Návrh experimentov v stochastickej dynamike

Autoreferát dizertačnej práce v odbore 9.1.9 Aplikovaná matematika
odovzdanej Univerzite Komenského v Bratislave

RNDr. Vladimír Lacko

Školiteľ

doc. Mgr. Radoslav Harman, PhD.

Školiteľ-špecialista

prof. RNDr. Andrej Pázman, DrSc.

Pracovisko

Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave

Bratislava, AD 2014

Dizertačná práca bola vypracovaná v dennej forme doktorandského štúdia na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave.

Predkladateľ: **RNDr. Vladimír Lacko**
Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave
Mlynská dolina, 842 48, Bratislava

Školiteľ: **doc. Mgr. Radoslav Harman, PhD.**
Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave
Mlynská dolina, 842 48, Bratislava

Školiteľ-špecialista: **prof. RNDr. Andrej Pázman, DrSc.**
Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave
Mlynská dolina, 842 48, Bratislava

Oponenti:

. . . .
. . . .

. . . .
. . . .

. . . .
. . . .

Obhajoba dizertačnej práce sa koná

dňa . . . . **o** . . . .

na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave,
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava,

pre komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore doktorandského štúdia
9.1.9 Aplikovaná matematika vymenovanou predsedom odborovej komisie
dňa . . . .

Predseda odborovej komisie: prof. RNDr. Marek Fila, DrSc.
Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave
Mlynská dolina, 842 48, Bratislava

Úvod

Mnohé javy, ktorých vlastnosti sú predmetom experimentálneho bádania, majú dynamický, evolučný charakter. V mnohých vedných oblastiach ako fyzika, biológia, medicínna, inžinierstvo ale aj v spoločenskovedných disciplínach môžeme charakter správania sa skúmanej veličiny popísať diferenciálnymi rovnicami.

Napriek tomu, že charakterizácia mnohých fundamentálnych zákonov dobre aproximuje realitu, teoretické a pozorované skutočné hodnoty sa vždy odlišujú, pričom túto odlišnosť pripisujeme nepozorovateľným náhodným chybám. Preto neznáme vlastnosti (parametre diferenciálnych rovníc) odhadujeme.

V štatistike existujú dva principiálne odlišné spôsoby ako uchopiť náhodnosť pozorovaných hodnôt. Nech $\mathcal{L}$ je zákon popisujúci stav veličiny $x(t) = x_{\boldsymbol{\theta}}(t)$ v čase t v závislosti od hodnoty vektora vlastností $\boldsymbol{\theta}$. V prvom, klasickom prístupe predpokladáme, že veličina $x(t)$ spĺňa predpísaný zákon presne a výsledné pozorovania $X(t_i)$ v časoch t_i, $i = 1, \ldots, n$, sú potom výsledkom kontaminácie presných hodnôt $x(t_i)$ zväčša bielym šumom pripisovanému chybe meracieho zariadenia, čiže

$$\begin{cases} \mathcal{L}\left(\frac{\mathrm{d}^k x(t)}{\mathrm{d}t^k}, \frac{\mathrm{d}^{k-1} x(t)}{\mathrm{d}t^{k-1}}, \ldots, \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t}, x(t), t, \boldsymbol{\theta}\right) = 0, \\ X(t_i) = x(t_i) + \varepsilon_i, \ i = 1, \ldots, n. \end{cases} \tag{1}$$

Uvedený prístup možno nájsť v mnohých tradičných publikáciách.

Druhý prístup integruje šum priamo do zákona tým, že predpokladá

$$\mathcal{L}\left(\frac{\mathrm{d}^k X(t)}{\mathrm{d}t^k}, \frac{\mathrm{d}^{k-1} X(t)}{\mathrm{d}t^{k-1}}, \ldots, \frac{\mathrm{d}X(t)}{\mathrm{d}t}, X(t), t, \boldsymbol{\theta}, \text{“šum”}\right) = 0. \tag{2}$$

Na rigoróznu formuláciu prístupu (2) využívame terminológiu stochastického počtu, viď napríklad monografiu [15].

