alpha)$ (см. ниже). Сложность состоит в том, что (1.28) не определено при $\alpha = y_i$. Однако отображение $\varphi(\alpha)$ можно легко доопределить до непрерывного, положив $\varphi(y_i) = y_i$, поскольку легко проверить, что $\varphi(\alpha) \rightarrow y_i$ при $\alpha \rightarrow y_i$.

Характерный вид функции $\varphi(\alpha)$ показан на рис. 23. Очевидно, $\varphi(\alpha) \rightarrow \bar{y} = \sum y_i/n$ при $|\alpha| \rightarrow \infty$. Решение задачи (1.26) на основе итераций (1.27) иллюстрируется рис. 23; ответом является $\alpha = y_3$. Понятно, что уравнение $\varphi(\alpha) = \alpha$ имеет для функции (1.28) n корней, $n - 1$ корней — лишние с точки зрения минимизации (1.26). И хотя вероятность получения равенства $\alpha_k = y_i$ в процессе итераций (1.27) равна нулю, эту возможность необходимо учесть хотя бы теоретически (см. также [18]).

Те же соображения имеют место для общего случая (1.25). Если "доопределить процесс (1.25) до непрерывности", в некоторых случаях он может сойтись не к локальному минимуму, а к особым точкам (на рис. 23 это точки $\alpha = y_1, y_2, y_4, y_5$). Практически вычисления по (1.25) могут привести к переполнению разрядной сетки ЭВМ.

Итерации (1.25) могут быть модифицированы несколькими способами. Ниже будут описаны два способа, третий приводится в работе [18].

Выберем произвольные $\delta_k \downarrow 0$, например, можно положить $\delta_k = \delta/k$, где $\delta > 0$ достаточно мало. В первом способе определим поправочные веса в процессе (1.25) в виде:

$$W_{H}(\alpha_k) = \min \{ |y_i - (\alpha_k, x_i)|^{p-2}, \delta_k^{p-2} \}.$$

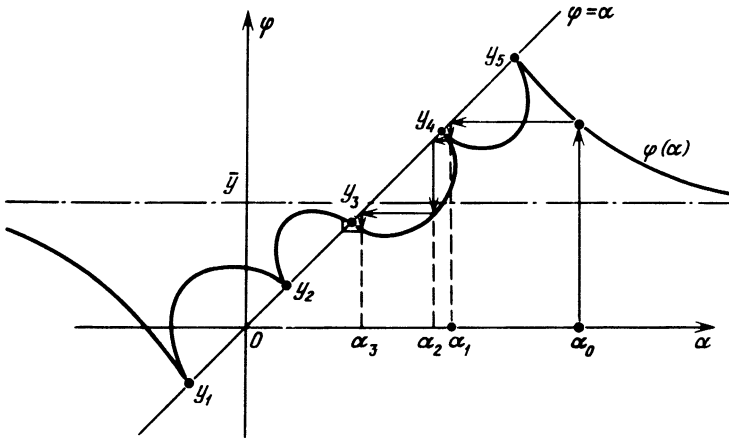


Рис. 23. Итерации (1.27), $n = 5$

Второй вариант модификации опирается на следующее замечание. Если $(\alpha_{k-1}, x_i) \neq y_i$ для всех $i = 1, \dots, n$ и $(\alpha_k, x_j) = y_j$ для некоторых j , то для всех $0 < \lambda \leq \lambda_0$ имеем $((1 - \lambda)\alpha_k + \lambda\alpha_{k-1}, x_i) \neq y_i$ для всех $i = 1, \dots, n$, причем, если $Q_p(\alpha_k) < Q_p(\alpha_{k-1})$, то $Q_p((1 - \lambda)\alpha_k + \lambda\alpha_{k-1}) < Q_p(\alpha_{k-1})$. Геометрически первое утверждение следует из того факта, что если $u \in L$, L – линейное многообразие в R^n размерности $k < n$, $u_2 \in L$, то для всех $0 < \lambda \leq 1$ полуинтервал $\lambda u_2 + (1 - \lambda)u_1 \in L$. Монотонность падения $Q_p(\alpha)$ на полуинтервале следует из строгой выпуклости функции. Поэтому, задавшись $\lambda_k \downarrow 0$, $\lambda_k \leq 1$, процесс минимизации $Q_p(\alpha)$ можно строить следующим образом. Пусть $(\alpha_{k-1}, x_i) \neq y_i$ для всех $i = 1, \dots, n$, α_k построено по правилу (1.25). Если $(\alpha_k, x_j) = y_j$ для некоторых j , берем $\alpha'_k = \lambda_k \alpha_{k-1} + (1 - \lambda_k)\alpha_k$ и процесс продолжаем. При этом $Q_p(\alpha'_k) < Q_p(\alpha_{k-1})$ при $q(\alpha_{k-1}) \neq 0$. На основе этого неравенства и очевидного обобщения теоремы 1.2 из гл. 6 можно показать сходимость $\{\alpha_k\}$ к точке глобального минимума $Q_p(\alpha)$.

Метод расщепления и метод мажорирующего параболоида могут быть взаимоувязаны. Расщеплением можно определить квадратичную форму, а затем показать, что соответствующий соприкасающийся параболоид является мажорирующим. Таким образом, мажорирующий параболоид можно строить не на основе оценки сверху матрицы вторых производных, а из других соображений. Такой прием будет проиллюстрирован в следующем параграфе.

В методе расщепления нетрудно увидеть идею неподвижной точки. В действительности, если $x_k \rightarrow x_*$, то x_* – неподвижная точка оператора $V(x)$. Это замечание может служить отправной точкой построения функции расщепления. В идеальном случае V – сжимающее отображение, т.е.

$$\|V(u) - V(v)\| \leq \rho \|u - v\|,$$

где $0 \leq \rho < 1$ – показатель сжатия. Из теоремы о сжимающем отображении тогда будет следовать, что итерации $x_{k+1} = V(x_k)$ сходятся к решению (1.20) при любом выборе $x_0 \in R^m$, причем (1.20) имеет единственное

решение. В практических задачах мало надежды на то, что можно произвести расщепление, которое приведет к сжимающему отображению. Этого в лучшем случае можно добиться в одностационарных задачах минимизации. Более реальными являются ситуации с несколькими неподвижными точками. Тогда оператор V не будет оператором сжатия на всем пространстве.

Можно, однако, найти простые условия, при которых последовательность $\{x_k\}$, вырабатываемая методом последовательных приближений $x_{k+1} = V(x_k)$, не "уходит в бесконечность". В связи с этим дадим следующее

Определение. Непрерывное отображение $V: R^m \rightarrow R^m$ называем *сжимающим на бесконечности*, если существует такое $0 \leq \rho < 1$ и $R > 0$, что при $\|u\| > R$, $\|v\| > R$

$$\|V(u) - V(v)\| \leq \rho \|u - v\|.$$

Теорема 1.1. Если V — непрерывное отображение, сжимающее на бесконечности, то последовательность $\{x_k\}$, вырабатываемая по правилу $x_{k+1} = V(x_k)$, $k = 0, 1, \dots$, является ограниченной и отображение V имеет по крайней мере одну неподвижную точку.

Доказательство. В силу компактности шара $\|x\| \leq R$ и непрерывности отображения V существует $M > 0$ такое, что

$$\|V(x)\| \leq M, \quad \|x\| \leq R.$$

Не теряя общности можно считать $\|x_0\| \leq R$. Допустим, $\|x_k\| \leq R$, тогда

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \|x_{k+1}\| + \|x_k\| = \|V(x_k)\| + \|x_k\| \leq M + R.$$

Пусть x_n — любой элемент последовательности x_0, x_1, \dots, k — наибольший индекс, $0 \leq k \leq n$, для которого $\|x_k\| \leq R$. Тогда $\|x_i\| > R$, $i = k+1, \dots, n$ и

$$\begin{aligned} \|x_n\| &\leq \|x_n - x_{n-1}\| + \|x_{n-1} - x_{n-2}\| + \dots + \|x_k\| \leq \\ &\leq \rho^{n-k} \|x_{k+1} - x_k\| + \rho^{n-k-1} \|x_{k+1} - x_k\| + \dots + R \leq \\ &\leq \frac{1}{1-\rho} \|x_{k+1} - x_k\| + R \leq \frac{R+M}{1-\rho} + R, \end{aligned}$$

что и доказывает ограниченность последовательности $\{x_k\}$.

Существование по крайней мере одной неподвижной точки — следствие теоремы Брауэра (см., например, [22]). Здесь выпуклым компактным множеством служит шар $\|x\| \leq R + \frac{R+M}{1-\rho}$; теорема доказана.

Естественно, условий теоремы недостаточно для сходимости последовательности $\{x_k\}$.

Применение теоремы 1.1 проиллюстрируем на примере параболической регрессии. Ранее на основе метода мажорирующего параболоида для нее был предложен сходящийся алгоритм минимизации суммы квадратов. Построим теперь алгоритм, основанный на методе расщепления. Для параболической регрессии система (1.20) имеет вид

$$-\frac{1}{2} \frac{dQ}{d\alpha} = \Sigma (y_i - \alpha^2 x_i - \alpha z_i) (2\alpha x_i + z_i) = 0.$$

Это уравнение – кубическое относительно α . Выделим в множителе $y_i - \alpha^2 x_i - \alpha z_i$ величину $2\alpha x_i + z_i$:

$$y_i - \alpha^2 x_i - \alpha z_i = y_i + \alpha^2 x_i - \alpha(2\alpha x_i + z_i).$$

Таким образом, за функцию расщепления берем

$$R(u; v) = \Sigma [(y_i + v^2 x_i) - u(2v x_i + z_i)](2v x_i + z_i).$$

Итерационный процесс поэтому будет выглядеть следующим образом:

$$\alpha_{k+1} = \frac{\Sigma (y_i + \alpha_k^2 x_i) (2\alpha_k x_i + z_i)}{\Sigma (2\alpha_k x_i + z_i)^2}. \quad (1.29)$$

В данном случае отображение

$$V(\alpha) = \frac{\Sigma (y_i + \alpha^2 x_i) (2\alpha x_i + z_i)}{\Sigma (2\alpha x_i + z_i)^2}$$

характерно тем, что $V(\alpha) \rightarrow 1/2\alpha$ при $|\alpha| \rightarrow \infty$. Очевидно, отображение является сжимающим на бесконечности. Непрерывность V следует из того, что если векторы x и z не коллинеарны, что мы и предполагаем, то $\Sigma (2\alpha x_i + z_i)^2 \neq 0$. Таким образом, на основании теоремы 1.1 можно утверждать, что последовательность, вырабатываемая по правилу (1.29), ограничена. Экспериментальная проверка показала достаточно высокую скорость сходимости процесса (1.29).

К сожалению, как уже отмечалось, в общем случае сжимания на бесконечности недостаточно для сходимости последовательности, получаемой по методу последовательных приближений. Сходимость будет обеспечена, например, если отображение $V(x)$, помимо этого свойства, будет монотонным по некоторому конусу K (см. § 2, гл. 1). Как следует из этого параграфа, если x_1 и x_0 сравнимы по этому конусу K (т.е. $x_1 - x_0 \in K$ или $x_0 - x_1 \in K$), V – монотонное отображение, сжимающее на бесконечности, то последовательность $\{x_n\}$ сходится.

Наконец, рассмотрим еще один общий прием построения специальных алгоритмов минимизации – *метод подстановки*. Часто первые и вторые производные минимизируемой функции можно полностью или частично выразить в терминах самой функции. Поэтому, подставляя вместо отдельных членов $\partial F/\partial x$ и $\partial^2 F/\partial x^2$ значения $F(x)$, гессиан $\partial^2 F/\partial x^2$ иногда можно "сделать" положительно определенным. Тогда, если P – положительно определенная матрица, аппроксимирующая гессиан, то специальный алгоритм минимизации функции $F(x)$ будет выглядеть как

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k P_k q_k,$$

где $q_k = -\partial F(x_k)/\partial x$, $\lambda_k > 0$. Покажем применение этого приема на примере суммы квадратов. Здесь

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} = \Sigma \left[\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha} \right) \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha} \right)^T - (y_i - f_i(\alpha)) \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha^2} \right].$$

Если значение суммы квадратов мало, т.е. $y_i \approx f_i(\alpha)$, то

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \approx \Sigma \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha} \right) \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha} \right)^T = F^T F \quad (1.30)$$

– неотрицательно определенная матрица, $F = \partial f/\partial \alpha$. Как известно, идея аппроксимации (1.30) не нова и составляет содержание метода Ньютона

на–Гаусса, описанного в предыдущей главе. Как уже отмечалось, на практике величины $\partial f_i / \partial \alpha$ иногда можно полностью или частично выразить в терминах $f_i(\alpha)$, которые в свою очередь заменяем на y_i . Новая матрица P аппроксимирует матрицу $F^T F$ и содержит величины y_i . Основное отличие P от $F^T F$ в том, что, во-первых, матрица P , как правило, будет лучше обусловлена, и во-вторых, расчет P и P^{-1} требует меньших затрат, чем $F^T F$ и $(F^T F)^{-1}$ соответственно. Метод подстановки в регрессии иногда приводит к упрощению итераций в методе Ньютона–Гаусса и ускорению процесса счета. Этот метод будет проиллюстрирован в § 3.

Следуя рекомендациям этого параграфа, нетрудно построить метод минимизации суммы p -х степеней отклонений в нелинейной модели регрессии

$$Q_p(\alpha) = \sum_{i=1}^n |y_i - f_i(\alpha)|^p, \quad p \geq 1. \quad (1.31)$$

Действительно, как и в линейном случае, имеет место следующее представление (при $\alpha: y_i \neq f_i(\alpha), i = 1, \dots, n$, если $p < 2$):

$$\begin{aligned} -\frac{1}{p} \frac{\partial Q_p}{\partial \alpha} &= \sum |y_i - f_i(\alpha)|^{p-1} \operatorname{sign}(y_i - f_i(\alpha)) \frac{\partial f_i}{\partial \alpha} = \\ &= \sum (y_i - f_i(\alpha)) \frac{\partial f_i}{\partial \alpha} w_i(\alpha), \end{aligned}$$

где $w_i(\alpha) = |y_i - f_i(\alpha)|^{p-2}$. Поэтому в качестве метода минимизации функции (1.31) можно предложить следующий итеративный метод, обобщающий метод Ньютона–Гаусса:

$$a_{k+1} = a_k + \lambda_k (F_k W_k F_k)^{-1} F_k^T W_k (y - f_k), \quad k = 0, 1, \dots,$$

где W_k – диагональная матрица $n \times n$ с i -м диагональным элементом, равным $|y_i - f_i(a_k)|^{p-2}$, $\lambda_k > 0$ определяет длину шага.

§ 2. Минимизация суммы неквадратических невязок линейной модели

Задача сводится к следующему. Пусть $y_1, y_2, \dots, y_n \in R^1$ – наблюдения; $x_1, x_2, \dots, x_n \in R^m$; X – матрица $n \times m$, вектор-строки которой суть x_i^T , $\operatorname{rang} X = m$, $\psi(e)$ – некая дважды дифференцируемая функция невязки $e \in R^1$. Необходимо решить задачу

$$H(\alpha) = \sum_{i=1}^n \psi(y_i - (\alpha, x_i)) \Rightarrow \min, \quad \alpha \in R^m. \quad (2.1)$$

Понятно, что если $\psi(e)$ – выпуклая функция, то $H(\alpha)$ – тоже выпуклая функция. Однако если $\psi(e)$ квазивыпукла, то $H(\alpha)$, вообще говоря, не будет квазивыпуклой и, в частности, может быть многоэкстремальной. Сначала мы не будем вдаваться в проблемы многоэкстремальности $H(\alpha)$, и предлагаемые ниже специальные алгоритмы минимизации этой функции будут сходиться к локальному минимуму. В конце параграфа будут предложены критерии одноэкстремальности $H(\alpha)$.

В принципе задача (2.1) может и не иметь решения, т.е. нижняя грань $H(\alpha)$ на R^m может не достигаться, однако при разумных ограничениях на функцию невязки решение (2.1) всегда существует. А именно, если $\psi(e)$ строго убывает при $e < 0$ и строго возрастает при $e > 0$ (не теряя общности можно считать $\psi(0) = 0$), то решение задачи (2.1) существует, т.е. нижняя грань $H(\alpha)$ на R^m достигается. Не будем приводить здесь подробного доказательства, ограничимся лишь его схемой.

Можно показать, что для минимизируемой функции $H(\alpha)$ главной асимптотической кривой (см. § 1, гл. 1) будет луч $\alpha_0 + \lambda\nu$, при этом $H(\alpha_0 + \lambda\nu) \rightarrow \bar{H}_E$, $\lambda \rightarrow \infty$, где \bar{H}_E – нижняя грань $H(\alpha)$ на бесконечности. Важно, что эта сходимость имеет место снизу, т.е. существует λ_0 : $H(\alpha_0 + \lambda_0\nu) < \bar{H}_E$. А это по теореме 1.1 из гл. 1 и означает достижимость нижней грани $H(\alpha)$ на R^m .

Перейдем к построению специальных методов минимизации суммы неквадратических невязок (2.1). Найдем градиент и гессиан минимизируемой функции:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \alpha} &= -\sum \psi'(y_i - (\alpha, x_i))x_i, \\ \frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} &= \sum \psi''(y_i - (\alpha, x_i))x_i x_i^T, \end{aligned} \quad (2.2)$$

Для применения метода мажорирующего параболоида (см. § 1) оценим гессиан сверху. Применяя неравенство (2.29) из гл. 3, получим

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} \leq [\sum \psi''(e_i)]^{1/2} A, \quad (2.3)$$

где

$$e_i = y_i - (\alpha, x_i), \quad A = (X^T N X)^{1/2}, \quad N = \text{diag}(X X^T). \quad (2.4)$$

В силу условия полного ранга X матрица A положительно определена. Осталось оценить сверху множитель в (2.3) в терминах $H(\alpha)$. Для этого, очевидно, необходимо сделать определенное предположение о второй производной функции невязки ψ . Мы предположим, что

$$(\psi''(e))^2 \leq T(\psi(e)), \quad e \in R^1, \quad (2.5)$$

где T – неубывающая, неотрицательная вогнутая функция. Тогда по определению (2.5) и в силу вогнутости функции T по неравенству Иенсена

$$\begin{aligned} \sum (\psi''(e_i))^2 &\leq \sum T(\psi(e_i)) = \\ &= n \sum \frac{1}{n} T(\psi(e_i)) \leq n T\left(\frac{1}{n} \sum \psi(e_i)\right) = n T\left(\frac{1}{n} H(\alpha)\right). \end{aligned}$$

Таким образом, окончательно можно утверждать, что для задачи (2.1) в предположении (2.5) имеет место следующая оценка сверху для гессиана минимизируемой функции:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} \leq \sqrt{n} T^{1/2}\left(\frac{1}{n} H(\alpha)\right) A, \quad (2.6)$$

где A задается выражением (2.4). Метод мажорирующего параболоида на основе этой оценки приводит к следующему итеративному алгоритму:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \frac{1}{\sqrt{n}} T^{-1/2} \left(\frac{H(\alpha_k)}{n} \right) A^{-1} X^T s(\alpha_k), \quad (2.7)$$

где $s(\alpha_k)$ — вектор $n \times 1$, $s_i(\alpha_k) = \psi'(y_i - \alpha_k^T x_i)$, $i = 1, \dots, n$. Итерации обладают свойством:

$$H(\alpha_{k+1}) < H(\alpha_k), \quad \frac{\partial H(\alpha_k)}{\partial \alpha} \neq 0$$

и при условии, что $H(\alpha)$ имеет конечное число стационарных точек, по теореме 1.2 из гл. 6 сходятся (остальные условия теоремы, как легко проверить, выполняются).