Základný rozdiel medzi situáciou popísanou v (1) a (2) spočíva v tom, že druhý prístup generuje stochastický proces s korelovanými pozorovaniami, ktorý pozorujeme presne, kým prvý prípad potláča prirodzenú vnútornú náhodnosť. Samozrejme, aj v prvom prístupe je možné uvažovať koreláciu medzi pozorovaniami, táto by však bola umelá.

Kapitola 1

Ciele dizertačnej práce

Predložená dizertačná práca sa zaoberá vývojom metód navrhovania experimentov pre procesy popísané Itōovymi stochastickými diferenciálnymi rovnicami (slabé riešenia) v tvare

$$\mathrm{d}X(t) = f_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t, X(t))\mathrm{d}t + \sigma_\beta(t, X(t))\mathrm{d}W(t),\ X(0) = X_0 \tag{1.1}$$

kde $\boldsymbol{\theta}$ je vektor charakteristík procesu, ktorý je predmetom skúmania, β je parameter šumu mimo sféry záujmu, X_0 je neznáma ale pevná počiatočná hodnota a $\{W(t)\}_{t\geq 0}$ je Wienerov proces.

Stochastická diferenciálna rovnica (1.1) je pomerne všeobecná a uvedená oblasť nebola doposiaľ systematicky analyzovaná a dostupná literatúra ponúka iba zopár publikácií zaoberajúcich sa problematikou navrhovania experimentov pre procesy popísa(teľ)né stochastickými diferenciálnymi rovnicami, napríklad [19, 10, 24, 8, 9, 7, 1, 5]. preto sa v predloženej práci obmedzíme na jednoduchšie, lineárne rovnice v tvare

$$\mathrm{d}X(t) = [a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t) + b_{\boldsymbol{\theta},\beta}X(t)]\mathrm{d}t + \sigma_\beta(t)\mathrm{d}W(t), \tag{1.2}$$

čiže $f(t, x) = a(t) + b(t)x$ a $\sigma(t, x) = \sigma(t)$.

Cieľom dizertačnej práce je ...

- **... študovať existenciu optimálnych návrhov experimentov pre procesy popísané rovnicami v tvare** (1.2): Dôkaz existencie optimálnej alokácie časov pozorovania procesu je fundamentálnou otázkou, nakoľko z nej vyplýva opodstatnenosť použitia optimalizačných metód ako aj zmysel samotnej úlohy optimalizácie experimentu. Najčastejším spôsobom, ako zodpovedať uvedenú otázku, je stanovenie podmienok spojitosti Fisherovej informačnej matice na hranici množiny prípustných návrhov $\overline{\mathfrak{T}}_n \setminus \mathfrak{T}_n$; napríklad Sacks a Ylvisaker [19, 20] formulovali spojitosť Fisherovej informačnej matice cez spojitosť funkcionálnych priestorov, pričom sa odvolávali na vlastnosti Hilbertových priestorov s reprodukčnými jadrami. Vo väčšine publikácií, kde optimálne návrhy existujú (napr. [10, 8, 9, 7] a iné), autori uvažujú iba neznáme parametre strednej hodnoty. V prípadoch, kde je neznámy parameter situovaný aj v kovariančnej štruktúre, dochádza už ku komplikáciám, viď [24].
- **... odvodiť asymptotickú Fisherovu informačnú maticu**: Vypočítať optimálne časy pozorovania procesu s korelovanými pozorovaniami pri konečnom výbere je nekonvexný problém, a explicitné riešenia uvádza iba málo publikácií, napríklad [2, 10, 8, 9, 7]. Iní autori buď vyvíjali numerické metódy identifikácie optimálnych alokácií

[18], alebo sa snažili obísť náročnosť uvedenej úlohy budovaním alternatívnych, často asymptotických (v zmysle počtu pozorovaní) metód [19, 20, 21, 22, 23, 4, 25, 3]. V dizertačnej práci tiež obchádzame základnú optimalizačnú úlohu, a to tak, že sa zameriavame na výpočet tzv. ultimátnej efektívnosti [17] (nomenklatúra [7]), kde porovnávame informáciu získanú z konečného návrhu s informáciou, ktorú by sme teoreticky získali pozorovaním celej trajektórie procesu. Ultimátna informácia má v plánovaní experimentov dvojaké využitie: na jednej strane nám poskytuje obraz o tom, do akej miery vyčerpávame totálnu dosiahnuteľnú informáciu a či má vôbec význam optimalizovať experiment, a na strane druhej nám umožňuje určiť, či náklady na ďalšie pozorovanie sú adekvátne eventuálnemu nárastu v množstve získanej informácie [19].