Рассмотрим теперь частный случай ψ , когда $\psi(e) = |e|^p$; значение α , являющееся решением задачи (2.1), в этом случае называют L_p -оценкой (см. [15, 50, 60]). Условие существования производной второго порядка у ψ ведет к неравенству $p \geq 2$. Этот случай мы сейчас и рассмотрим. Случай $1 < p \leq 2$ был разобран в предыдущем параграфе.

Будем сначала считать, что $2 \leq p \leq 4$. Тогда при непосредственном использовании полученной выше оценки сверху для гессияна функции H будем иметь

$$T(H) = p^2(p-1)^2 H^{\frac{2(p-2)}{p}}.$$

Это возрастающая неотрицательная вогнутая функция ($2 \leq p \leq 4$). Поэтому в этом случае алгоритм минимизации имеет вид:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + n^{\frac{p-4}{2p}} \frac{1}{p-1} H^{\frac{2-p}{p}}(\alpha_k) A^{-1} X^T s(\alpha_k), \quad (2.8)$$

где $s_i(\alpha_k) = \text{sign}(y_i - \alpha_k^T x_i) |y_i - \alpha_k^T x_i|^{p-1}$, $i = 1, \dots, n$.

Оценку сверху для матрицы вторых производных

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} = p(p-1) \Sigma |e_i|^{p-2} x_i x_i^T$$

при $p \geq 2$ можно получить непосредственно на основе матричного неравенства Гёльдера (2.26) из гл. 2. Действительно, полагая $\theta = (p-2)/p$, получим

$$\Sigma |e_i|^{p-2} x_i x_i^T \leq (\Sigma |e_i|^2)^{\frac{p-2}{p}} (\Sigma (x_i x_i^T)^2)^{\frac{2}{p}}. \quad (2.9)$$

Нетрудно видеть, что при $p > 2$

$$(x_i x_i^T)^{\frac{p}{2}} \leq x_i x_i^T \|x_i\|^{p-2},$$

поэтому за оценку сверху можно взять

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} \leq p(p-1)H^{\frac{p-2}{p}}(\alpha)(X^T R X)^{\frac{2}{p}}, \quad (2.10)$$

где R – диагональная матрица, $R_{ii} = \|x_i\|^{p-2}$, $i = 1, \dots, m$. На основе этой оценки специальный алгоритм минимизации будет выглядеть следующим образом:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \frac{1}{p-1} H^{\frac{2-p}{p}}(\alpha_k) B^{-1} X^T s(\alpha_k),$$

где $s(\alpha_k)$ – вектор $n \times 1$, $s_i(\alpha_k) = |y_i - \alpha_k^T x_i|^{p-1} \text{sign}(y_i - \alpha_k^T x_i)$, $B = (X^T R X)^{2/p}$.

Метод (2.7) опирается на идею мажорирующего параболоида, который в свою очередь строится на основе оценки сверху для матрицы вторых производных функции (2.1). В некоторых случаях мажорирующий параболоид можно построить из двух соображений, в частности, опираясь на метод расщепления (§ 1). Допустим, $\psi(0) = \psi'(0) = 0$, $\psi''(0) > 0$, пусть $\alpha_k - k$ -е приближение. Перепишем систему

$$\sum \psi'(y_i - \alpha^T x_i) x_i = 0$$

как

$$\sum (y_i - \alpha^T x_i) x_i \frac{\psi'(y_i - \alpha^T x_i)}{y_i - \alpha^T x_i} = 0,$$

где под $\psi'(0)/0$ здесь и далее понимаем $\psi''(0)$. Вводя очевидным образом функцию расщепления, приходим к итерациям

$$\alpha_{k+1} = (X^T W(\alpha_k) X)^{-1} X^T W(\alpha_k) y, \quad (2.11)$$

где

$$W_{ii}(\alpha_k) = \frac{\psi'(y_i - \alpha_k^T x_i)}{y_i - \alpha_k^T x_i} > 0.$$

По определению (2.11)

$$\min_{\alpha} \sum (y_i - \alpha^T x_i)^2 \frac{\psi'(y_i - \alpha^T x_i)}{y_i - \alpha^T x_i} = \sum (y_i - \alpha_{k+1}^T x_i)^2 \frac{\psi'(y_i - \alpha_k^T x_i)}{y_i - \alpha_k^T x_i}.$$

Поэтому в качестве аппроксимирующего параболоида в задаче (2.1) можно взять

$$\begin{aligned} P(\alpha; \alpha_k) &= \frac{1}{2} \sum (y_i - \alpha^T x_i)^2 \frac{\psi'(y_i - \alpha_k^T x_i)}{y_i - \alpha_k^T x_i} + \\ &+ \sum \psi(y_i - \alpha_k^T x_i) - \frac{1}{2} \sum (y_i - \alpha_k^T x_i) \psi'(y_i - \alpha_k^T x_i) = \\ &= \sum \left[e_i^2 \frac{\psi'(e_{ki})}{2e_{ki}} + \psi(e_{ki}) - \frac{1}{2} e_{ki} \psi'(e_{ki}) \right], \end{aligned} \quad (2.12)$$

где для краткости обозначено

$$e_i = y_i - \alpha^T x_i, \quad e_{ki} = y_i - \alpha_k^T x_i.$$

Найдем условия, при которых параболоид (2.12), найденный из идеи расщепления, является мажорирующим для функции $H(\alpha)$. Во-первых, нетрудно видеть, что

$$P(\alpha_k; \alpha_k) = H(\alpha_k), \quad \frac{\partial P(\alpha_k; \alpha_k)}{\partial \alpha} = \frac{\partial H(\alpha_k)}{\partial \alpha},$$

т.е. параболоид является соприкасающимся. Относительно функции $\psi(e)$, следуя [35], предположим, что

$$\begin{aligned} \psi(e) &= \psi(-e), \\ \psi'(e)/e &\text{ — невозрастающая функция при } e \geq 0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

Докажем, что в этих условиях параболоид является мажорирующим. Для этого воспользуемся следующим элементарным результатом: если $T(e)$ — функция действительного переменного, причем $T(e) = T(-e)$, $T(e_0) = T'(e_0) = 0$, $T'(e) \geq 0$ при $e \geq e_0 \geq 0$ и $T'(e) \leq 0$ при $0 \leq e \leq e_0$, то $T(e) \geq 0$. Докажем теперь, что каждый i -й член суммы параболоида (2.12) не меньше i -го члена суммы минимизируемой функции $H(\alpha)$. Прделаем очевидные переобозначения; тогда достаточно показать, что разность i -х членов

$$T(e) = e^2 \frac{\psi'(e_0)}{2e_0} + \psi(e_0) - \frac{e_0 \psi'(e_0)}{2} - \psi(e)$$

как функция e удовлетворяет приведенным выше условиям. Равенство $T(e_0) = T'(e_0) = 0$ проверяется непосредственным образом (не теряя общности можно считать $e_0 > 0$). Далее, очевидно,

$$T'(e) = e \left(\frac{\psi'(e_0)}{e_0} - \frac{\psi'(e)}{e} \right).$$

Поэтому, если $e \geq e_0$, то $T'(e) \geq 0$ из условия (2.13). Если $0 < e \leq e_0$, то $T'(e) \leq 0$. Таким образом, $T(e) \geq 0$, а значит, параболоид (2.12) является для $H(\alpha)$ мажорирующим. На основании теоремы 1.2 из гл. 6 утверждаем, что итерации (2.11) сходятся к стационарной точке $H(\alpha)$ в смысле теоремы 1.2, причем

$$H(\alpha_{k+1}) < H(\alpha_k), \quad \frac{\partial H(\alpha_k)}{\partial \alpha} \neq 0.$$

Использование неквадратичной функции потерь связано с идеей робастности в статистике — построения более надежных методов оценивания. Дело в том, что минимизация квадратичных потерь со статистической точки зрения оптимальна в условиях нормального распределения случайных помех. В том случае, когда помехи загрязнены, в частности, их распределение имеет более "тяжелые хвосты", оценки, построенные на основе минимума суммы квадратов, оказываются чересчур чувствительными к выбросам. На языке функции $\psi(e)$ для получения робастных оценок в

регрессии эта функция при $|e| \rightarrow \infty$ должна иметь меньшую скорость роста, чем квадратичная (т.е. бóльшие отклонения $|e|$ должны входить в минимизируемую сумму с меньшим весом, чем e^2). Была предложена масса подобных функций (значения, доставляющие $H(\alpha)$ минимум, в статистике называют M -оценками) [1, 50, 47]. Одна из первых – функция Хьюбера [50]; в окрестности $e = 0$ она квадратична, далее гладко переходит в линейную; она задается как (параметр $c > 0$ известен и фиксирован)

$$\psi_H(e) = \begin{cases} e^2, & |e| \leq c, \\ 2c|e| - c^2, & |e| > c. \end{cases} \quad (2.14)$$

Легко видеть, что функция Хьюбера удовлетворяет свойствам (2.13), поэтому итерации (2.11) сходятся. Функция (2.14) выпукла, таковой же будет и минимизируемая функция $H(\alpha)$. В качестве альтернативы к (2.14) можно рассмотреть весовую функцию

$$\psi(e) = \frac{e^2}{|e| + c}.$$

Она, как и функция $\psi_H(e)$, выпукла, причем в окрестности $e = 0$ она эквивалентна квадратичной, а на хвостах – линейной.

У весовых функций с более сильным фильтром засорения имеются горизонтальные асимптоты. Наиболее распространенные функции такого рода – это функция Андруса

$$\psi_A(e) = \begin{cases} c(1 - \cos(e/c)), & |e| \leq \pi c, \\ 2c, & |e| > \pi c, \end{cases}$$

функция Рамсея

$$\psi_R(e) = \frac{1}{\gamma^2} [1 - (1 + \gamma|e|)\exp(-\gamma|e|)], \quad \gamma > 0,$$

и функция Мешалкина

$$\psi_M(e) = \frac{1}{\lambda} \left(1 - \exp\left(-\frac{\lambda e^2}{2}\right) \right), \quad \lambda > 0.$$

Указанные весовые функции обладают одной характерной особенностью. Вблизи $e = 0$ они эквивалентны квадратичной функции, далее скорость роста падает и в пределе равна нулю. В этом классе функций, по-видимому, наиболее простой будет функция вида

$$\psi_D(e) = \frac{e^2}{e^2 + c}, \quad c > 0, \quad (2.15)$$

которая и будет исследована ниже. Все эти функции обладают свойствами (2.13), поэтому итерации (2.11) для них сходятся. Основная проблема использования весовых функций с горизонтальными асимптотами – возможность многоэкстремальности. Задача, таким образом, состоит в построении критериев того, что найденная стационарная точка $H(\alpha)$ является точкой

глобального минимума. Эта задача будет решаться на основе идей, развитых в гл. 3 и 4. Тем самым будет показано, как предложенный в этих главах подход распространить и на случай функций, не совпадающих с суммой квадратов.

Построим "критерий глобальности" для весовой функции $\psi_D(\dot{e})$. Представляется, что аналогичным образом можно построить соответствующие критерии и для функций ψ_A , ψ_R и ψ_M .

Прежде всего установим неравенства, связывающие значение минимизируемой функции $H(\alpha)$ с весовой функцией $\psi_D(e)$ с соответствующим значением суммы квадратов $Q(\alpha) = \sum e_i^2(\alpha)$, где $e_i(\alpha) = y_i - \alpha^T x_i$. А именно, покажем, что для любых $e_1, e_2, \dots, e_n \in R^1$ имеют место следующие неравенства:

$$\frac{\sum e_i^2}{\sum e_i^2 + c} \leq \sum \frac{e_i^2}{e_i^2 + c} \leq \frac{\sum e_i^2}{\sum e_i^2/n + c}.$$

Левое неравенство доказывается относительно просто. Обозначим $\varphi = \sum e_i^2$. Тогда $e_i^2 \leq \varphi$, значит

$$\sum \frac{e_i^2}{e_i^2 + c} \geq \sum \frac{e_i^2}{\varphi + c} = \frac{\varphi}{\varphi + c} = \frac{\sum e_i^2}{\sum e_i^2 + c}.$$

Правое неравенство докажем оптимизационным методом (см. § 2, гл. 3). Для простоты обозначим $e_i^2 = u_i \geq 0$. Оценим сверху величину $\sum u_i / (u_i + c)$ в терминах $\sum u_i$. Введем соответствующую функцию Лагранжа

$$L(u_1, \dots, u_n; \lambda) = \sum \frac{u_i}{u_i + c} - \lambda(\sum u_i - \varphi).$$

Тогда

$$\frac{\partial L}{\partial u_i} = \frac{c}{(u_i + c)^2} - \lambda = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

откуда следует, что $u_i = \text{const} = r$. Но $\sum u_i = rn = \varphi$, откуда $r = \varphi/n$, а значит, $u_i = \varphi/n$. Таким образом, экстремальное значение интересующей нас величины $\sum u_i / (u_i + c)$ достигается при $u_i = \varphi/n$ и равно

$$\frac{\varphi}{\varphi/n + c} = \frac{\sum u_i}{\sum u_i/n + c}.$$

Осталось показать, что найденный экстремум функции отвечает глобальному максимуму. Это следует из вогнутости L по u_1, \dots, u_n , так как

$$\partial^2 L / \partial u_i^2 = -3c / (u_i + c)^3 < 0, \quad i = 1, \dots, n^1).$$

Доказанные неравенства связывают значение минимизируемой функции $H(\alpha)$ с весовой функцией (2.15) с квадратичной:

$$\frac{Q(\alpha)}{Q(\alpha) + c} \leq H(\alpha) \leq \frac{Q(\alpha)}{Q(\alpha)/n + c}. \quad (2.16)$$

¹⁾ Заметим, что доказанное неравенство можно было бы доказать стандартными средствами на основе неравенства $\sum u_i^{-1} > n^2 (\sum u_i)^{-1}$, $u_i > 0$.

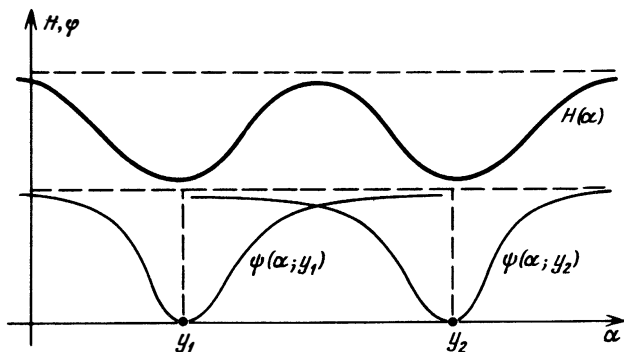


Рис. 24. Возможная многоэкстремальность $H(\alpha)$ при $n = 2$

Эти неравенства существенно будут использоваться нами при построении критериев глобальности $H(\alpha)$.

Итак, приступим к построению критериев проверки того, что найденная стационарная точка $H(\alpha)$ с весовой функцией (2.15) является точкой глобального минимума. Для иллюстрации возможной многоэкстремальности $H(\alpha)$ в условиях наличия у весовой функции $\psi(e)$ горизонтальных асимптот рассмотрим самый простой случай $n = 2$, $m = 1$, $x_i = 1$. Тогда $H(\alpha) = \psi(y_1 - \alpha) + \psi(y_2 - \alpha)$. Если y_1 и y_2 достаточно удалены друг от друга, то функция $H(\alpha)$ может иметь два локальных минимума (рис. 24).

Построение критериев глобальности начнем с исследования функции (2.15) и ее производных:

$$\psi'_D(e) = \frac{2ec}{(e^2 + c)^2}, \quad \psi''_D(e) = \frac{2c(c - 3e^2)}{(e^2 + c)^3}.$$

Исследуем функцию $\psi''_D(e)$: имеем $\psi''_D(0) = 2/c$, $\psi''_D(\pm\sqrt{c/3}) = 0$, $\psi''_D(e) \rightarrow 0$ при $|e| \rightarrow \infty$. Минимум $\psi''_D(e)$ достигается в точке $\pm\sqrt{c}$ и равен $-1/2c$. Аппроксимируем $\psi''_D(e)$ на интервале $[0, \infty)$ снизу линейной функцией. Оптимальным решением будет прямая, проходящая через точку $(0, 2/c)$ и касающаяся $\psi''_D(e)$ в другой точке (рис. 25). Найдем точку касания, обозначим ее e_* . Она, очевидно, удовлетворяет уравнению

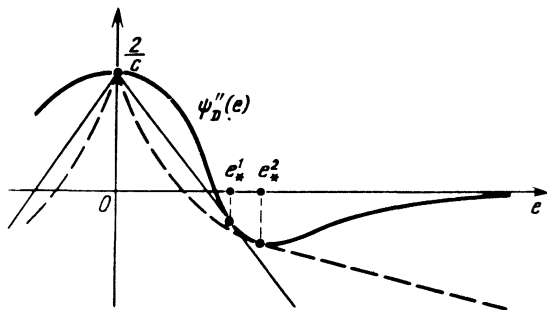
$$-\psi'''_D(e) = \frac{2/c - \psi''_D(e)}{e},$$

которое после очевидных преобразований сводится к кубическому относительно $u = e^2/c$:

$$u^3 + 4u^2 + 21u - 6 = 0. \quad (2.17)$$

Можно показать, что это уравнение на $(0, +\infty)$ имеет единственный корень, который обозначим через u_*^1 ($e_*^1 = \sqrt{cu_*^1}$, приблизительно $u_*^1 = 0,2708$). Угловым коэффициентом аппроксимирующей прямой равен

$$24 \frac{\sqrt{u_*^1}(1 - u_*^1)}{c^{3/2}(1 + u_*^1)^4} = D \approx 3,49c^{-\frac{3}{2}}. \quad (2.18)$$



— — линейная аппроксимация,
 --- — аппроксимация «квадратный корень»

Рис. 25. Аппроксимация снизу функции $\psi_D''(e)$

Таким образом, получаем следующую оценку:

$$\psi_D''(e) = \frac{2c(c - 3e^2)}{(e^2 + c)^2} \geq \frac{2}{c} - D|e|.$$

где D рассчитывается по формуле (2.18). На основе этой оценки снизу и формулы (2.2) может быть построена оценка снизу для гессиана функции (2.1):

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} \geq \Sigma \left(\frac{2}{c} - D|e_i| \right) x_i x_i^T = \frac{2}{c} X^T X - D \Sigma |e_i| x_i x_i^T.$$

Вспользуемся теперь неравенством (2.29), гл.3; получим

$$\Sigma |e_i| x_i x_i^T \leq (\Sigma e_i^2)^{1/2} A,$$

где A — матрица $m \times m$, рассчитываемая по формуле (2.4), $e_i = y_i - \alpha^T x_i$. Таким образом, окончательно приходим к следующей оценке:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} \geq \frac{2}{c} X^T X - D \cdot Q^{1/2}(\alpha) A. \quad (2.19)$$

Отсюда можно утверждать, что на множестве

$$S_1 = \{ \alpha \in R^m: \Sigma (y_i - \alpha^T x_i)^2 < \tau_1 \}, \quad (2.20)$$

где

$$\tau_1 = \frac{4}{(Dc)^2} \lambda_{\min}^2(X^T X A^{-1}) \approx 0,328 c \lambda_{\min}^2(X^T X A^{-1}), \quad (2.21)$$

гессиан минимизируемой функции положительно определен. Но множество (2.20) выпукло, а именно, есть эллипсоид в R^m , поэтому на S_1 функция $H(\alpha)$ одноэкстремальна. Для окончательной формулировки критерия глобальности обратимся к ранее доказанному неравенству (2.16); здесь нам потребуется левое неравенство (2.16).

Рассуждаем следующим образом. Пусть α_* – найденная стационарная точка функции $H(\alpha)$, допустим, $\alpha_* \in S_1$. В силу доказанной строгой выпуклости $H(\alpha)$ на S_1 имеем $H(\alpha_*) < H(\alpha)$, $\alpha \in S_1$, $\alpha \neq \alpha_*$. Допустим $\alpha \in S_1$, тогда по определению $Q(\alpha) \geq \tau_1$, и значит, по (2.16)

$$H(\alpha) \geq \frac{\tau_1}{\tau_1 + c}.$$

Отсюда следует

Теорема 2.1 (критерий глобальности I). Пусть α_* – стационарная точка минимизируемой функции (2.1) с весовой функцией (2.15). Тогда, если

$$H(\alpha_*) < \frac{\tau_1}{\tau_1 + c},$$

где τ_1 задается формулой (2.21), то α_* – точка единственного глобального минимума.

З а м е ч а н и е. Очевидно, польза от этого критерия будет тогда, когда множество S_1 непусто. А это в свою очередь будет верно, если $Q_{\min} < \tau_1$, где Q_{\min} – минимальное значение суммы квадратов (сумма квадратов, отвечающая оценке МНК). Таким образом, для работоспособности критерия необходимо, чтобы засорение было не очень велико.

Как следует из доказанного в начале параграфа неравенства, $X^T X A^{-1} \leq \leq \sqrt{n} I$, поэтому оценкой сверху для τ_1 будет $4n(Dc)^{-2}$.

Аналогичным образом можно строить другие критерии глобальности суммы невязок с весовой функцией (2.15). Например, можно оценить $\psi_D''(e)$ снизу функцией $2/c - R |e|^{1/2}$ ("квадратный корень"), здесь $R > 0$ выбирается из условия $2/c - R |e|^{1/2} \leq \psi_D''(e)$ (см. рис. 25). Оптимальный выбор R – тот, когда функции касаются. В такой аппроксимации контрольным значением будет сумма модулей невязок $Q_1(\alpha) = \sum |e_i|$.

Для построения соответствующего критерия нам потребуется неравенство, аналогичное (2.16):

$$\frac{Q_1^2(\alpha)}{c + Q_1^2(\alpha)} \leq H(\alpha) \leq \frac{nQ_1^2(\alpha)}{Q_1^2(\alpha) + cn^2}. \quad (2.22)$$

Оно следует из неравенства

$$\frac{\varphi^2}{c + \varphi^2} \leq \sum \frac{e_i^2}{e_i^2 + c} \leq \frac{n\varphi^2}{\varphi^2 + cn^2},$$

где $\varphi = \sum |e_i|$. Последнее неравенство доказывается аналогично (2.16).

Найдем теперь оптимальное значение R . Как было указано, его можно найти из условия

$$\frac{2}{c} - R\sqrt{e} = \psi_D''(e), \quad -\frac{R}{2\sqrt{e}} = \psi_D'''(e), \quad e > 0,$$

что сводится к кубическому уравнению

$$u^3 + 4u^2 + 33u - 18 = 0,$$

где, как и раньше, обозначено $u = e^2/c$. Пусть u_*^2 – решение этого уравнения

(с точностью до трех знаков $u_*^2 = 0,510$). Значение R находим как

$$R = 2e_*^{3/2} c^{-1} \frac{5c + e_*^2}{(c + e_*^2)^2} \approx 2,917c^{-3/2},$$

где $e_* = \sqrt{u_*^2 c}$. Далее рассуждаем, как прежде: строим оценку снизу для гессиана

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 H}{\partial \alpha^2} &\geq \Sigma \left(\frac{2}{c} - R \sqrt{|e_i|} \right) x_i x_i^T = \\ &= \frac{2}{c} X^T X - R \Sigma |e_i|^{1/2} x_i x_i^T \geq \frac{2}{c} X^T X - R Q_1^{1/2}(\alpha) A. \end{aligned}$$

Поэтому можно утверждать, что на множестве

$$S_2 = \{ \alpha \in R^m: \Sigma |y_i - \alpha^T x_i| < \tau_2 \},$$

где

$$\tau_2 = \frac{4}{(Rc)^2} \lambda_{\min}^2(X^T X A^{-1}) \approx 0,47c \lambda_{\min}^2(X^T X A^{-1}), \quad (2.23)$$

гессиан минимизируемой функции положительно определен. Но функция $Q_1(\alpha)$ выпукла, поэтому выпукло любое множество уровня $\{ Q_1(\alpha) < Q_* \}$. С учетом неравенства (2.2) окончательно критерий глобальности может быть сформулирован следующим образом.

Теорема 2.2 (критерий глобальности II). Пусть α_* – стационарная точка минимизируемой функции (2.1) с весовой функцией (2.15). Тогда, если

$$H(\alpha_*) < \frac{\tau_2^2}{c + \tau_2^2},$$

где τ_2 задается формулой (2.23), то α_* – точка единственного глобального минимума.

Существует другой путь построения критериев глобальности для суммы неквадратических невязок. Найдем область выпуклости функции $H(\alpha)$ в виде множества уровня. Для этого необходимо оценить снизу гессиан $H(\alpha)$ в терминах значений самой функции. Оценим $\psi_D''(e)$ снизу функцией

$$\frac{2}{c} - \frac{T|e|}{\sqrt{e^2 + c}},$$

где $T > 0$ выберем оптимальным образом, т.е. так, чтобы аппроксимирующая функция прошла не выше $\psi_D''(e)$, в то же время касаясь ее. Нетрудно показать, что точкой касания будет e_* , которая определяется из квадратного уравнения

$$u^2 + 15u - 6 = 0, \quad u = e^2/c.$$

Отсюда

$$e_*^2 = c \frac{\sqrt{249} - 15}{2} \approx 0,039c,$$

$$T = -\psi_D'''(e_*) = 24e_* c \frac{c - e_*^2}{(e_*^2 + c)^4} \approx 3,9c^{-3/2}.$$

Таким образом, можно утверждать, что на множестве уровня

$$S_3 = \{\alpha \in R^m: H(\alpha) < H_{LC}\},$$

где

$$H_{LC} = \frac{4}{(Tc)^2} \lambda_{\min}^2(X^T X A^{-1}) \approx 0,263c \lambda_{\min}^2(X^T X A^{-1}),$$

гессиан $H(\alpha)$ положительно определен. Тогда на основе оценки (2.16) и (2.22) и результатов § 4, гл. 4 можно предложить еще один критерий глобальности.

Теорема 2.3 (критерий глобальности III). Пусть α_* – стационарная точка минимизируемой функции (2.1) с весовой функцией (2.15). Тогда, если

$$H(\alpha_*) < \frac{n^2 H_{LC}}{(n^2 - 1)H_{LC} + n},$$

то α_* – точки глобального минимума.

Доказательство основано на применении теоремы 4.3 из гл. 4. Если за основу взять сумму квадратов $Q(\alpha)$, то, как следует из неравенства (2.16),

$$g_1(Q(\alpha)) \leq H(\alpha) \leq g_2(Q(\alpha)),$$

где

$$g_1(\xi) = \frac{\xi}{\xi + c}, \quad g_2(\xi) = \frac{\xi}{\xi/n + c}, \quad \xi \geq 0,$$

– возрастающие функции. Тогда применяя теорему 4.3 из гл. 4, получаем, что если

$$H(\alpha_*) \leq \frac{nH_{LC}}{(n-1)H_{LC} + n}, \quad (2.24)$$

то α_* – точка глобального минимума. Аналогично за основу можно взять сумму модулей невязок $Q_1(\alpha)$. Тогда из неравенства (2.22) будем иметь

$$s_1(Q_1(\alpha)) \leq H(\alpha) \leq s_2(Q_1(\alpha)),$$

где

$$s_1(\xi) = \frac{\xi^2}{\xi^2 + c}, \quad s_2(\xi) = \frac{n\xi^2}{cn^2 + \xi^2}, \quad \xi \geq 0,$$

– возрастающие функции. Тогда на основе той же теоремы утверждаем, что если

$$H(\alpha_*) < \frac{n^2 H_{LC}}{(n^2 - 1)H_{LC} + n}, \quad (2.25)$$

то α_* – точка глобального минимума. Заметим теперь, что можно считать $H_{LC} < n$, поскольку $H(\alpha) < n$. При этом условии элементарно показывается, что правая часть (2.25) больше правой части (2.24), т.е. критерий (2.25) сильнее. Теорема доказана.

§ 3. Другие примеры нелинейных регрессий

Начнем с наиболее простых квазилинейных регрессий (см. § 3, гл. 1 и § 3, гл. 3). В частности, рассмотрим класс логлинейных регрессий (§ 3, гл. 3), функция которых есть

$$f_i(\alpha) = \exp(\alpha^T x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Образуем из векторов x_1, \dots, x_n матрицу X порядка $n \times m$ (в дальнейшем предполагаем $\text{rank } X = m$). Требуется построить специальные методы минимизации суммы квадратов

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^n (y_i - e^{\alpha^T x_i})^2. \quad (3.1)$$

Выпишем еще раз первые и вторые производные этой функции

$$\begin{aligned} F &= \frac{\partial f}{\partial \alpha} = EX, & q &= -\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha} = X^T E(y - f), \\ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} &= X^T DX, \end{aligned} \quad (3.2)$$

где E и D – диагональные матрицы $n \times n$ с ii -м элементом $f_i = \exp(\alpha^T x_i)$ и $\exp(\alpha^T x_i) (2 \exp(\alpha^T x_i) - y_i)$ соответственно. В методе Ньютона – Гаусса матрицей, аппроксимирующей $1/2$ гессиана, будет

$$P_1 = F^T F = X^T E^2 X \approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2}. \quad (3.3)$$

Построим другое направление минимизации (3.1), отличное от направления в методе Ньютона – Гаусса, используя идею подстановки. Допустим, в логлинейной модели $y_i > 0$. Тогда вместо $\exp(\alpha^T x_i)$ в E_{ii} подставим y_i , т.е. одну матрицу E в (3.3) заменяем на Y :

$$P_2 = X^T E Y X \approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2}, \quad (3.4)$$

где Y – диагональная матрица $n \times n$ с ii -м элементом, равным y_i . При этом, очевидно, правая часть (3.4) есть положительно определенная матрица. Наконец, E^2 можно заменить на Y^2 . Тогда аппроксимирующая матрица будет иметь вид

$$P_3 = X^T Y^2 X \approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2}. \quad (3.5)$$

Эта аппроксимация характерна тем, что здесь не надо обращать матрицу на каждой итерации, достаточно это сделать в начале процесса. В этом смысле итеративный процесс, основанный на (3.5), является наиболее экономным (особенно в случае большой размерности искомого вектора α).

Специальные методы минимизации (3.1), основанные на приведенных выше аппроксимациях гессиана минимизируемой функции, будут выглядеть следующим образом:

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \lambda_k P_l^{-1}(\alpha_k) q(\alpha_k),$$

где P_l — одна из аппроксимаций (3.3), (3.4) или (3.5), $\lambda_k > 0$ определяет длину шага, его можно определить, например, по правилу (1.6), гл. 6, $l = 1, 2, 3$.

Теперь построим специальный метод, использующий идею мажорирующего параболоида. Для этого необходимо найти оценку сверху для матрицы вторых производных функции (3.1) в терминах значений самой функции. В § 3, гл. 3 была построена оценка снизу для гессиана. Теперь нам нужна оценка сверху. Воспользуемся той же методикой. Понятно, что для всех $\alpha \in R^m$ построить оценку сверху для гессиана (3.2) нельзя. Будем строить эту оценку на множестве некоторого уровня Q^* , т.е. на множестве

$$S(Q^*) = \{ \alpha \in R^m : Q(\alpha) \leq Q^* \}.$$

Очевидно, для логлинейной регрессии

$$S(Q^*) \subset \{ \alpha : |y_i - e^{\alpha^T x_i}| \leq \sqrt{Q^*}, \quad i = 1, \dots, n \}.$$

Поэтому для всех $\alpha : Q(\alpha) < Q^*$ имеем

$$D_{ii} = e^{\alpha^T x_i} (2e^{\alpha^T x_i} - y_i) \leq (y_i + \sqrt{Q^*})(y_i + 2\sqrt{Q^*}), \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.6)$$

Пусть для простоты $y_i > 0$, обозначим через $Z = Z(Q^*)$ — диагональную матрицу $n \times n$ с ii -м элементом, равным правой части неравенства (3.6). Тогда в силу (3.6) на множестве $S(Q^*)$ верна следующая оценка сверху для матрицы (3.2):

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \leq X^T Z X = A. \quad (3.7)$$

Из § 1 следует, что итерации

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + (X^T Z(Q_k) X)^{-1} q_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (3.8)$$

при $y_i > 0$ обладают свойством понижения значения минимизируемой функции в нестационарных точках:

$$Q(\alpha_{k+1}) < Q(\alpha_k), \quad q_k \neq 0.$$

На основании результатов § 1, гл. 6 и § 1 гл. 1 можно далее утверждать, что если α_0 выбрано так, что $Q(\alpha_0) < \bar{Q}_E$ (в § 3, гл. 1 было показано, что если $y_i > 0$, то в логлинейной модели такое α_0 всегда существует), то процесс (3.8) в определенном смысле сходится к одному из локальных минимумов суммы квадратов (3.1).

Оценка (3.7) довольно груба. Пользуясь методом, аналогичным § 3, гл. 3, можно построить более точные оценки сверху для (3.2). Рассмотрим для этого выражение (3.18), гл. 3. Следующие оценки очевидны:

$$\sum e_i y_i x_i x_i^T \leq Q^{1/2} B^{1/2}, \quad \sum e_i^2 x_i x_i^T \leq Q M I,$$

где $M = \max \|x_i\|^2$ — матрица B задается формулой (3.21), гл. 3. Тогда, пользуясь обозначениями § 3, гл. 3, заключаем, что

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} \leq A + 3\sqrt{Q} B^{1/2} + 2MQI. \quad (3.9)$$

Как и ранее, на основе оценки (3.9) можно построить сходящийся строго релаксационный алгоритм минимизации (3.1):

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + (A + 3\sqrt{Q_k}B^{1/2} + 2MQ_kI)^{-1}q_k. \quad (3.10)$$

Построим теперь специальный метод минимизации (3.1), основанный на методе расщепления. Выпишем градиент суммы квадратов (3.1) в координатной форме

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha_i} = \Sigma (y_i - e^{\alpha^T x_i}) x_i e^{\alpha^T x_i}. \quad (3.11)$$

Будем считать $y_i > 0$. Для того чтобы выделить линейную часть в (3.11), заметим, что член $y_i - e^{\alpha^T x_i}$ представим в виде

$$(\ln y_i - \alpha^T x_i) \frac{y_i - e^{\alpha^T x_i}}{\ln y_i - \alpha^T x_i}, \quad \ln y_i \neq \alpha^T x_i.$$

На основании этого замечания функцию расщепления (см. § 1) можно записать в виде

$$R(u; v) = \Sigma (\ln y_i - u^T x_i) x_i \frac{y_i - e^{v^T x_i}}{\ln y_i - v^T x_i} e^{v^T x_i}. \quad (3.12)$$

Очевидно $R(\alpha; \alpha) = -\partial Q/2\partial \alpha$. При $y_i = \exp(v^T x_i)$ для сохранения непрерывности полагаем

$$\frac{y_i - e^{v^T x_i}}{\ln y_i - v^T x_i} = \lim_{z \rightarrow \ln y_i} \frac{e^{\ln y_i} - e^z}{\ln y_i - z} = (e^z)' \Big|_{z = \ln y_i} = y_i.$$

Таким образом, функция расщепления непрерывна по u и v . Главное, что при фиксированном v система $R(u; v) = 0$ является линейной по u .

Итак, пусть α_k — значение вектора параметров, полученное на k -й итерации. Обозначим

$$W_i(\alpha_k) = e^{\alpha_k^T x_i} \times \begin{cases} \frac{y_i - e^{\alpha_k^T x_i}}{\ln y_i - \alpha_k^T x_i}, & \ln y_i \neq \alpha_k^T x_i, \\ y_i, & \ln y_i = \alpha_k^T x_i. \end{cases} \quad (3.13)$$

Тогда с учетом (3.12) систему $\partial Q/\partial \alpha = 0$ сведем к системе линейных уравнений

$$\Sigma x_i (\ln y_i - \alpha^T x_i) W_i(\alpha_k) = 0,$$

откуда находим следующее значение вектора параметров:

$$\alpha_{k+1} = (X^T W_k X)^{-1} X^T W_k l, \quad (3.14)$$

где W_k — диагональная матрица с ii -м элементом, равным (3.13), l — вектор $n \times 1$, $l_i = \ln y_i$.