- **... rozšíriť výsledky získané pre lineárne stochastické diferenciálne rovnice v tvare** (1.2) **na všeobecnejšie stochastické diferenciálne rovnice v tvare** (1.1).

Kapitola **2**

Výsledky dizertačnej práce

2.1 Motivácia: analýza neautonómneho nestacionárneho Ornsteinovho-Uhlenbeckovho procesu

Uvažujme Itōov process $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou

$$\mathrm{d}X(t) = \kappa(\bar{X} - X(t))\mathrm{d}t + \sigma(t)\mathrm{d}W(t), \tag{2.1}$$

kde počiatočný stav $X(0) = X_0$ a stacionárna stredná hodnota $\bar{X}$ sú neznáme parametre, $\kappa > 0$ je známa rýchlosť konvergencie k stacionárnej strednej hodnote a $\sigma(t)$ je až na konštantný násobok známa polospojitá deterministická funkcia.

Použitím Itōovej lemy ľahko ukážeme, že

$$\mathcal{E}[X(t)] = \mathrm{e}^{-\kappa t}X_0 + (1 - \mathrm{e}^{-\kappa t})\bar{X},$$

čiže stredná hodnota procesu je lineárnou funkciou neznámych parametrov. Ak teda máme návrh $\boldsymbol{\tau} \in \overline{\mathfrak{T}}_n$ o rozsahu n, potom pozorovania $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})$ spĺňajú lineárny regresný model

$$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau}) = (\mathbf{e}^{-\kappa\boldsymbol{\tau}})X_0 + (\mathbf{1}_n - \mathbf{e}^{-\kappa\boldsymbol{\tau}})\bar{X} + \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\tau}) = \mathbf{F}(\boldsymbol{\tau})\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\tau}), \tag{2.2}$$

kde $\mathbf{F}(\boldsymbol{\tau}) = (\mathbf{e}^{-\kappa\boldsymbol{\tau}}, \mathbf{1}_n - \mathbf{e}^{-\kappa\boldsymbol{\tau}})$ je matica návrhu, $\boldsymbol{\theta} = (X_0, \bar{X})^\mathsf{T}$ je vektor neznámych parametrov a $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\tau}) = (\varepsilon_{t_1}, \ldots, \varepsilon_{t_n})^\mathsf{T}$ je vektor náhodných chýb taký, že

$$\mathcal{E}[\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\tau})] = \mathbf{0}_n \text{ and } \mathcal{V}[\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\tau})] = \mathbf{\Sigma}(\boldsymbol{\tau}). \tag{2.3}$$

Keďže proces $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ je gaussovský, pre výpočet informačnej matice potrebujeme charakterizovať aj druhé momenty pozorovaní.

Lema 1. *Majme vektor pozorovaní $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})$, $\boldsymbol{\tau} \in \overline{\mathfrak{T}}_n$, potom ij-tý prvok, $i \leq j$, kovariančnej matice $\mathbf{\Sigma}(\boldsymbol{\tau})$ definovanej v* (2.3) *má tvar*

$$\begin{aligned} \{\mathbf{\Sigma}(\boldsymbol{\tau})\}_{ij} &= u(t_i)v(t_j), \text{ kde} \\ u(t) &= \mathrm{e}^{-\kappa t}\int_0^t \mathrm{e}^{2\kappa\nu}\sigma^2(\nu)\mathrm{d}\nu \text{ a} \\ v(t) &= \mathrm{e}^{-\kappa t}. \end{aligned}$$

Lema 2. *Kovariančná matica $\mathbf{\Sigma}(\boldsymbol{\tau})$ definovaná v leme 1 je kladne definitná pre každé $\boldsymbol{\tau} \in \mathfrak{T}_n$, $n \geq 2$.*