Рассмотрим еще один класс нелинейных регрессий: *дробно-линейные регрессии* с функцией $f_i(\theta) = (\alpha, x_i)/(\beta, z_i)$. Очевидно, в этом случае параметры α и β можно определить лишь с точностью до коэффициента пропорциональности, поэтому, разделив на подходящее значение числитель

и знаменатель функции регрессии, приведем к виду

$$f_i(\theta) = \frac{\alpha^T x_i}{1 + \beta^T z_i}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.15)$$

который и будем в дальнейшем исследовать. Здесь $\alpha, x_i \in R^{m_1}, \beta, z_i \in R^{m_2}, m = m_1 + m_2, \theta^T = (\alpha^T, \beta^T)$; все векторы – вектор-столбцы. В целях корректного определения (3.15) считаем $\beta^T z_i \neq -1$. Более определенно, будем считать, что априорное множество параметров θ есть $\Lambda = R^{m_1} \times \Lambda_\beta$, где $\Lambda_\beta = \{ \beta \in R^{m_2} : \beta^T z_i > 0, i = 1, \dots, n \}$ – конус в R^{m_2} . Для того чтобы $\Lambda \neq \emptyset$, предположим, что векторы z_1, \dots, z_n однонаправлены (см. § 2, гл. 1). Построим для минимизации соответствующей суммы квадратов

$$Q(\alpha, \beta) = \sum \left(y_i - \frac{\alpha^T x_i}{1 + \beta^T z_i} \right)^2 \quad (3.16)$$

специальные методы. Найдем прежде всего первые и вторые производные для регрессии (3.15). Имеем (обозначим $b_i = (1 + (\beta, z_i))^{-1}, i = 1, \dots, n$):

$$\frac{\partial f_i}{\partial \theta} = \begin{bmatrix} b_i x_i \\ -b_i^2 \alpha^T x_i z_i \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial^2 f_i}{\partial \theta^2} = \begin{bmatrix} 0 & b_i^2 x_i z_i^T \\ -b_i^2 z_i x_i^T & 2b_i^3 \alpha^T x_i z_i z_i^T \end{bmatrix}.$$

Найдем гессиан функции (3.16):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \theta^2} = \\ & = \sum_i \begin{bmatrix} b_i^2 x_i x_i^T & (y_i b_i^2 - 2(\alpha, x_i) b_i^3) x_i z_i^T \\ (y_i b_i^2 - 2(\alpha, x_i) b_i^3) z_i x_i^T & (3(\alpha, x_i)^2 b_i^4 - 2y_i \alpha^T x_i b_i^3) z_i z_i^T \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Начнем с метода подстановки. В методе Ньютона – Гаусса для модели (3.15)

$$F^T F = \sum_i \begin{bmatrix} b_i^2 x_i x_i^T & -b_i^3 (\alpha, x_i) x_i z_i^T \\ -b_i^3 (\alpha, x_i) z_i x_i^T & b_i^4 (\alpha, x_i)^2 z_i z_i^T \end{bmatrix}.$$

Заменим в этой матрице $(\alpha, x_i) b_i$ на y_i . Обозначим

$$P = \sum \begin{bmatrix} b_i^2 x_i x_i^T & -y_i b_i^2 x_i z_i^T \\ -y_i b_i^2 z_i x_i^T & y_i^2 b_i^2 z_i z_i^T \end{bmatrix} = \sum b_i^2 P_i, \quad (3.18)$$

где

$$P_i = \begin{bmatrix} x_i x_i^T & -y_i x_i z_i^T \\ -y_i z_i x_i^T & y_i^2 z_i z_i^T \end{bmatrix}. \quad (3.19)$$

В матричном виде (3.18) может быть записано как

$$P = [X; -YZ]^T B^2 [X; -YZ], \quad (3.20)$$

где X и Z – матрицы $n \times m_1$ и $n \times m_2$ соответственно, их строки суть $\{x_i^T\}$ и $\{z_i^T\}$; Y, B – диагональные матрицы $n \times n$; $Y_{ii} = y_i$; $B_{ii} = b_i, i =$

$= 1, \dots, n$. Матрица P , как видно из (3.20), неотрицательно определена. Если матрица $[X; -YZ]$ является матрицей полного ранга, то P будет и положительно определенной. Итак, специальный метод минимизации (3.16) на основе аппроксимационной матрицы (3.20) будет выглядеть следующим образом:

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \lambda_k [[X; -YZ]^T B_k^2 [X; -YZ]]^{-1} \times \\ \times \begin{bmatrix} X^T B_k (y - f(\theta_k)) \\ -Z^T \Phi_k B_k (y - f(\theta_k)) \end{bmatrix}, \quad (3.21)$$

где $\lambda_k > 0$ определяет длину шага, Φ_k — диагональная матрица $(\Phi_k)_{ii} = f_i(\theta_k)$; $y, f(\theta_k) \in R^n$.

В (3.21) можно обойтись обращением матрицы лишь на нулевой итерации. Действительно, матрица (3.20) представима в виде (3.18), поэтому, применяя обобщенное неравенство Коши — Буняковского (2.29), гл. 3, получим

$$P \leq (\sum b_i^4)^{1/2} (\sum P_i^2)^{1/2}.$$

На этой основе процесс минимизации (3.21) можно заменить на более простой:

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \frac{\lambda_k}{(\sum b_i^4)^{1/2}} (\sum P_i^2)^{-1/2} \times \\ \times \begin{bmatrix} X^T B_k^{1/2} (y - f(\theta_k)) \\ -Z^T \Phi_k B_k^{1/2} (y - f(\theta_k)) \end{bmatrix}, \quad (3.22)$$

где P_i задаются формулой (3.19).

Перейдем теперь к методу расщепления. Выпишем еще раз частные производные $\partial Q/\partial \alpha$ и $\partial Q/\partial \beta$ и рассмотрим соответствующую систему нормальных уравнений:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \alpha} = \sum \left(y_i - \frac{\alpha^T x_i}{1 + \beta^T z_i} \right) \frac{x_i}{1 + \beta^T z_i} = 0, \quad (3.23) \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \beta} = \sum \left(y_i - \frac{\alpha^T x_i}{1 + \beta^T z_i} \right) \frac{(\alpha^T x_i) z_i}{(1 + \beta^T z_i)^2} = 0.$$

Выделим в этой системе линейную часть. Заметим, что

$$y_i - \frac{\alpha^T x_i}{1 + \beta^T z_i} = \frac{1}{1 + \beta^T z_i} (y_i + \beta^T z_i y_i - \alpha^T x_i).$$

Поэтому систему (3.23) можно переписать как

$$\sum (y_i + \beta^T z_i y_i - \alpha^T x_i) b_i^2 x_i = 0, \\ \sum (y_i + \beta^T z_i y_i - \alpha^T x_i) b_i^3 (\alpha^T x_i) z_i = 0,$$

где $b_i = (1 + \beta^T z_i)^{-1}$. При фиксированных значениях вторых сомножителей в обеих суммах векторы α и β входят в систему линейно. Таким обра-

зом, итерационный процесс будет иметь вид

$$\theta_{k+1} = \begin{bmatrix} \sum b_{ik}^2 x_i x_i^T & -\sum y_i b_{ik}^2 x_i z_i^T \\ \sum b_{ik}^3 (\alpha_k^T x_i) z_i x_i^T & -\sum b_{ik}^3 (\alpha_k^T x_i) y_i z_i z_i^T \end{bmatrix}^{-1} \times \\ \times \begin{bmatrix} \sum y_i b_{ik}^2 x_i \\ \sum y_i b_{ik}^3 (\alpha_k^T x_i) z_i \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

где $b_{ik} = (1 + \beta_k^T z_i)^{-1}$. Эту процедуру можно модифицировать, заметив, что при известном β вектор α в первое уравнение системы (3.23) входит линейно. Таким образом, процесс минимизации строим так:

$$\alpha_k = (X^T B_k^2 X)^{-1} X^T B_k y, \\ \beta_{k+1} = -(Z^T T_k Z)^{-1} Z^T v_k, \quad (3.25)$$

где T_k и B_k — диагональные матрицы $n \times n$,

$$(T_k)_{ii} = y_i \frac{\alpha_k^T x_i}{(1 + \beta_k^T z_i)^3}, \quad (B_k)_{ii} = \frac{1}{1 + \beta_k^T z_i},$$

v_k — вектор $n \times 1$ с компонентами

$$v_{ki} = \frac{(y_i - \alpha_k^T x_i) \alpha_k^T x_i}{(1 + \beta_k^T z_i)^3}.$$

На нулевой итерации можно положить $\beta_0 = 0$, тогда, как следует из первой формулы (3.25):

$$\alpha_0 = (X^T X)^{-1} X^T y$$

— оценка МНК линейной регрессии y на X .

Для применения метода мажорирующего параболоида необходимо оценить сверху гессиан (3.17). Представим i -й член суммы (3.17) в виде

$$b_i^2 \begin{bmatrix} x_i x_i^T & (y_i - 2f_i) x_i z_i^T \\ (y_i - 2f_i) z_i x_i^T & f_i(3f_i - 2y_i) z_i z_i^T \end{bmatrix} = \\ = b_i^2 \begin{bmatrix} x_i x_i^T & -y_i x_i z_i^T \\ -y_i z_i x_i^T & y_i^2 z_i z_i^T \end{bmatrix} + b_i^2 \begin{bmatrix} 0 & 2e_i x_i z_i^T \\ 2e_i z_i x_i^T & -4e_i y_i z_i z_i^T \end{bmatrix} + \\ + b_i^2 \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 3e_i^2 z_i z_i^T \end{bmatrix}, \quad (3.26)$$

где $f_i = (\alpha, x_i) b_i$, $e_i = y_i - f_i$, $i = 1, \dots, n$. Таким образом, сумму (3.17) можно разбить на три:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \theta^2} = \sum b_i^2 M_{1i} + \sum b_i^2 e_i M_{2i} + \sum b_i^2 e_i^2 M_{3i}, \quad (3.27)$$

где

$$M_{1i} = \begin{bmatrix} x_i x_i^T & -y_i x_i z_i^T \\ -y_i z_i x_i^T & y_i^2 z_i z_i^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i \\ -y_i z_i \end{bmatrix} [x_i^T \quad -y_i z_i^T], \\ M_{2i} = \begin{bmatrix} 0 & 2x_i z_i^T \\ 2z_i x_i^T & -4y_i z_i z_i^T \end{bmatrix}, \quad M_{3i} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 3z_i z_i^T \end{bmatrix}.$$

Оценим сверху каждую из трех сумм выражения (3.27). Матрица M_{1i} неотрицательно определена. По условию $\beta^T z_i > 0$, поэтому $b_i^2 = (1 + \beta^T z_i)^{-2} \leq 1$ и

$$\Sigma b_i^2 M_{1i} \leq \Sigma M_{1i} = \begin{bmatrix} X^T X & -X^T YZ \\ -Z^T YX & ZY^2 Z \end{bmatrix}.$$

Ко второй сумме (3.27) применим неравенство (2.29), гл. 3. Тогда получим неравенство

$$\Sigma e_i b_i^2 M_{2i} \leq (\Sigma e_i^2)^{1/2} (\Sigma b_i^4 M_{2i}^2)^{1/2} \leq Q^{1/2} (\Sigma M_{2i}^2)^{1/2},$$

поскольку $b_i^4 \leq 1$, $Q = \Sigma e_i^2$. Осталось оценить сверху третью сумму в (3.27). Очевидно $z_i z_i^T \leq \|z\|^2 I$, поэтому

$$\Sigma e_i^2 b_i^2 M_{3i} \leq 3Q \max_i \|z_i\|^2 \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix},$$

где I — единичная матрица $m_2 \times m_2$. Собирая воедино три оценки, получаем оценку сверху для гессиана (3.17):

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial \theta^2} \leq \begin{bmatrix} X^T X & -X^T YZ \\ -Z^T Y^T X & Z^T Y^2 Z + 3Q \max_i \|z_i\|^2 I \end{bmatrix} + \sqrt{Q} (\Sigma M_{2i}^2)^{1/2} = P(Q) \quad (3.28)$$

— положительно определенная матрица при условии, что матрица $[X; -YZ]$ имеет полный ранг. Полученная оценка сверху довольно точна, неравенство переходит в равенство при $Q = 0$. Применяя метод мажорирующего параболоида, приходим к следующему сходящемуся алгоритму:

$$\theta_{k+1} = \theta_k + P^{-1}(Q_k) \begin{bmatrix} X^T B_k (y - f(\theta_k)) \\ -Z^T \Phi_k B_k (y - f(\theta_k)) \end{bmatrix}, \quad k = 0, 1, \dots;$$

обозначения те же, что и в формуле (3.25), матрица $P(Q)$ задается (3.28), $Q_k = Q(\theta_k)$.

Теперь остановимся на одном классе нелинейных регрессий, частным случаем которого является производственная функция CES, рассмотренная ранее в § 5, гл. 1. Итак, пусть

$$f_i(\theta) = f_i(\alpha, \rho) = \frac{1}{\rho} \ln \left(\sum_{j=1}^m \alpha_j e^{\rho x_{ij}} \right), \quad (3.29)$$

где $\theta = (\alpha, \rho) \in R^{m+1}$, $\Sigma \alpha_j = 1$; считаем $\alpha_j > 0$, $\rho \in (-\infty, \infty)$, x_{ij} — фиксированные числа. Для сохранения непрерывности полагаем

$$f_i(\alpha, 0) = \frac{\Sigma \alpha_j x_{ij}}{\Sigma \alpha_j} = \Sigma \alpha_j x_{ij}.$$

Найдем первые частные производные $f_i(\alpha, \rho)$ по параметрам. Нетрудно посчитать, что

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = F = \frac{1}{\rho} [DE; d],$$

где D – диагональная матрица $n \times n$,

$$D_{ii} = \left(\sum_j \alpha_j e^{\rho x_{ij}} \right)^{-1}, \quad E_{ij} = e^{\rho x_{ij}} \quad (3.30)$$

– матрица $n \times m$, d – вектор-столбец $n \times 1$,

$$d_i = \frac{\partial f_i}{\partial \rho} \rho = \frac{\sum \alpha_j x_{ij} e^{\rho x_{ij}} \ln \left(\sum \alpha_j e^{\rho x_{ij}} \right)}{\sum \alpha_j e^{\rho x_{ij}}}. \quad (3.31)$$

С учетом приведенных формул метод Ньютона – Гаусса для регрессии (3.29) запишем в виде

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \lambda_k \begin{bmatrix} E_k^T D_k^2 E_k & E_k^T D_k d_k \\ d_k^T D_k E_k & d_k^T d_k \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} E_k^T D_k (\rho_k y - s_k) \\ d_k^T (\rho_k y - s_k) \end{bmatrix}, \quad (3.32)$$

где $\lambda_k > 0$ определяет длину шага; индекс k , как и прежде, указывает на то, что соответствующая величина вычислена в точке $\theta = \theta_k$, $s_i = \ln \left(\sum \alpha_j \exp(\rho x_{ij}) \right)$, $i = 1, \dots, n$.

Для применения метода подстановки заметим, что вычитаемое в i -й координате вектора d (3.31) есть $f_i(\theta)$; заменим его на y_i и обозначим

$$d'_i = \frac{\sum \alpha_j x_{ij} e^{\rho x_{ij}}}{\sum \alpha_j e^{\rho x_{ij}}} - y_i.$$

Заменой в (3.32) вектора d на вектор d' получаем модификацию метода Ньютона – Гаусса. Далее, можно заметить, что при условии $y_i \approx f_i(\theta)$ имеет место $\sum \alpha_j \exp(\rho x_{ij}) \sim \exp(\rho y_i)$, поэтому можно положить

$$D''_{ii} = e^{-\rho y_i}, \quad d''_i = e^{-\rho y_i} \sum \alpha_j x_{ij} e^{\rho x_{ij}} - y_i \quad (3.33)$$

и опять вместо D и d в формуле (3.32) подставить соответствующие значения (3.33).

В целях нормализации значения x_{ij} в (3.29) следует рассчитывать относительно соответствующего среднего. А именно, определив $\bar{x}_j = \sum x_{ij}/n$ вместо x_{ij} в (3.29), подставим $x'_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_j$. Эта замена очевидным образом приведет к переобозначению параметров: если α'_j – новые значения параметров, то $\alpha'_j = \alpha_j e^{\rho \bar{x}_j}$. В условиях, когда $x_{ij} \approx 0$ или $\rho \approx 0$, можно считать

$$E_{ij} \approx E'_{ij} = 1 + \rho x_{ij},$$

т.е. $E' = U + \rho X$, где U – матрица $n \times m$, составленная из 1, X – матрица $n \times m$ с ij -элементом x_{ij} . Как и прежде, вместо E в формулу (3.32) можно подставить E' . Возможно, что подобные преобразования помогут улучшить

обусловленность матрицы $F^T F$, которая при минимизации суммы квадратов отклонений регрессий, подобных (3.29), бывает очень плоха. Подробный анализ предлагаемых модификаций метода Ньютона – Гаусса для регрессий (3.29) требует экспериментальной проверки.

§ 4. Гетероскедастичные регрессии

Одним из основных предположений регрессионного анализа является предположение о гомоскедастичности отклонений регрессии, т.е. о постоянстве их дисперсий $E\epsilon_i^2 = \text{const}$, $i = 1, \dots, n$ в модели регрессии

$$y_i = f_i(\alpha) + \epsilon_i.$$

Иногда по тем или иным соображениям предполагается, что отклонения регрессии *гетероскедастичны*, т.е. что $E\epsilon_i^2 \neq \text{const}$.

Сначала будет изучен частный, двухрежимный случай гетероскедастичности, а именно, когда

$$E\epsilon_i^2 = \sigma_1^2, \quad i = 1, \dots, l; \quad E\epsilon_i^2 = \sigma_2^2, \quad i = l + 1, \dots, n.$$

В конце параграфа будет рассмотрен многорежимный случай. Значение $1 \leq l \leq n - 1$ считаем известным; величины дисперсий $\sigma_1^2, \sigma_2^2 > 0$ не известны. В случае $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$, т.е. в условиях гомоскедастичных отклонений, стандартным методом оценивания служит метод наименьших квадратов. Однако при $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$ для получения более точных оценок сумма квадратов должна быть взвешена.