Z lemy 1 vyplýva, že proces popísaný rovnicou (2.1) má súčinovú kovariančnú štruktúru. Použitím výsledku Harmana a Štulajtera [8] o súčinových kovariančných štruktúrach dostaneme Fisherovu informačnú maticu pre návrh s rozsahom n:

$$\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}) = \begin{pmatrix} \frac{e^{-2\kappa t_1}}{\mathcal{V}[X(t_1)]} & \frac{e^{-\kappa t_1}(1-e^{-\kappa t_1})}{\mathcal{V}[X(t_1)]} \\ \frac{e^{-\kappa t_1}(1-e^{-\kappa t_1})}{\mathcal{V}[X(t_1)]} & \frac{(1-e^{-\kappa t_1})^2}{\mathcal{V}[D(t_1)]} + S(\boldsymbol{\tau}) \end{pmatrix},$$

kde

$$S(\boldsymbol{\tau}) = \sum_{i=2}^{n} \frac{(e^{\kappa t_i} - e^{\kappa t_{i-1}})^2}{e^{2\kappa t_i}\mathcal{V}[X(t_i)] - e^{2\kappa t_{i-1}}\mathcal{V}[X(t_{i-1})]} = \sum_{i=2}^{n} \frac{(e^{\kappa t_i} - e^{\kappa t_{i-1}})^2}{\int_{t_{i-1}}^{t_i} e^{2\kappa\nu}\sigma^2(\nu)\mathrm{d}\nu}.$$

V ďalšom ukážeme, že existuje optimálny návrh o rozsahu n z množiny $\mathfrak{T}_n$. V prvom kroku ukazujeme, že optimálny návrh nie je koncentrovaný do jedného bodu.

Lema 3. *Nech $n \geq 3$ a $\boldsymbol{\tau}_0 = t_n \mathbf{1}_n$. Potom existuje návrh $\boldsymbol{\tau}_1 = (t_1, \ldots, t_n)^\mathsf{T} \in \overline{\mathfrak{T}}_n$ taký, že $t_1 < t_n$ a $\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}_1) \succeq_{\mathrm{L}} \mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}_0)$.*

Keďže optimálny návrh je alokovaný vždy aspoň dvoch odlišných bodoch, na dôkaz existencie optimálnych návrhov v množine $\mathfrak{T}_n$ stačí ukázať, že opakovaným pozorovaním nezískame žiadnu dodatočnú informáciu.

Veta 1. *V lineárnom modeli so strednou hodnotou* (2.2) *a kovariančnou štruktúrou uvedenou v leme 1 vždy existuje Φ-optimálny návrh o rozsahu n, na množine $\mathfrak{T}_n$.*

Veta 2. *V lineárnom modeli so strednou hodnotou* (2.2) *a kovariančnou štruktúrou uvedenou v leme 1, ak je funkcia $\sigma(t)$ nerastúca, potom je optimálne položiť $t_n^* = T^*$.*

Veta 3. *Asymptotická Fisherova informačná matica získaná pozorovaním procesu popísaného rovnicou* (2.1) *v každom čase na $\mathcal{D}$ je*

$$\mathscr{I}_\infty(T_*, T^*) = \begin{pmatrix} \frac{e^{-2\kappa T_*}}{\mathcal{V}[X(T_*)]} & \frac{e^{-\kappa T_*}(1-e^{-\kappa T_*})}{\mathcal{V}[X(T_*)]} \\ \frac{e^{-\kappa T_*}(1-e^{-\kappa T_*})}{\mathcal{V}[X(T_*)]} & \frac{(1-e^{-\kappa T_*})^2}{\mathcal{V}[X(T_*)]} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \kappa^2 \int_{T_*}^{T^*} \frac{\mathrm{d}\nu}{\sigma^2(\nu)}.$$

*Navyše, pre ľubovoľný návrh $\boldsymbol{\tau} = (t_1, \ldots, t_n)^\mathsf{T} \in \mathfrak{T}_n$, kde $T_* \leq t_1$ a $t_n \leq T^*$, platí: **i)** $S(\boldsymbol{\tau}) \leq S_\infty(T_*, T^*)$, a **ii)** $\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}) \preceq_{\mathrm{L}} \mathscr{I}_\infty(t_1, t_2) \preceq_{\mathrm{L}} \mathscr{I}_\infty(T_*, T^*)$.*

Z vety 3 vyplýva, že optimálne časy pozorovania procesu sú viac koncentrované v oblastiach s nízkou úrovňou volatility, čo má zrejmú fyzikálnu interpretáciu, ktorú v práci uvádzame spolu s príkladom.