Предположим, что отклонения ϵ_i независимы и нормально распределены, т.е. $\epsilon_i \sim N(0, \sigma_1^2)$, $i = 1, \dots, l$; $\epsilon_i \sim N(0, \sigma_2^2)$, $i > l$. Ограничимся рассмотрением линейных регрессий, т.е.

$$y_i = (\alpha, x_i) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.1)$$

где все векторы суть вектор-столбцы. Введем следующие обозначения:

$$X_1 = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_l^T \end{bmatrix}, \quad X_2 = \begin{bmatrix} x_{l+1}^T \\ x_{l+2}^T \\ \vdots \\ x_n^T \end{bmatrix}, \quad E_1 = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_l \end{bmatrix}, \quad E_2 = \begin{bmatrix} \epsilon_{l+1} \\ \epsilon_{l+2} \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix},$$

$$Y_1 = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_l \end{bmatrix}, \quad Y_2 = \begin{bmatrix} y_{l+1} \\ y_{l+2} \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

Тогда (4.1) в матричной записи переписывается как

$$Y_1 = X_1 \alpha + E_1, \quad Y_2 = X_2 \alpha + E_2,$$

а функция плотности вектора $y \in R^n$ запишется в виде

$$p(y_1, \dots, y_n; \alpha, \sigma_1^2, \sigma_2^2) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} (\sigma_1^2)^{-\frac{l}{2}} (\sigma_2^2)^{-\frac{n-l}{2}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_1^2} \|Y_1 - X_1 \alpha\|^2 - \frac{1}{2\sigma_2^2} \|Y_2 - X_2 \alpha\|^2\right). \quad (4.2)$$

В качестве оценок неизвестных параметров возьмем оценки метода максимального правдоподобия. Эти оценки по определению соответствуют максимуму функции плотности (4.2), что эквивалентно минимизации.

$$E(\theta) = E(\alpha, \sigma_1^2, \sigma_2^2) = \\ = l \ln \sigma_1^2 + \frac{1}{\sigma_1^2} \|Y_1 - X_1 \alpha\|^2 + (n-l) \ln \sigma_2^2 + \frac{1}{\sigma_2^2} \|Y_2 - X_2 \alpha\|^2, \quad (4.3)$$

$$\alpha \in R^m, \quad \sigma_1^2 > 0, \quad \sigma_2^2 > 0,$$

где $\theta = (\alpha, \sigma_1^2, \sigma_2^2) \in R^{m+2}$ – общий вектор параметров. Задача, таким образом, сводится к минимизации функции $E(\theta)$ на множестве

$$\Lambda = \{\theta = (\alpha, \sigma_1^2, \sigma_2^2): \alpha \in R^m, \sigma_1^2 > 0, \sigma_2^2 > 0\} \quad (4.4)$$

– открытое множество в R^{m+2} .

Нас будут интересовать чисто вычислительные вопросы гетероскедастичных регрессий, а именно – существование оценки метода максимального правдоподобия, т.е. достижимости инфимума функции плотности максимального правдоподобия (4.3) на множестве (4.4), построение эффективного (сходящегося) алгоритма минимизации и построение критериев одноэкстремальности функции (4.3). Читателя, интересующегося статистической стороной гетероскедастичных регрессий, отсылаем к работам [15, 62, 65, 70].

Прежде всего найдем условия корректности задачи минимизации функции (4.3) на множестве (4.4), т.е. выясним, при каких условиях функция (4.3) на Λ ограничена снизу, а ее инфимум достигается. Обозначим

$$Q_1(\alpha) = \|Y_1 - X_1 \alpha\|^2, \quad Q_2(\alpha) = \|Y_2 - X_2 \alpha\|^2.$$

Доказательство следующего факта элементарно.

Лемма 4.1. *Функция $g(s) = A \ln s + B/s$, $s > 0$, обладает следующими свойствами:*

$$а) \lim_{s \rightarrow +0} g(s) = \lim_{s \rightarrow +\infty} g(s) = +\infty;$$

$$б) \min_{s > 0} g(s) = g(s_*) = A \left(\ln \frac{B}{A} + 1 \right), \quad s_* = \frac{B}{A}.$$

Теорема 4.1. Допустим, $\text{rang } X_1 = l$, $\text{rang } X_2 = n - l$. Если к тому же ни Y_1 , ни Y_2 не являются линейными комбинациями вектор-столбцов матриц X_1 и X_2 соответственно (т.е. если $Q_1(\alpha) > 0$ и $Q_2(\alpha) > 0$), то задача минимизации функции (4.3) на множестве (4.4) корректна. Более точно: функция E на Λ ограничена снизу, а нижняя грань E на границе Λ равна бесконечности¹⁾; таким образом, инфимум функции (4.3) достигается.

Доказательство. Обозначим

$$\hat{Q}_j = \min_{\alpha} Q_j(\alpha), \quad j = 1, 2.$$

По предположению $\hat{Q}_j > 0$. Ограниченность E на Λ следует тогда из леммы 4.1, а именно

$$\begin{aligned} E(\alpha, \sigma_1^2, \sigma_2^2) &\geq l \left(\ln \frac{Q_1(\alpha)}{l} + 1 \right) + (n-l) \left(\ln \frac{Q_2(\alpha)}{n-l} + 1 \right) \geq \\ &\geq l \left(\ln \frac{\hat{Q}_1}{l} + 1 \right) + (n-l) \left(\ln \frac{\hat{Q}_2}{n-l} + 1 \right). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Докажем теперь, что если $\theta_k \rightarrow \theta^*$, где θ^* — граничная точка Λ , то $E(\theta_k) \rightarrow \infty$. Очевидно, возможны следующие три случая:

- а) $\|\alpha_k\| \rightarrow \infty$, $k \rightarrow \infty$;
- б) $\sigma_{jk}^2 \rightarrow 0$ хотя бы для одного $j = 1, 2$;
- в) $\sigma_{jk}^2 \rightarrow \infty$ хотя бы для одного $j = 1, 2$.

В случае а) из неравенства (4.5) вытекает, что $E(\theta_k) \rightarrow \infty$, поскольку $Q_1(\alpha) \rightarrow \infty$ и $Q_2(\alpha) \rightarrow \infty$, что следует из условия полного ранга матриц X_1 и X_2 . В случаях б) и в) по лемме 4.1 также $E(\theta_k) \rightarrow \infty$. Теорема доказана.

Функция $E(\theta)$ допускает редукцию, т.е. сведение к более простой функции. Продифференцируем ее по σ_1^2 , σ_2^2 и приравняем результат нулю:

$$\frac{\partial E}{\partial \sigma_1^2} = \frac{l}{\sigma_1^2} - \frac{Q_1(\alpha)}{\sigma_1^4} = 0,$$

$$\frac{\partial E}{\partial \sigma_2^2} = \frac{n-l}{\sigma_2^2} - \frac{Q_2(\alpha)}{\sigma_2^4} = 0,$$

откуда

$$\sigma_1^2 = \frac{1}{l} Q_1(\alpha), \quad \sigma_2^2 = \frac{1}{n-l} Q_2(\alpha). \quad (4.6)$$

Последние соотношения позволяют изолированно оценивать параметры

¹⁾ Определение нижней грани функции на границе множества дано в § 1, гл. 1.

σ_1^2 , σ_2^2 и α . А именно, пусть a_0 — какая-либо оценка параметра α , например, обычная оценка МНК объединенной регрессии. По ней из (4.6) найдем оценки $\hat{\sigma}_1^2$ и $\hat{\sigma}_2^2$ и подставим их в (4.3). Найдем затем минимум

$$\frac{1}{\hat{\sigma}_1^2} \|Y_1 - X_1 \alpha\|^2 + \frac{1}{\hat{\sigma}_2^2} \|Y_2 - X_2 \alpha\|^2 \Rightarrow \min_{\alpha}$$

Последний функционал квадратичен по α (при фиксированных $\hat{\sigma}_1^2$, $\hat{\sigma}_2^2$), минимум его определяется весьма просто. Легко проверить, что он достигается при значении α , равном

$$a_1 = \left(\frac{1}{\hat{\sigma}_1^2} X_1^T X_1 + \frac{1}{\hat{\sigma}_2^2} X_2^T X_2 \right)^{-1} \left(\frac{1}{\hat{\sigma}_1^2} X_1^T Y_1 + \frac{1}{\hat{\sigma}_2^2} X_2^T Y_2 \right). \quad (4.7)$$

Получив новое значение вектора параметров a_1 , найдем следующее приближение дисперсий:

$$\hat{\sigma}_1^2 = \frac{1}{l} Q_1(a_1), \quad \hat{\sigma}_2^2 = \frac{1}{n-l} Q_2(a_1). \quad (4.8)$$

Процесс продолжаем. Описанная процедура не нова и широко используется в статистике. Широко распространено мнение, что она сходится к оценкам максимального правдоподобия. Имеющееся "доказательство" этого факта [68] нельзя назвать удовлетворительным. По сути дела, в [68] было лишь доказано, что если последовательность θ_k имеет предельную точку θ_* , то для нее

$$E(\sigma_1^2, \sigma_2^2, a_*) \geq E(\theta_*), \quad \sigma_1^2, \sigma_2^2 > 0.$$

Более того, как позже будет установлено, функция $E(\theta)$ может быть многоэкстремальной, так что θ_k могут сходиться к точке локального, а не глобального минимума функции. Таким образом, широко распространенное мнение, что описанная выше процедура сходится к оценкам максимального правдоподобия, является заблуждением.

Для упрощения $E(\theta)$ выразим σ_j^2 через параметры α по формулам (4.6) и подставим эти значения в $E(\theta)$, которая сведется тогда к более простой функции

$$R(\alpha) = l \ln Q_1(\alpha) + (n-l) \ln Q_2(\alpha), \quad \alpha \in R^m \quad (4.9)$$

Нетрудно проверить, что задача минимизации функции (4.9) эквивалентна задаче минимизации функции $E(\theta)$. А именно, если a — стационарная точка для (4.9), то соответствующая точка является стационарной точкой и для (4.3). Наоборот, если $\theta \in R^{m+2}$ — стационарная точка для $E(\theta)$, то a — стационарная точка для R . Аналогичная эквивалентность имеет место для локальных и глобальных минимумов этих функций.

Приступим к построению алгоритмов минимизации функции (4.9). В дальнейшем будем считать условия теоремы 4.1 выполненными, таким

образом, нижняя грань $R(\alpha)$ на бесконечности равна ∞ , поэтому задача минимизации R корректна. Найдем прежде всего ее первые и вторые производные:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial R}{\partial \alpha} &= \frac{l}{Q_1(\alpha)} (X_1^T X_1 \alpha - X_1^T Y_1) + \frac{n-l}{Q_2(\alpha)} (X_2^T X_2 \alpha - X_2^T Y_2) = \\ &= -\frac{l}{Q_1(\alpha)} X_1^T e_1(\alpha) - \frac{n-l}{Q_2(\alpha)} X_2^T e_2(\alpha), \end{aligned} \quad (4.10)$$

где $e_1(\alpha) = Y_1 - X_1 \alpha$, $e_2(\alpha) = Y_2 - X_2 \alpha$ — отклонения от фактических значений соответственно для первой и второй группы наблюдений. Далее,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial \alpha^2} &= \frac{l}{Q_1(\alpha)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(\alpha)} X_2^T X_2 - \\ &- \frac{2l}{Q_1^2(\alpha)} X_1^T e_1(\alpha) e_1^T(\alpha) X_1 - \frac{2(n-l)}{Q_2^2(\alpha)} X_2^T e_2(\alpha) e_2^T(\alpha) X_2. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Можно несколькими способами аргументировать классическую процедуру (4.7), (4.8). Во-первых, если значение вектора параметров α на предыдущей итерации обозначить a_k , то вместо решения нелинейной системы уравнений $\partial R / \partial \alpha = 0$ можно прийти к линейной, если $Q_1(\alpha)$ и $Q_2(\alpha)$ заменить на $Q_1(a_k)$ и $Q_2(a_k)$. Действительно, в этом случае $\partial R / \partial \alpha = 0$ сведется к

$$\frac{l}{Q_1(a_k)} (X_1^T X_1 \alpha - X_1^T Y_1) + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} (X_2^T X_2 \alpha - X_2^T Y_2) = 0,$$

откуда получается следующее значение вектора параметров:

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T X_2 \right)^{-1} \times \\ &\times \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T Y_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T Y_2 \right). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Очевидно, это решение можно рассматривать как применение метода расщепления, описанного в начале этой главы.

Другая интерпретация связана с аппроксимацией матрицы вторых производных минимизируемой функции (4.9) и очень похожа на метод Ньютона — Гаусса в случае нелинейной регрессии. Действительно, обращаясь к (4.11), замечаем, что матрица вторых производных представима в виде суммы двух пар матриц. Первая

$$\frac{l}{Q_1(\alpha)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(\alpha)} X_2^T X_2 \quad (4.13)$$

в силу принятого предположения о полном ранге матриц X_1 и X_2 является положительно определенной (заметим, что $Q_1(\alpha) > 0$ и $Q_2(\alpha) > 0$ для всех $\alpha \in R^m$). Второй

$$-2 \left(\frac{l}{Q_1^2(\alpha)} X_1^T e_1(\alpha) e_1^T(\alpha) X_1 + \frac{n-l}{Q_2^2(\alpha)} X_2^T e_2(\alpha) e_2^T(\alpha) X_2 \right)$$

в случае хорошей аппроксимации, т.е. в случае $e_1 \approx 0$, $e_2 \approx 0$, можно пренебречь. Таким образом, вместо итераций Ньютона – Рафсона

$$a_{k+1} = a_k - \left(\frac{\partial^2 R(a_k)}{\partial \alpha^2} \right)^{-1} \left(\frac{\partial R(a_k)}{\partial \alpha} \right)$$

с заменой (4.11) на (4.13) получаем

$$\begin{aligned} a_{k+1} = & a_k + \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T X_2 \right)^{-1} \times \\ & \times \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T e_1(a_k) + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T e_2(a_k) \right). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Осталось показать, что (4.12) и (4.14) совпадают. Действительно, из (4.14)

$$\begin{aligned} a_{k+1} = & a_k + \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T X_2 \right)^{-1} \times \\ & \times \left(- \frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T X_1 a_k - \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T X_2 a_k + \frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T Y_1 + \right. \\ & \left. + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T Y_2 \right) = \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T X_2 \right)^{-1} \times \\ & \times \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T Y_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T Y_2 \right). \end{aligned}$$

Процедура (4.12) допускает более экономную запись с вычислительной точки зрения. Для этого воспользуемся следующим фактом из теории матриц (см., например, [12] – одновременное приведение двух симметрических матриц к диагональному виду). Пусть A и B – две симметрические матрицы одного порядка, A – положительно определена. Тогда существует такая невырожденная матрица S , что $A = SS^T$, $B = S \Lambda S^T$, где Λ – диагональная матрица.

Пользуясь этим фактом, найдем матрицу S такую, что

$$X_1^T X_1 = SS^T, \quad X_2^T X_2 = S \Lambda S^T.$$

Тогда итерации (4.12) переписутся как

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} SS^T + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} S \Lambda S^T \right)^{-1} \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T Y_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T Y_2 \right) = \\ &= (S^T)^{-1} \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} I + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} \Lambda \right)^{-1} S^{-1} \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T Y_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T Y_2 \right). \end{aligned}$$

Обозначим

$$\beta = S^T \alpha, \quad v_1 = S^{-1} X_1^T Y_1, \quad v_2 = S^{-1} X_2^T Y_2.$$

Тогда итерации (4.12) запишутся в виде

$$b_{k+1} = \left(\frac{l}{Q_1(b_k)} I + \frac{n-l}{Q_2(b_k)} \Lambda \right)^{-1} \left(\frac{l}{Q_1(b_k)} v_1 + \frac{n-l}{Q_2(b_k)} v_2 \right),$$

и окончательно их можно переписать в координатной форме:

$$b_{k+1,j} = \frac{\frac{l}{Q_1(b_k)} v_{1j} + \frac{n-l}{Q_2(b_k)} v_{2j}}{\frac{l}{Q_1(b_k)} + \frac{n-l}{Q_2(b_k)} \Lambda_{jj}}, \quad j = 1, \dots, m.$$

Этот вид удобен тем, что не надо обращать на каждой итерации матрицу в (4.12) порядка $m \times m$.

Существует принципиально другая возможность избежать обращения матрицы порядка $m \times m$ на каждой итерации. Воспользуемся приближенным равенством

$$\begin{aligned} \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} X_1^T X_1 + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} X_2^T X_2 \right)^{-1} &\approx \\ \approx \frac{Q_1(a_k)}{l} (X_1^T X_1)^{-1} + \frac{Q_2(a_k)}{n-l} (X_2^T X_2)^{-1} &= M(a_k). \end{aligned}$$

Легко видеть, что $M(a_k)$ положительно определена для всех a_k , поэтому метод

$$a_{k+1} = a_k + \lambda_k M(a_k) q(a_k), \quad \lambda_k > 0,$$

также приведет к сходимости к стационарным точкам функции $R(\alpha)$. Трудность теперь заключается в том, что для сохранения монотонности убывания $R(\alpha)$ необходимо выбирать специальным образом $\lambda_k > 0$.

Итерации (4.14) обладают одним замечательным свойством: *новое значение вектора параметров приводит к уменьшению минимизируемой функ-*

ции $R(\alpha)$, т.е. дробить длину шага в процессе (4.14), как это обычно делается в процессах минимизации, нет нужды. Итак, покажем строгую релаксационность итераций (4.14), т.е.

$$R(a_{k+1}) < R(a_k), \quad \frac{\partial R(a_k)}{\partial \alpha} \neq 0, \quad k = 0, 1, \dots \quad (4.15)$$

Воспользуемся следующим простым неравенством, являющимся следствием вогнутости функции \ln :

$$\lambda \ln A + \mu \ln B \leq (\lambda + \mu) \ln \left(\frac{\lambda}{\lambda + \mu} A + \frac{\mu}{\lambda + \mu} B \right),$$

$$\lambda > 0, \quad \mu > 0, \quad A > 0, \quad B > 0.$$

Используя это неравенство, получим

$$\begin{aligned} R(a_{k+1}) - R(a_k) &= l(\ln Q_1(a_{k+1}) - \ln Q_1(a_k)) + \\ &+ (n-l)(\ln Q_2(a_{k+1}) - \ln Q_2(a_k)) = \\ &= l \ln \frac{Q_1(a_{k+1})}{Q_1(a_k)} + (n-l) \ln \frac{Q_2(a_{k+1})}{Q_2(a_k)} \leq \\ &\leq n \ln \left[\frac{1}{n} \left(l \frac{Q_1(a_{k+1})}{Q_1(a_k)} + (n-l) \frac{Q_2(a_{k+1})}{Q_2(a_k)} \right) \right]; \end{aligned}$$

Но по определению

$$a_{k+1} = \arg \min_{\alpha} \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} Q_1(\alpha) + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} Q_2(\alpha) \right),$$

поэтому последнее неравенство запишется как

$$\begin{aligned} R(a_{k+1}) - R(a_k) &\leq \\ &\leq n \ln \left[\frac{1}{n} \left(l \frac{Q_1(a_k)}{Q_1(a_k)} + (n-l) \frac{Q_2(a_k)}{Q_2(a_k)} \right) \right] = 0. \end{aligned}$$

Заметим, что равенство возможно, лишь если

$$\begin{aligned} \min_{\alpha} \left(\frac{l}{Q_1(a_k)} Q_1(\alpha) + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} Q_2(\alpha) \right) &= \\ &= \frac{l}{Q_1(a_k)} Q_1(a_k) + \frac{n-l}{Q_2(a_k)} Q_2(a_k), \end{aligned}$$

т.е. если $\partial R(a_k)/\partial \alpha = 0$. Окончательно можно утверждать, что (4.15) имеет место.

С учетом доказанной строгой монотонности падения $R(\alpha)$ при $\partial R(a_k)/\partial \alpha \neq 0$ по теореме 1.2, гл. 6 можно утверждать, что метод (4.12) сходится к одной из стационарных точек минимизируемой функции $R(\alpha)$ (конечность числа стационарных точек $R(\alpha)$ доказывается ниже).

Не стоит спешить с выводом, что итерации (4.12) сходятся к оценкам максимального правдоподобия (как уже указывалось, это – широко распространенное заблуждение). Ниже будет показано, что функция $R(\alpha)$ является, вообще говоря, многоэкстремальной, так что предел итераций (4.12) может не совпасть с точкой глобального минимума, т.е. с оценкой максимального правдоподобия.

Перейдем теперь к вопросу о проверке того, является ли найденный локальный минимум функции $R(\alpha)$ глобальным. Исследование начнем с простейшего случая $m = 1$. Прежде всего покажем, что функция (4.9), вообще говоря, может иметь несколько локальных минимумов, т.е. является многоэкстремальной. Напомним, что $Q_1(\alpha)$ и $Q_2(\alpha)$ являются квадратичными по α , поэтому функция

$$l \ln(\alpha - a_1)^2 + (n - l) \ln(\alpha - a_2)^2, \quad a_1 \neq a_2, \quad (4.16)$$

является частным случаем (4.9). Эта функция имеет два минимума, которые достигаются в разных точках a_1 и a_2 . Функция (4.16) не удовлетворяет требованию ограниченности снизу, так как не выполняется условие строгой положительности $Q_1(\alpha) > 0$, $Q_2(\alpha) > 0$. Однако из непрерывности следует, что подбором достаточно малых $\delta_1 > 0$, $\delta_2 > 0$ можно добиться того, чтобы функция

$$l \ln[(\alpha - a_1)^2 + \delta_1] + (n - l) \ln[(\alpha - a_2)^2 + \delta_2]$$

также имела два локальных минимума (ниже это утверждение будет доказано более строго).

При исследовании функции (4.9) на многоэкстремальность нам будет удобна следующая форма записи квадратичных функционалов $Q_1(\alpha)$ и $Q_2(\alpha)$. Очевидно, они представимы в следующем виде:

$$Q_j(\alpha) = A_j(\alpha - b_j)^2 + B_j, \quad j = 1, 2, \quad (4.17)$$

где

$$A_1 = \sum_1^l x_i^2, \quad A_2 = \sum_{l+1}^n x_i^2, \\ b_1 = \sum_1^l y_i x_i / \sum_1^l x_i^2, \quad b_2 = \sum_{l+1}^n y_i x_i / \sum_{l+1}^n x_i^2$$

– оценки МНК по первым l и последним $n - l$ наблюдениям,

$$B_j = \min_{\alpha} Q_j(\alpha)$$

– соответствующие минимумы суммы квадратов. Очевидно, минимизация функции (4.9) эквивалентна минимизации

$$R_1(\alpha) = l \ln((\alpha - b_1)^2 + c_1) + (n - l) \ln((\alpha - b_2)^2 + c_2), \quad (4.18)$$

где $c_j = B_j/A_j > 0$. Найдем первую производную этой функции

$$\frac{1}{2} \frac{dR_1}{d\alpha} = \frac{l(\alpha - b_1)}{(\alpha - b_1)^2 + c_1} + \frac{(n-l)(\alpha - b_2)}{(\alpha - b_2)^2 + c_2} \quad (4.19)$$

и найдем условия, при которых $R_1(\alpha)$ является одностационарной, т.е. при которых уравнение $dR_1/d\alpha = 0$ имеет единственное решение. Освобождаясь от знаменателей, приходим к исследованию следующего кубического уравнения:

$$l(\alpha - b_2)^2(\alpha - b_1) + (n-l)(\alpha - b_1)^2(\alpha - b_2) + c_2l(\alpha - b_1) + (n-l)c_1(\alpha - b_2) = 0. \quad (4.20)$$

Приведем это уравнение к стандартному виду, для чего раскроем скобки, сгруппируем члены и разделим уравнение на коэффициент при α^3 , в данном случае на n . Получим эквивалентное кубическое уравнение

$$\alpha^3 - e_1\alpha^2 + e_2\alpha - e_3 = 0,$$

где

$$\begin{aligned} e_1 &= ((n+l)b_2 + (2n-l)b_1)/n, \\ e_2 &= (lb_2^2 + (n-l)b_1^2 + 2nb_1b_2 + c_2l + (n-l)c_1)/n, \\ e_3 &= (lb_1^2b_2 + (n-l)b_2^2b_1 + c_2lb_1 + (n-l)c_1b_2)/n. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Известно необходимое и достаточное условие существования единственного действительного корня кубического уравнения $x^3 + px + q = 0$; оно выражается неравенством $4p^3 + 27q^2 > 0$ [30]. Таким образом, необходимым и достаточным условием одностационарности функции (4.9) в случае $m = 1$ является условие

$$4\left(e_2 - \frac{e_1^2}{3}\right)^3 + 27\left(\frac{2e_3}{27} - \frac{e_1e_2}{3} + e_3\right)^2 > 0, \quad (4.22)$$

где e_1, e_2, e_3 задаются выражениями (4.21).

На основе этого неравенства можно строго доказать, что исходная задача оптимизации, вообще говоря, многоэкстремальна. Для этого достаточно положить $b_1 = 0, c_1 = c_2 = \delta, n = 2l$. Тогда второе слагаемое в (4.22) обращается в нуль, а первое будет равно $-(b_2^2 - 4\delta)^3/16$. Поэтому если $b_2 > 2\sqrt{\delta}$, то уравнение (4.20) будет иметь три различных действительных корня, а значит, (4.18) имеет два локальных минимума.

Необходимым и достаточным условием (4.22) пользоваться неудобно, оно очень громоздко, да и трудно обобщается на многомерный случай. Сейчас мы предложим более простое, но уже достаточное условие одностационарности функции $R_1(\alpha)$. Для этого заметим, что уравнение (4.20) будет иметь единственный корень, если левая часть этого уравнения является возрастающей функцией по α . Найдем соотношение между пара-

метрами функции (4.18), которые приводят к этому условию. Таким образом, необходимо, чтобы

$$2n(\alpha - b_2)(\alpha - b_1) + l(\alpha - b_2)^2 + (n - l)(\alpha - b_1)^2 + c_2l + (n - l)c_1 \geq 0$$

для любых $\alpha \in (-\infty, \infty)$. Левая часть последнего выражения есть квадратичная функция, поэтому неравенство будет иметь место, если дискриминант соответствующего квадратичного трехчлена меньше или равен нулю. После алгебраических преобразований приходим к неравенству

$$(b_1 - b_2)^2 \leq \frac{3n}{l^2 + 3l(n-l) + (n-l)^2} \left(l \frac{B_2}{A_2} + (n-l) \frac{B_1}{A_1} \right). \quad (4.23)$$

Итак, если неравенство (4.23) верно, то функция $R_1(\alpha)$ при $m = 1$ имеет единственную стационарную точку, и в частности, является одноэкстремальной. Как следует из этого неравенства, необходимо, чтобы минимумы квадратичных форм достигались в точках, отстоящих друг от друга не на очень большое расстояние, а минимумы этих форм были не очень малы. Кстати, это не выполняется для нашего многоэкстремального примера, где $b_1 \neq b_2$, но $B_1 = B_2 = 0$.

Можно получить более грубую оценку следующим образом. После приведения к общему знаменателю в (4.19) получим

$$0 = l(\alpha - b_1)Q_2(\alpha) + (n - l)(\alpha - b_2)Q_1(\alpha) = \psi(\alpha).$$

Тогда

$$\psi'(\alpha) = 2n(\alpha - b_1)(\alpha - b_2) + lQ_2(\alpha) + (n - l)Q_1(\alpha).$$

Но легко видеть, что

$$2n(\alpha - b_1)(\alpha - b_2) \geq -\frac{(b_1 - b_2)^2}{2}n,$$

поэтому

$$\psi'(\alpha) \geq -\frac{(b_1 - b_2)^2}{2}n + lQ_2(\alpha) + (n - l)Q_1(\alpha) \geq 0,$$

если

$$(b_2 - b_1)^2 \leq 2 \min_{\alpha} \left(\frac{l}{n} Q_2(\alpha) + \frac{n-l}{n} Q_1(\alpha) \right). \quad (4.24)$$

Велика ли разница в оценках (4.23) и (4.24)? Легко видеть, что

$$\min_{\alpha} \left(\frac{l}{n} Q_2(\alpha) + \frac{n-l}{n} Q_1(\alpha) \right) = (b_2 - b_1)^2 \frac{l(n-l)}{n^2} + \frac{l}{n} \frac{B_2}{A_2} + \frac{n-l}{n} \frac{B_1}{A_1}.$$

Поэтому последняя оценка равносильна

$$(b_2 - b_1)^2 \leq \frac{2n}{n^2 - 2ln + 2l^2} \left(l \frac{B_2}{A_2} + (n-l) \frac{B_1}{A_1} \right).$$

Разница между (4.23) и (4.24) мала:

$$\frac{3n}{n^2 + nl - l^2} - \frac{2n}{n^2 - 2nl + 2l^2} = n \frac{n^2 - 8nl + 4l^2}{(n^2 + nl - l^2)(n^2 - 2nl + 2l^2)} \sim \frac{1}{n}.$$

Перейдем к случаю $m > 1$. Покажем, что здесь, как при $m = 1$, можно решить проблему минимизации (4.9) полностью, т.е. найти все стационарные точки $R(\alpha)$. Для удобства квадратичные формы перепишем следующим образом: $Q_i(\alpha) = (\alpha - b_i)^T A_i (\alpha - b_i) + Q_i$, где $A_i = X_i^T X_i$ — положительно определенная симметрическая матрица $m \times m$, b_i — оценка МНК, $i = 1, 2$. Стационарные точки $R(\alpha)$ — решения системы нелинейных уравнений

$$\frac{1}{2} \frac{\partial R}{\partial \alpha} = \frac{n_1}{Q_1(\alpha)} A_1 (\alpha - b_1) + \frac{n_2}{Q_2(\alpha)} A_2 (\alpha - b_2) = 0, \quad (4.25)$$

где в старых обозначениях $n_1 = l$, $n_2 = n - l$. Обозначим

$$\kappa = \frac{n_2 Q_1(\alpha)}{n_1 Q_2(\alpha)}, \quad (4.26)$$

тогда из (4.25) следует, что решением системы (4.25) будет

$$\alpha = (A_1 + \kappa A_2)^{-1} (A_1 b_1 + \kappa A_2 b_2). \quad (4.27)$$

Воспользуемся теперь фактом одновременного приведения положительно определенных матриц к диагональному виду: существует такая невырожденная матрица S , что $S^T A_1 S = \Lambda$ — диагональная матрица, $S^T A_2 S = I$ — единичная матрица. Тогда

$$\begin{aligned} Q_1(\alpha) - \hat{Q}_1 &= (\alpha - b_1)^T (S^T)^{-1} S^T A_1 S S^{-1} (\alpha - b_1) = \\ &= (S^{-1} \alpha - S^{-1} b_1)^T \Lambda (S^{-1} \alpha - S^{-1} b_1) = \\ &= (\alpha' - b_1')^T \Lambda (\alpha' - b_1') = \sum_{i=1}^m \lambda_i (\alpha'_i - b_{1i}')^2; \end{aligned}$$

аналогично

$$Q_2(\alpha) - \hat{Q}_2 = \sum_{i=1}^m (\alpha'_i - b_{2i}')^2.$$

Таким образом, далее не теряя общности можно считать, что $A_1 = \Lambda$ — диагональная матрица, $\Lambda_{ii} = \lambda_i > 0$, $A_2 = I$ (штрихи в α' и b' для простоты обозначений далее опускаем).

Приведение матриц к диагональному виду дает возможность перейти к координатной форме в (4.27):

$$\alpha_i = \frac{\lambda_i b_{1i} + \kappa b_{2i}}{\kappa + \lambda_i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

откуда $(\delta_i = b_{1i} - b_{2i})$

$$Q_1(\alpha) = \kappa^2 \sum \frac{\lambda_i \delta_i^2}{(\kappa + \lambda_i)^2} + \hat{Q}_1, \quad Q_2(\alpha) = \sum \frac{\lambda_i^2 \delta_i^2}{(\kappa + \lambda_i)^2} + \hat{Q}_2.$$

Подставляя эти значения в (4.26), приходим к уравнению относительно $\kappa > 0$:

$$n_1 \kappa \sum \frac{\lambda_i^2 \delta_i^2}{(\kappa + \lambda_i)^2} - n_2 \kappa^2 \sum \frac{\lambda_i \delta_i^2}{(\kappa + \lambda_i)^2} = n_2 \hat{Q}_1 - n_1 \kappa \hat{Q}_2.$$

После некоторых преобразований оно сведется к следующему уравнению:

$$\sum_{i=1}^m \frac{v_i \kappa + r v_i \lambda_i}{(\kappa + \lambda_i)^2} = C_1 - C_2 \kappa, \quad \kappa > 0, \quad (4.28)$$

где

$$C_1 = n_2 (\hat{Q}_1 + \sum \lambda_i \delta_i^2), \quad C_2 = n_1 \hat{Q}_2,$$

$$v_i = (n + n_2) \lambda_i^2 \delta_i^2, \quad r = n_2 / (n_2 + n).$$

Проблема теперь заключается в отыскании корней уравнения (4.28). Найдем прежде всего оценки сверху и снизу для корней этого уравнения (рис. 26). Очевидно, что если κ_0 — корень уравнения (4.28), то $\kappa_0 < C_1 / C_2$. Найдем оценку снизу для κ_0 . Имеем

$$\sum \frac{v_i \kappa + r v_i \lambda_i}{(\kappa + \lambda_i)^2} < \sum \frac{v_i \kappa + r v_i \lambda_i}{\lambda_i^2} = \kappa \sum \frac{v_i}{\lambda_i^2} + r \sum \frac{v_i}{\lambda_i},$$

поэтому

$$\kappa_0 > \frac{n_2 \hat{Q}_1}{n_1 \hat{Q}_2 + (n + n_2) \sum \delta_i^2} = L > 0.$$

Если левую часть (4.28) обозначить $\psi(\kappa)$, то легко видеть, что $\psi(0) < C_1$, причем $\psi(\kappa) \rightarrow 0$ при $\kappa \rightarrow \infty$. Если в (4.28) освободиться от знаменателя, то приходим к алгебраическому уравнению степени $2m + 1$. Найти все корни уравнения (4.28) можно либо нахождением корней полинома степени $2m + 1$, либо отделением корней на отрезке $(L, C_1 / C_2)$. Для этого, задавшись достаточно малым шагом, вычислим $\psi(\kappa)$, после чего определим корни либо методом хорд, либо методом половинного деления [17, гл. 4].

Найдем условия, при которых уравнение (4.28) относительно κ имеет единственное решение; это соответствует случаю одноэкстремальности $R(\alpha)$. Рассмотрим производную левой части (4.28) как функцию κ . Тогда для того, чтобы уравнение (4.28) имело единственное решение, достаточно, чтобы

$$\sum \frac{v_i}{(\kappa + \lambda_i)^2} - 2(1 - r) \sum \frac{v_i \lambda_i}{(\kappa + \lambda_i)^3} < C_2, \quad L < \kappa < \frac{C_1}{C_2}. \quad (4.29)$$

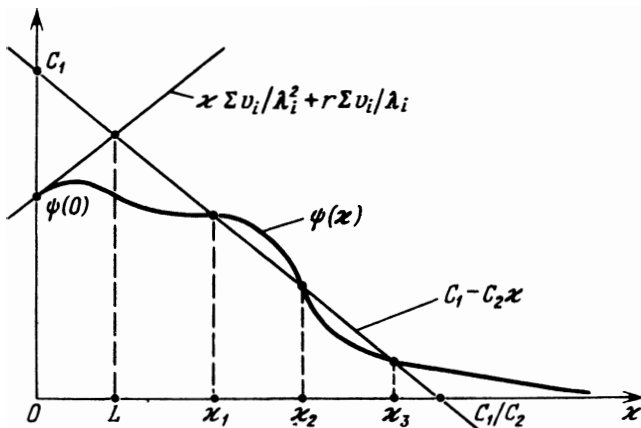


Рис. 26. Решение уравнения $\psi(\kappa) = C_1 - C_2 \kappa$, $\kappa > 0$

Можно строить разные критерии выполнимости последнего неравенства. Мы ограничимся простым. Очевидно

$$\Sigma \frac{v_i \lambda_i}{(\kappa + \lambda_i)^3} > \Sigma \frac{v_i \lambda_i}{(C_1/C_2 + \lambda_i)^3},$$

поэтому (4.29) будет иметь место, если

$$\Sigma \frac{v_i}{(\kappa + \lambda_i)^2} < 2(1 - r) \Sigma \frac{v_i \lambda_i}{(C_1/C_2 + \lambda_i)^3} + C_2,$$

а это в свою очередь будет иметь место, если

$$\Sigma \frac{v_i}{(\lambda_i + L)^2} < 2(1 - r) \Sigma \frac{v_i \lambda_i}{(C_1/C_2 + \lambda_i)^3} + C_2. \quad (4.30)$$

Таким образом, утверждаем, что $R(\alpha)$ одноэкстремальна, если неравенство (4.30) имеет место.

На основе (4.30) можно получить следующий простой критерий одноэкстремальности $R(\alpha)$. Действительно,

$$\Sigma \frac{v_i}{(\lambda_i + L)^2} < \Sigma \frac{v_i}{\lambda_i^2},$$

поэтому для выполнимости (4.30) достаточно, чтобы $\Sigma v_i / \lambda_i^2 < C_2$, или

$$(b_2 - b_1)^T S^{-2} (b_2 - b_1) < \frac{n_1}{n + n_2} \hat{Q}_2. \quad (4.31)$$

Легко проверить, что в случае $m = 1$ критерий (4.31) более строгий, чем (4.23).