2.2 Výsledky pre všeobecné lineárne stochastické diferenciálne rovnice

2.2.1 Model a jeho vlastnosti

Predpokladajme, že pozorujeme proces $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ popísaný lineárnou Itōovou stochastickou diferenciálnou rovnicou v tvare

$$\begin{aligned} \mathrm{d}X(t) &= [a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t) + b_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)X(t)]\mathrm{d}t + \sigma_\beta(t)\mathrm{d}W(t) \\ &= f_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t, X(t))\mathrm{d}t + \sigma_\beta(t)\mathrm{d}W(t), \\ X(0) &= X_0 \in \mathbb{R} \text{ je pevné.} \end{aligned} \tag{2.4}$$

Naše základné predpoklady týkajúce sa modelu sú: existujú derivácie funkcií $f_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t,x)$ a $\sigma_\beta(t)$ vzhľadom na neznámy parameter $\boldsymbol{\vartheta} = (X_0, \boldsymbol{\theta}^\top, \beta)^\top \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}^{m-2}\times\mathbb{R}$, funkcie $a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)$, $\frac{\partial a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}}$, $b_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)$, $\frac{\partial b_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}}$, $\sigma_\beta(t)$ a $\sigma^2_\beta(t)$ sú integrovateľné vzhľadom na t na intervale $[0, T^*]$, a $\sigma_\beta(t)$ je kladná takmer všade vzhľadom na Lebesgueovú mieru na reálnej priamke.

Kľúčom ku mnohým odpovediam a dôkazom nasledujúcich tvrdení, ktoré práca dáva, je fakt, že rovnica (2.4) generuje markovovský gaussovský proces. To nám umožní rozpísať Fisherovu informačnú maticu pre analýzy veľmi vhodným spôsobom:

Lema 4. *Nech $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ s pevným $X(0)$ je $\boldsymbol{\vartheta}$-parametrizovaný markovský proces so spojitým časom a gaussovskou prechodovou hustotou. Potom pre každý návrh $\boldsymbol{\tau} \in \overline{\mathfrak{T}}_n$, Fisherova informačná matica pre $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})$ má tvar*

$$\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*) = \mathscr{I}_{X(t_1)|X(0)}(\boldsymbol{\vartheta}^*) + \sum_{i=2}^{n} \mathcal{E}_{X(t_{i-1})}\left[\mathscr{I}_{X(t_i)|X(t_{i-1})}(\boldsymbol{\vartheta}^*)\right],$$

kde $\mathscr{I}_{X(t_i)|X(t_{i-1})}(\boldsymbol{\vartheta}^*)$ je Fisherova informačná matica pre $X(t_i)$ podmienené hodnotou $X(t_{i-1})$ a $\mathcal{E}_{X(t_{i-1})}[\cdot]$ je očakávanie vzhľadom na náhodnú veličinu $X(t_{i-1})$.

Lema 4 platí aj vo všeobecnejšej situácii, kedy prechodová hustota spĺňa tradičné podmienky regularity, a to aj v prípadoch, kedy pozorujeme viacrozmerný stochastický proces.

Základom pre hlbšiu analýzu procesu $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ z hľadiska informácie sú jeho pravdepodobnostné vlastnosti. Zrejme v každom čase t môžeme sledovaný proces zapísať v tvare $X(t) \mid X(t_0) = \mathcal{E}[X(t) \mid X(t_0)] + \varepsilon(t) \mid X(t_0)$. Ak $B(t)$ je ľubovoľná primitívna funkcia k funkcii $b(t)$, potom

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\boldsymbol{\theta},\beta}[X(t) \mid X(t_0)] &= \mathrm{e}^{B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)-B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t_0)}X(t_0) + \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)-B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(\nu)}a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(\nu)\mathrm{d}\nu, \\ \varepsilon(t) \mid X(t_0) &= \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)-B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(\nu)}\sigma_\beta(\nu)\mathrm{d}W(\nu) \end{aligned}$$

a z Itōovej izometrie vyplýva

$$\mathcal{V}_{\boldsymbol{\theta},\beta}[X(t) \mid X(t_0)] = \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{2[B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)-B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(\nu)]}\sigma^2_\beta(\nu)\mathrm{d}\nu.$$