Перейдем теперь к исследованию многорежимных гетероскедастичных регрессий. В матричном виде гетероскедастичную регрессию (ГР) с k

неравными дисперсиями можно записать в виде

$$y_i = X_i \alpha + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, k, \quad (4.32)$$

где y_i и ϵ_i – вектор-столбцы зависимой переменной и случайной ошибки $n_i \times 1$; $\sum n_i = n$ – общий объем выборки, n_i – объем i -й группы наблюдений, X_i – матрица независимых наблюдений $n_i \times m$; α – вектор неизвестных параметров $m \times 1$, причем $n_i > m$. Все ошибки имеют нулевое математическое ожидание: $E\epsilon_i = 0$, однако каждая группа наблюдений имеет свою дисперсию: $E\epsilon_i \epsilon_i^T = \sigma_i^2 I$, $\sigma_i^2 > 0$ (в этом и заключается "гетероскедастичность"). Будем предполагать, что ошибки независимы и нормально распределены. Таким образом, число неизвестных параметров равно $m + k$; общий вектор параметров обозначим $\theta = (\alpha, \sigma_1^2, \dots, \sigma_k^2) \in \Lambda \subset R^{m+k}$, где Λ – априорное множество параметров $\Lambda = \{\alpha \in R^m; \sigma_1^2 > 0, \dots, \sigma_k^2 > 0\}$. Исключая случаи вырождения, будем в дальнейшем считать

$$\text{rank } X_i = m, \quad i = 1, \dots, k. \quad (4.33)$$

Задача, таким образом, заключается в оценивании $m + k$ неизвестных параметров. Для ее решения применим метод максимального правдоподобия (МП). Легко показать, что функция правдоподобия ГР равна

$$L(y_1, \dots, y_n; \alpha, \sigma_1^2, \dots, \sigma_k^2) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \prod_{i=1}^k (\sigma_i^2)^{-\frac{n_i}{2}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \frac{1}{\sigma_i^2} \|y_i - X_i \alpha\|^2\right).$$

Оценкам метода МП отвечают значения параметров, доставляющие функции правдоподобия максимум. Для удобства возьмем у L логарифм и поменяем знак. Тогда соответствующая экстремальная задача будет иметь вид:

$$T(\theta) = \sum_{i=1}^k \left(n_i \ln \sigma_i^2 + \frac{1}{\sigma_i^2} \|y_i - X_i \alpha\|^2 \right) \Rightarrow \min_{\theta \in \Lambda}. \quad (4.34)$$

Начнем с установления условий корректности задачи оптимизации (4.34), т.е. достижимости нижней грани $T(\theta)$ на некомпактном множестве $\Lambda \subset R^{m+k}$. Обозначим

$$Q_i(\alpha) = \|y_i - X_i \alpha\|^2, \quad \hat{Q}_i = \min_{\alpha} Q_i(\alpha), \quad i = 1, \dots, k,$$

где

$$\hat{Q}_i = Q_i(a_i), \quad a_i = (X_i^T X_i)^{-1} X_i^T y_i$$

– оценка метода наименьших квадратов по i -й группе наблюдений; она единственна в силу предположения (4.33).

Теорема 4.2. Пусть $[X_i, y_i]$ – составная матрица $n_i \times (m + 1)$. Тогда, если

$$\text{rank } [X_i, y_i] = m + 1, \quad i = 1, \dots, k \quad (4.35)$$

(т.е. если $\hat{Q}_i > 0$), то задача оптимизации (4.34) корректна, т.е. функция $T(\theta)$ на Λ ограничена снизу; ее нижняя грань достигается, причем если $\theta_s \rightarrow \partial \Lambda$, где $\partial \Lambda$ – граничная точка Λ , то $(\theta_s) \rightarrow +\infty, s \rightarrow \infty$.

Доказательство аналогично доказательству теоремы 4.1.

Далее условия (4.35) считаем выполненными.

Функция (4.34) допускает редукцию, т.е. сводится к более простой.

Продифференцируем ее по σ_i^2 и приравняем производную нулю:

$$\frac{\partial T}{\partial \sigma_i^2} = \frac{n_i}{\sigma_i^2} - \frac{Q_i(\alpha)}{\sigma_i^4} = 0, \quad i = 1, \dots, k. \quad (4.36)$$

Выражая σ_i^3 через $Q_i(\alpha)$ и подставляя это значение в $T(\theta)$, получим редуцированную функцию, зависящую только от α :

$$R(\alpha) = \sum_{i=1}^k n_i \ln \|y_i - X_i \alpha\|^2, \quad \alpha \in R^m. \quad (4.37)$$

Можно показать, что задача минимизации $T(\theta)$ эквивалентна задаче минимизации $R(\alpha)$, а именно, если $\hat{\theta} = (\hat{\alpha}, \hat{\sigma}_1^2, \dots, \hat{\sigma}_k^2)$, есть точка локального (глобального) минимума задачи (4.34), то $\hat{\alpha}$ – точка локального (глобального) минимума задачи $\min R(\alpha)$; наоборот, если $\hat{\alpha}$ – точка локального (глобального) минимума $R(\alpha)$, то точка $\hat{\theta} = (\hat{\alpha}, \hat{\sigma}_1^2, \dots, \hat{\sigma}_k^2)$, где

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{1}{n_i} \|y_i - X_i \hat{\alpha}\|^2, \quad i = 1, \dots, k, \quad (4.38)$$

является точкой локального (глобального) минимума $T(\theta)$. В этой связи далее вместо задачи (4.34) будет решаться задача оптимизации

$$R(\alpha) \Rightarrow \min_{\alpha}. \quad (4.39)$$

Легко видеть, что $R(\alpha) \rightarrow +\infty$ при $\|\alpha\| \rightarrow \infty$.

Прежде всего найдем первые и вторые производные минимизируемой функции (4.37)

$$\frac{1}{2} \frac{\partial R}{\partial \alpha} = \sum_i \frac{n_i}{Q_i(\alpha)} X_i^T (X_i \alpha - y_i),$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial \alpha^2} = \sum_i \frac{n_i}{Q_i(\alpha)} X_i^T X_i - 2 \sum_i \frac{n_i}{Q_i^2(\alpha)} X_i^T (X_i \alpha - y_i) (X_i \alpha - y_i)^T X_i.$$

Рассуждая, как и в двухрежимном случае, построим итеративный процесс минимизации вида

$$a_{s+1} = a_s + \left(\sum \frac{n_i}{Q_i(a_s)} X_i^T X_i \right)^{-1} \left(\sum \frac{n_i}{Q_i(a_s)} X_i^T e_i(a_s) \right),$$

$$s = 0, 1, \dots, \quad (4.40)$$

где $e_i(a_s) = y_i - X_i a_s$.

Строгая релаксационность процесса (4.40) является следствием вогнутости \ln :

$$\begin{aligned} R(a_{s+1}) - R(a_s) &= \sum n_i (\ln Q_i(a_{s+1}) - \ln Q_i(a_s)) = \\ &= \sum n_i \ln \frac{Q_i(a_{s+1})}{Q_i(a_s)} \leq (\sum n_i) \ln \left(\frac{1}{\sum n_i} \sum n_i \frac{Q_i(a_{s+1})}{Q_i(a_s)} \right) = \\ &= n \ln \left(\frac{1}{n} \sum n_i \frac{Q_i(a_{s+1})}{Q_i(a_s)} \right). \end{aligned}$$

Но по определению

$$a_{s+1} = \arg \min_{\alpha} \sum n_i \frac{Q_i(\alpha)}{Q_i(a_s)},$$

поэтому

$$\sum n_i \frac{Q_i(a_{s+1})}{Q_i(a_s)} \leq \sum n_i \frac{Q_i(a_s)}{Q_i(a_s)} = n.$$

С учетом этого получаем $R(a_{s+1}) \leq R(a_s)$. Теперь заметим, что равенство возможно лишь тогда, когда

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} \sum n_i \frac{Q_i(\alpha)}{Q_i(a_s)} \right|_{\alpha=a_s} = 0,$$

что в свою очередь имеет место лишь в случае $q(a_s) = 0$, где q — антиградиент функции R .

Таким образом, нами доказано, что

$$R(a_{s+1}) < R(a_s), \quad q(a_s) \neq 0.$$

Для применения теоремы 1.2, гл. 6 достаточно установить конечность множества стационарных точек $R(\alpha)$. Докажем это утверждение для случая $m = 1$. Тогда

$$\frac{1}{2} \frac{dR}{d\alpha} = \sum \frac{n_i}{Q_i(\alpha)} (\|x_i\|^2 \alpha - (x_i, y_i)) = 0. \quad (4.41)$$

Домножим уравнение (4.41) на $Q_1(\alpha) \cdot Q_2(\alpha) \cdot \dots \cdot Q_k(\alpha) > 0$, получим эквивалентное уравнение, левая часть которого — полином степени $2k - 1$. Нетрудно подсчитать, что коэффициент при этой степени равен $n \|x_1\|^2 \dots \|x_n\|^2 > 0$, а это и означает, что (4.41) при $m = 1$ имеет конечное число решений (не более $2k - 1$). Аналогично показывается, что система $\partial R / \partial \alpha = 0$ имеет конечное число решений и при $m > 1$.

Итак, на основе вышеизложенного можно утверждать, что начиная с любого $a_0 \in R^m$ процесс (4.40) сходится к некоторой стационарной точке a_* : $\partial R(a_*) / \partial \alpha = 0$. Заметим, что мы не утверждаем сходимости к глобальному минимуму $R(\alpha)$.

Перейдем к построению критериев глобальности в случае многорежимной гетероскедастичной регрессии. Прежде всего докажем один факт из теоремы линейной регрессии.

Лемма 4.2. Пусть y – вектор-столбец $n \times 1$, X – матрица $n \times m$, $Q(\alpha) = \|y - X\alpha\|^2$ – сумма квадратов отклонений, $\hat{Q} = \min Q(\alpha)$, $\alpha \in R^m$. Тогда

$$X^T (y - X\alpha)(y - X\alpha)^T X \leq (Q(\alpha) - \hat{Q}) X^T X$$

в том смысле, что разность между правой и левой частями этого неравенства есть неотрицательно определенная матрица, т.е. для любого $v \in R^m$ имеем

$$[(y - X\alpha)^T X v]^2 \leq v^T X^T X v (Q(\alpha) - \hat{Q}), \quad (4.42)$$

причем при $m = 1$ это неравенство обращается в равенство.

Доказательство. Пусть a – оценка МНК, т.е. $Q(a) = \hat{Q}$. Тогда для любого $v \in R^m$ имеем $(y - Xa)^T X v = 0$, поэтому, применяя неравенства Коши – Буняковского, получим

$$\begin{aligned} [(y - X\alpha)^T X v]^2 &= [((y - Xa) - X(\alpha - a))^T X v]^2 = \\ &= [(\alpha - a)^T X^T X v]^2 \leq v^T X^T X v (\alpha - a)^T X^T X (\alpha - a). \end{aligned}$$

В теории линейного регрессионного анализа хорошо известно разложение

$$Q(\alpha) = \hat{Q} + (\alpha - a)^T X^T X (\alpha - a),$$

откуда и следует утверждение леммы. Доказательство равенства в выражении (4.42) в случае $m = 1$ проводится непосредственно.

З а м е ч а н и е. Неравенство (4.42) может рассматриваться как уточнение общего неравенства Коши – Буняковского на случай квадратичной формы специального вида. Без учета специфики $Q(\alpha)$ правая часть этого неравенства имела бы вид $v^T X^T X v \cdot Q(\alpha) > v^T X^T X v (Q(\alpha) - \hat{Q})$, если $\hat{Q} \neq 0$.

Итак, приступим к построению критерия глобальности функции (4.37), т.е. проверке того, когда точка локального минимума $a \in R^m$ является точкой глобального минимума. План построения таков: сначала оценим снизу гессиан минимизируемой функции и найдем выпуклое множество S , на котором он положительно определен. Тогда любая стационарная точка a , принадлежащая этому множеству, будет точкой локального минимума на этом множестве. Оценивая снизу $R(\alpha)$, далее доказываем, что если $\alpha \in S$, то $R(\alpha) \geq R(a)$. Таким образом, получаем, что a – точка глобального минимума.

Оценим гессиан $R(\alpha)$ снизу на основе леммы 4.2; получим

$$\frac{2n_i}{Q_i^2(\alpha)} X_i^T e_i(\alpha) e_i^T(\alpha) X_i \leq \frac{2n_i}{Q_i^2(\alpha)} X_i^T X_i (Q_i(\alpha) - \hat{Q}_i),$$

поэтому

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial \alpha^2} \geq \sum_{i=1}^k \left(\frac{2n_i \hat{Q}_i}{Q_i^2(\alpha)} - \frac{n_i}{Q_i(\alpha)} \right) X_i^T X_i. \quad (4.43)$$

Эта оценка будет служить основой построения критериев глобальности функции $R(\alpha)$.

Сразу можно заметить, что гессиан будет положительно определен, если $2\hat{Q}_i/Q_i^2(\alpha) > 1/Q_i(\alpha)$, т.е. если $Q_i(\alpha) < 2\hat{Q}_i$, $i = 1, \dots, k$. Обозначим

$$S = \{ \alpha: Q_i(\alpha) \leq 2\hat{Q}_i, i = 1, \dots, k \}. \quad (4.44)$$

Это множество выпуклое, как пересечение эллипсоидов. Поэтому, если $a \in S$, причем $\partial R(a)/\partial \alpha = 0$, то a — точка минимума на S , т.е. для любого $\alpha \in S$, $\alpha \neq a$ имеем $R(a) < R(\alpha)$.

Оценим теперь $R(\alpha)$ снизу. Имеем

$$\begin{aligned} R(\alpha) &= \sum n_i \ln Q_i(\alpha) \geq n_j \ln Q_j(\alpha) + \sum_{i \neq j} n_i \ln \hat{Q}_i = \\ &= n_j \ln \frac{Q_j(\alpha)}{\hat{Q}_j} + T, \quad j = 1, \dots, k, \end{aligned}$$

где

$$T = \sum_{i=1}^k n_i \ln \hat{Q}_i.$$

Обозначим $n_{\min} = \min_i n_i$. Тогда из неравенства

$$R(a) \leq n_{\min} \ln 2 + T \quad (4.45)$$

следует, что если a — стационарная точка $R(\alpha)$, то a — точка глобального минимума. Действительно, если неравенство (4.45) имеет место, то $a \in S$, поскольку в противном случае найдется j : $Q_j(\alpha)/\hat{Q}_j \geq 2$ и $R(a) \geq n_j \ln 2 + T \geq n_{\min} \ln 2 + T$, что противоречит (4.45). Но S — выпуклое множество, и поэтому для всех $\alpha \in S$ имеем $R(\alpha) > R(a)$, $\alpha = a$. Значит, a — точка глобального минимума $R(\alpha)$.

Полученная оценка для значения $R(a)$ чересчур занижена. Это следствие требования одновременности выполнения k неравенств $Q_i(a) < 2\hat{Q}_i$.

Ниже будет предложен менее жесткий критерий глобальности $R(\alpha)$. Он основан на более точных оценках гессиана $R(\alpha)$ снизу. Поскольку $Q_i(\alpha) \geq \hat{Q}_i$, то (4.43) будет выполнено, если

$$2 \sum \frac{n_i \hat{Q}_i}{Q_i^2(\alpha)} X_i^T X_i - \sum \frac{n_i}{\hat{Q}_i} X_i^T X_i \geq 0.$$

На основе матричного аналога неравенства Гельдера (2.28), гл. 3 получим

$$\sum \frac{n_i \hat{Q}_i}{Q_i^2(\alpha)} X_i^T X_i \geq \left(\sum \frac{Q_i(\alpha)}{\hat{Q}_i} \right)^{-2} \left(\sum \left(\frac{n_i}{\hat{Q}_i} X_i^T X_i \right)^{1/3} \right)^3;$$

для этого в (2.28), гл. 3 необходимо положить

$$B_i = \frac{n_i}{\hat{Q}_i} X_i^T X_i, \quad a_i = \frac{\hat{Q}_i^2}{Q_i^2(\alpha)}, \quad \theta = -2.$$

Поэтому $\partial^2 R/\partial \alpha^2 > 0$, если

$$\sum \frac{1}{\hat{Q}_i} Q_i(\alpha) < \sqrt{2} \lambda_{\min}^{1/2} (J_1 M^{-1}),$$

где

$$J_1 = \left(\sum \left(\frac{n_i}{\hat{Q}_i} X_i^T X_i \right)^{1/3} \right)^3, \quad M = \sum \frac{n_i}{\hat{Q}_i} X_i^T X_i,$$

λ_{\min} – минимальное собственное число соответствующей матрицы. Тогда соответствующий критерий будет выглядеть следующим образом.

Теорема 4.3. Пусть a – стационарная точка функции $R(\alpha)$, причем

$$\sum e^{(R(a)-T)/n_i} \leq \sqrt{2} \lambda_{\min}^{1/2} (J_1 M^{-1}).$$

Тогда a – единственная точка глобального минимума $R(\alpha)$.

Доказательство. Обозначим

$$P(\alpha) = \sum \frac{Q_i(\alpha)}{\hat{Q}_i}$$

– квадратичный функционал. Оценим $R(\alpha)$ снизу в терминах $P(\alpha)$. Для этого заметим, что

$$\begin{aligned} R(\alpha) &\geq n_j \ln Q_j(\alpha) + \sum_{i \neq j} n_i \ln \hat{Q}_i = \\ &= n_j \ln Q_j(\alpha) + T - n_j \ln \hat{Q}_j, \end{aligned}$$

откуда

$$\frac{Q_j(\alpha)}{\hat{Q}_j} \leq e^{(R(\alpha)-T)/n_j}, \quad j = 1, \dots, k,$$

поэтому, суммируя эти неравенства по j , получим

$$P(\alpha) \leq \sum_{i=1}^k e^{(R(\alpha)-T)/n_i}.$$

Докажем, что множество $S = \{\alpha: R(\alpha) \leq R(a)\}$ одноточечно, что и будет означать глобальность и единственность минимума $R(a)$. Допустим противное: $\alpha \neq a$ и $R(\alpha) \leq R(a)$. Рассмотрим еще одно множество $S_1 = \{\alpha: P(\alpha) < \sqrt{2} \lambda_{\min}^{1/2} (J_1 M^{-1})\}$. На этом множестве по построению функция $R(\alpha)$ строго выпукла (S_1 – выпуклое множество, $\partial^2 R / \partial \alpha^2$ – положительно определенная матрица, $\alpha \in S_1$). Если $\alpha: R(\alpha) \leq R(a)$, то

$$\sum e^{(R(\alpha)-T)/n_i} \leq \sum e^{(R(a)-T)/n_i} < \sqrt{2} \lambda_{\min}^{1/2} (J_1 M^{-1}),$$

т.е. $\alpha \in S_1$. Но из выпуклости $R(\alpha)$ на S_1 следует, что $R(\alpha) > R(a)$. Получили противоречие; теорема доказана.

Распространенный алгоритм минимизации (4.40) можно существенно обобщить. Пусть F – произвольная дважды дифференцируемая функция на $R_+^p = \{x \in R^p: x_1 > 0, \dots, x_p > 0\}$. Допустим, по каждому x_i эта функция возрастает, т.е.

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} > 0, \quad j = 1, \dots, p, \quad x \in R_+^p. \quad (4.46)$$

Предположим к тому же, что эта функция вогнута, т.е. матрица Гессе отри-

цательно определена:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} < 0, \quad x \in R_+^p. \quad (4.47)$$

Рассматриваем следующую функцию:

$$R(\alpha) = F(Q_1(\alpha), Q_2(\alpha), \dots, Q_p(\alpha)), \quad (4.48)$$

где

$$Q_j(\alpha) = \|y_j - X_j \alpha\|^2, \quad j = 1, \dots, p,$$

$y_j \in R^{n_j}$, X_j – матрица полного ранга $n_j \times m$, $\alpha \in R^m$, причем $Q_j(\alpha) > 0$ для любого $\alpha \in R^m$. Рассмотрим следующую задачу минимизации:

$$R(\alpha) \Rightarrow \min, \quad \alpha \in R^m,$$

где $R(\alpha)$ задается выражением (4.48).

Ниже будет построен специальный сходящийся алгоритм минимизации функции (4.48) наподобие (4.12). Введем следующее обозначение:

$$G_j = \frac{\partial F}{\partial x_j}, \quad j = 1, \dots, p.$$

Пусть a_k построено, определим a_{k+1} как вектор, минимизирующий

$$G_1^k Q_1(\alpha) + G_2^k Q_2(\alpha) + \dots + G_p^k Q_p(\alpha), \quad (4.49)$$

где $G_j^k = G_j(Q(a_k)) > 0, j = 1, \dots, p$. Нетрудно видеть, что

$$a_{k+1} = \left[\sum_{j=1}^p G_j^k X_j^T X_j \right]^{-1} \left[\sum_{j=1}^p G_j^k X_j^T y_j \right], \quad k = 0, 1, \dots \quad (4.50)$$

В силу сделанных предположений матрица

$$\sum G_j^k X_j^T X_j$$

положительно определена и поэтому невырождена. Можно показать, что

$$(a_{k+1} - a_k, q_k) > 0, \quad q_k \neq 0, \quad (4.51)$$

где q – антиградиент минимизируемой функции (4.48), т.е. процесс (4.50) является квазиградиентным.

Покажем, что итерации (4.50) понижают значение минимизируемой функции, т.е.

$$R(a_{k+1}) < R(a_k), \quad q_k \neq 0. \quad (4.52)$$

В силу вогнутости функции F имеем

$$\begin{aligned} R(a_{k+1}) - R(a_k) &< \sum_j G_j(Q_j(a_k))(Q(a_{k+1}) - Q(a_k)) = \\ &= \sum_j G_j^k Q_j(a_{k+1}) - \sum_j G_j^k Q_j(a_k) \leq \\ &\leq \sum_j G_j^k Q_j(a_k) - \sum_j G_j^k Q_j(a_k) = 0 \end{aligned}$$

согласно минимизации (4.49), которая имеет место по определению a_{k+1} ; $q_k \neq 0$. С учетом теоремы 1.2, гл. 6 процесс (4.50) сходится.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика. Основы моделирования и первичная обработка данных. – М.: Финансы и статистика, 1983.
2. Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д. Прикладная статистика. Исследование зависимостей. – М.: Финансы и статистика, 1985.
3. Александрян Р.А., Мирзаханян Э.Д. Общая топология. – М.: Высшая школа, 1979.
4. Ашманов С.А. Введение в математическую экономику. – М.: Наука, 1984.
5. Бакельман И.Я., Вернер А.Л., Кантор Б.Е. Введение в геометрию "в целом". – М.: Наука, 1973.
6. Бард Й. Нелинейное оценивание параметров. – М.: Статистика, 1979.
7. Баккенбах Э.Ф., Беллман Р. Неравенства. – М.: Мир, 1965.
8. Беклемишев Д.В. Дополнительные главы линейной алгебры. – М.: Наука, 1983.
9. Болтянский В.Г. Оптимальное управление дискретными системами. – М.: Наука, 1973.
10. Вайнберг М.М. Вариационный метод и метод монотонных операторов в теории нелинейных уравнений. – М.: Наука, 1972.
11. Васильев Ф.П. Лекции по методам решения экстремальных задач. – М.: МГУ, 1974.
12. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. – М.: Наука, 1984.
13. Гасанов И.И., Рикун А.Д. О необходимых и достаточных условиях одноэкстремальности в невыпуклых задачах математического программирования//Журн. выч. мат. и мат. физ. – 1985. – Т. 25, № 6. – С. 818–826.
14. Демиденко Е.З. Нелинейная регрессия//Математические методы решения экономических задач, № 7. – М.: Наука, 1977.
15. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессии. – М.: Финансы и статистика, 1981.
16. Демиденко Е.З. Нелинейная регрессия. Ч. I. Алгоритмы; Ч. II. Программы. – М.: ИМЭМО АН СССР, 1984.
17. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М.: Наука, 1970.
18. Днепровский И.Е. Об одном методе решения задач наилучшего дискретного приближения//Журн. выч. мат. и мат. физ., 1984. – Т. 24, № 10. – С. 1486–1496.
19. Жилинскас А.Г. Глобальная оптимизация: аксиоматика статистических моделей, алгоритмы и применения. – Вильнюс: Москлас, 1986.
20. Залгаллер В.А., Бураго Ю.Д. Геометрические неравенства. – Л.: Наука, 1978.
21. Иванчиков Ю.П., Лотов А.В. Математические модели в экономике. – М.: Наука, 1979.
22. Канторович Л.В., Акилов Г.П. Функциональный анализ. – М.: Наука, 1984.
23. Канторович Л.В., Вулих Б.З., Пинскер А.Г. Функциональный анализ в полупорядоченных пространствах. – М.: Гостехиздат, 1950.
24. Карманов В.Г. Математическое программирование. – М.: Наука, 1986.

25. *Ким К.В., Нестеров Ю.Е., Скоков В.А., Черкасский Б.В.* Эффективный алгоритм вычисления производных и экстремальные задачи // Экономика и мат. методы. – 1984. – Т. XX, вып. 2. – С. 309–318.
26. *Клейнер Г.Б.* Производственные функции. Теория, методы, приложения. – М.: Финансы и статистика, 1985.
27. *Клейнер Г.Б., Николаева Н.Л., Зайдис И.В.* Об оценках коэффициентов регрессии методом наименьших квадратов // Статистика и электронно-вычислительная техника в экономике. Вып. 8. – М.: Статистика, 1975.
28. *Красносельский М.А., Забрейко П.П.* Геометрические методы анализа. – М.: Наука, 1975.
29. *Красносельский М.А., Вайникко Г.М., Забрейко П.П., Рутецкий Я.Б., Стеценко В.Я.* Приближенное решение операторных уравнений. – М.: Наука, 1969.
30. *Курош А.Г.* Курс высшей алгебры. – М.: Наука, 1965.
31. *Ланкастер П.* Теория матриц. – М.: Наука, 1978.
32. *Маршалл А., Олкин И.* Неравенства: теория мажоризации и ее применения. – М.: Мир, 1983.
33. *Мерсов Г.А.* Гарантирующий подход к применению метода наименьших квадратов в нелинейных задачах космической навигации. Препринт. – М.: ИКИ АН СССР, 1981.
34. *Моисеев Н.Н., Иванюков Ю.П., Столярова Е.М.* Методы оптимизации. – М.: Наука, 1978.
35. *Мудров В.И., Кушко В.Л.* Методы обработки измерений. – М.: Советское радио, 1976.
36. *Ортега Дж., Рейнболдт В.* Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. – М.: Наука, 1975.
37. Пакет программ по прикладному статистическому анализу. – М.: ЦЭМИ АН СССР, 1983.
38. *Петровский И.Г.* Лекции об уравнениях с частными производными. – М.: Наука, 1961.
39. *Полак Э.* Численные методы оптимизации: единый подход. – М.: Мир, 1974.
40. *Поляк Б.Т., Цыпкин Я.З.* Оптимальные псевдоградиентные алгоритмы стохастической оптимизации // Докл. АН СССР. – 1980. – Т. 250, № 5. – С. 1084–1087.
41. *Поляк Б.Т.* Введение в теорию оптимизации. – М.: Наука, 1983.
42. *Постников М.М.* Введение в теорию Морса. – М.: Наука, 1971.
43. *Пишечный Б.Н., Данилин Ю.М.* Численные методы в экстремальных задачах. – М.: Наука, 1975.
44. *Рашевский П.К.* Курс дифференциальной геометрии. – М.: Гостехиздат, 1956.
45. *Стронгин Р.Г.* Численные методы в многоэкстремальных задачах. – М.: Наука, 1978.
46. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979.
47. Устойчивые статистические методы оценки данных. – М.: Машиностроение, 1984.
48. *Фихтенгольц Г.М.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. II. – М.: Наука, 1966.
49. Функциональный анализ / Под ред. С.Г. Крейна. – М.: Наука, 1972.
50. *Хьюбер П.* Робастность в статистике. – М.: Мир, 1984.
51. *Четыркин Е.М.* Статистические методы прогнозирования. – М.: Статистика, 1977.
52. *Шилов Г.Е.* Математический анализ. Функции одного переменного. Ч. III. – М.: Наука, 1970.
53. *Шилов Г.Е.* Функции нескольких вещественных переменных. Ч. I–II. – М.: Наука, 1972.
54. *Юдин Д.Б., Гольштейн Е.Г.* Линейное программирование. – М.: Наука, 1969.
55. *BMDP-79* / Ed. by W.J. Dixon, M.V. Brown. – Berkeley; London: University of California Press, 1979.
56. *Brown K.M., Dennis J.E.* Derivative free analogies of the Levenberg-Marquardt and Gauss algorithm for nonlinear least squares approximation // Numerish. Math. – 1972. – V. 18. – P. 279–289.
57. *Dennis J.E.* Non-linear least squares and equations // The State of Art in numerical Analysis. – New York: Academic Press, 1977. – P. 269–312.

58. *Durbin J.* Estimation of parameters in time-series regression models // *J. of Royal Stat. Soc., ser. B.* – 1960. – V. 22. – P. 139–153.
59. *Fedorov V., Vereskov A.* Numerical aspects of some nonstandard regression problems // Working Paper, IIASA, Austria. – 1981.
60. *Fletcher R., Grant J.A., Heblen H.D.* The calculation of linear best L_p -approximation // *Computer J.* – 1971. – V. 14, N 3.
61. *Hartley H.O.* The modified Gauss-Newton method for the fitting of nonlinear regression functions by least squares // *Technometrics.* – 1961. – V. 3, N 2.
62. *Judge G.G., Griffiths W.E., Hill R.C., Lee T.-C.* The Theory and Practice of Econometrics. – New York: J. Wiley, 1980.
63. *Kmenta J.* On investigation of CES production function // *Intern. Economic Review.* – 1967. – V. 8. – P. 180–189.
64. *Levenberg K.* A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares // *Quarterly of Appl. Math.* – 1944. – V. 2, N 2.
65. *Magnus J.R.* Maximum likelihood estimation of the CES model with unknown parameters in the disturbance covariance matrix // *J. of Econometrics.* – 1978. – V. 7, N 3. – P. 281–312.
66. *Marquardt D.W.* An algorithm for least squares estimation of non-linear parameters // *J. Soc. of Appl. Math.* – 1963. – V. 2. – P. 431–441.
67. *Meyer R.R.* Theoretical and computational aspects of nonlinear regressions // *Nonlinear Programming* / Ed. by J.B. Rosen. – New York: Academic Press, 1970.
68. *Oberhoffer W., Kmenta J.* A general procedure for obtaining maximum likelihood estimates in generalized regression models // *Econometrica.* – 1974. – V. 42, N 3. – P. 579–590.
69. *Ralston M.L., Jennrich R.I.* Dud, A Derivative-Free algorithm for nonlinear least squares // *Technometrics.* – 1978. – V. 20, N 1. – P. 7–14.
70. *Taylor W.* The heteroscedastic linear model: exact finite sample results // *Econometrica.* – 1978. – V. 46, N 3. – P. 663–676.
71. *Thursby J.G., Lovell C.A.K.* An investigation of the Kmenta approximation to the CES function // *Intern. Economic Review.* – 1978. – V. 19. – P. 363–377.

Научное издание

ДЕМИДЕНКО Евгений Зямович

ОПТИМИЗАЦИЯ И РЕГРЕССИЯ

Заведующий редакцией *Л.А. Русаков*

Редактор *А.В. Назин*

Художественный редактор *Т.Н. Кольченко*

Технические редакторы *С.В. Геворкян, М.И. Мешкова*

Корректоры *О.А. Бутусова, Н.П. Круглова, Т.В. Обод, Т.А. Печко*

Набор осуществлен в издательстве
на наборно-печатающих автоматах

ИБ № 32738

Сдано в набор 04.08.88. Подписано к печати 12.10.88.

Формат 60 X 90/16. Бумага книжно-журнальная

Гарнитура Пресс-Роман. Печать офсетная

Усл.печ.л. 18,5. Усл.кр.-отг. 18,5. Уч.-изд.л. 19,03

Тираж 6100 экз. Тип. зак. 284. Цена 2 р. 40 к.

Ордена Трудового Красного Знамени
издательство "Наука"

Главная редакция физико-математической литературы
117071 Москва В-71, Ленинский проспект, 15

Четвертая типография издательства "Наука"

630077 г. Новосибирск-77, ул. Станиславского, 25

ABSTRACT

Optimization and Regression by E.Z. Demidenko (Moscow: Nauka, 1989)

E.Z. Demidenko is a doctor of Mathematics and works at one of the Institute of the Academy of Sciences of the USSR as a senior research worker. He is one of the prominent specialist in the USSR in statistics and nonlinear regression analysis. He is the author of the monograph "Linear and Nonlinear Regressions" (1981, 301 pp), which is one of the most quoted book on regression analysis in the USSR.

There are three range of problems in optimization (minimization) theory. The first – the existence of the global minimizer. The second – the recognition of global minimum between local ones. The third – the working out of effective optimization methods. In almost all literature these problems are solved "in local". Particularly only the third range of problems was considered in details earlier.

The book "Optimization and Regression" by E.Z. Demidenko is the first one where the global analysis is presented. So it is a pioneering work in the global optimization theory.

The detailed results are derived in the case of the sum of squares (SS) function, which arises by applying the nonlinear least squares estimation for nonlinear regression. Then the results are generalized to a new class of multiextremal functions, so called decompositive functions, and then to an arbitrary functions with some specific properties.

The commonly used preposition in minimization problems is the existence of the global minimizer. Obviously it may be not exist in the case of continuous function and noncompact prior set of minimization. A constructive approach for solving this problem is considered based on the notion "the infimum in infinity". The according criterion enables to find the conditions of the existence of the global minimizer, or the nonlinear estimator in statistical context. It is also important, that it allows to find a new starting value for an iterative minimization process. The comprehensive analysis of the existence is done for the following families of nonlinear regressions: i) quasilinearized, ii) nonlinear trends (exponential modified, logistic curves), iii) CES production-function and some others.

The main part of the book is devoted to the problems of multiextremality (chapters 2, 3, 4, 5). This theme begins with some dramatic results: it is proved that the probability, that the SS for any nonlinear regression has at least two local minima, is positive (ch. 2).

The investigation of minimization function from multiextremal point of view begins with SS. All criteria have a similar structure. First, the threshold value of the SS by analytic method must be obtained, \overline{SS} . Then if the given value of SS is less than \overline{SS} , then the desired property is fulfilled. For example, if a^* is a local minimizer and $SS(a^*)$ is less than \overline{SS} , then a^* is the global minimizer. There are seven threshold values each characterizing the specific property of the minimization function: local and global convexity, uniextremality and so on.

The analytical investigation of the hessian of the minimization function is played of the important role in the suggested global analysis. Here the general approach for inequalities construction will be helpful. The matrix analogues of Cauchy–Shwarz and Hölder inequalities are presented.

The problems of the construction of special effective algorithms of minimization are also considered (ch. 6, 7). They are based on specific properties of minimization function. Three general approaches are suggested: i) the method of frontier paraboloid, ii) the method of splitting, iii) the method of substitution. Some special methods of SS's minimization for the following nonlinear regressions are considered; i) loglinear, ii) hyperbolic, iii) CES production-function, iv) polilinear and some others.

CONTENTS

Introduction

1. Criterion of Existence

- 1.1. Criterion of the accessibility of the infimum of a function on a noncompact set
- 1.2. Cones
- 1.3. Quasilinearized regressions
- 1.4. Nonlinear trends of exponential types
- 1.5. Production functions

2. Nonexistence and Multiextremality

- 2.1. The nonaccessibility of the infimum of the sum of squares on a noncompact set
- 2.2. The multiextremality of SS for $m = 1$
- 2.3. The multiextremality of SS for $m > 1$
- 2.4. The multistationarity of sum of squares' expectation function

3. Criterion of the Local Convexity

- 3.1. Criterion of the local convexity of sum of squares
- 3.2. A general method for the inequalities' construction
- 3.3. Examples of \overline{SS}_{LC}^i calculation
- 3.4. A priori parameter set reduction

4. Criterion of Unistationarity and Convexity

- 4.1. Criterion of the local unistationarity
- 4.2. Criterion of the global convexity and unistationarity
- 4.3. Generalization. Decompositive functions
- 4.4. Some approaches to the global criteria' construction in general case

5. Convexity and Unistationarity Regions of Sum of Squares in the Sample Space

- 5.1. Convexity's region of SS
- 5.2. Criterion of unistationarity. Cones method

6. Sum of Squares' Minimization Based on Gauss–Newton Method

- 6.1. Gauss–Newton's method
- 6.2. Levenberg–Marquardt's method
- 6.3. Sum of Squares' minimization without derivatives
- 6.4. Criterion of stationarity and sensitive analysis

7. Special Method of Minimization and Some application

- 7.1. General approaches to special methods of minimization's construction
- 7.2. Minimization of the nonquadratic loss function for linear models
- 7.3. Other examples of nonlinear regressions
- 7.4. Heteroscedastic regressions

References

There are 26 figures in the book. The References contains 71 points.