Aby sme si utvorili celkový obraz o $\{X(t)\}_{t\geq 0}$, dokázali sme nasledujúce pomocné tvrdenie:

Lema 5. *Nech $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou* (2.4). *Potom pre ľubovoľné t_1 a t_2, $t_2 \geq t_1 \geq 0$,*

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{\boldsymbol{\theta},\beta}[X(t_1), X(t_2)] &= u(t_1)v(t_2), \ \textit{kde} \\ u_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t) &= \mathrm{e}^{B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)} \int_0^t \mathrm{e}^{-2B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(\nu)}\sigma^2_\beta(\nu)\mathrm{d}\nu, \\ v_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t) &= \mathrm{e}^{B_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)}. \end{aligned}$$

Čiže problém návrhu experimentu pre proces (2.4) sme pretransformovali na úlohu návrhu experimentu pre gaussovský nelineárny regresný model

$$\forall_{\boldsymbol{\tau}\in\overline{\mathfrak{T}}_n}\ \boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau}) \sim \mathcal{N}\Big(\mathcal{E}_{X_0,\boldsymbol{\theta},\beta}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})], \mathcal{V}_{\boldsymbol{\theta},\beta}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})]\Big)$$

Lema 6. *Nech $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou* (2.4) *a $\|\cdot\|$ je metrika na $\mathbb{R}^n$. Pre každý návrh $\boldsymbol{\tau}_0 \in \overline{\mathfrak{T}}_n$ a $\delta > 0$ existuje návrh $\boldsymbol{\tau} \in \mathfrak{T}_n$ taký, že $\|\boldsymbol{\tau}_0 - \boldsymbol{\tau}\| < \delta$ a $\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*) \succeq_{\mathrm{L}} \mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}_0, \boldsymbol{\vartheta}^*)$. Špeciálne, ak návrh $\boldsymbol{\tau}_0$ patrí do hraničnej množiny $\overline{\mathfrak{T}}_n \setminus \mathfrak{T}_n$, potom $\boldsymbol{\tau}_0$ je dominovaný ľubovoľným návrhom $\boldsymbol{\tau} \in \mathfrak{T}_n$, kde $t_1 = \{\boldsymbol{\tau}_0\}_1$ a $t_i = \{\boldsymbol{\tau}_0\}_i$ ak $\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i > \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1}$.*

Dôkaz lemy 6 je založený na markovovskosti procesu $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ a na skutočnosti, že $\lim_{\Delta\to 0} \Pr[X(t+\Delta) = X(t)] = 1$, a preto uvedený výsledok môžeme zovšeobecniť na širšiu triedu procesov, podobne ako v prípade lemy 4.

Keďže proces $\{X(t)\}$, ktorý rieši rovnicu (2.4), je gaussovský, Fisherova informačná matica má tvar

$$\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*) = \begin{pmatrix} \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}} & \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}\beta} \\ \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\beta\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}} & \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\beta\beta} \end{pmatrix},$$

kde

$$\begin{aligned}\{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2} = &\left(\frac{\partial \mathcal{E}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})]}{\partial \boldsymbol{\alpha}_1} \mathcal{V}^{-1}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})] \frac{\partial \mathcal{E}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})]}{\partial \boldsymbol{\alpha}_2^{\mathsf{T}}}\right)\Bigg|_{\boldsymbol{\vartheta}^*} \\ &+ \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left\{\mathcal{V}^{-1}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})] \frac{\partial \mathcal{V}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})]}{\partial \boldsymbol{\alpha}_1} \mathcal{V}^{-1}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})] \frac{\partial \mathcal{V}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\tau})]}{\partial \boldsymbol{\alpha}_2^{\mathsf{T}}}\right\}\Bigg|_{\boldsymbol{\vartheta}^*}\end{aligned} \tag{2.5}$$

a $\boldsymbol{\vartheta}^*$ je prvotný odhad skutočnej hodnoty neznámeho parametra [14].

Veta 4. *Ak je počiatočná hodnota X_0 stochastickej diferenciálnej rovnice* (2.4) *jediným neznámym parametrom, potom je optimálne položiť $t_1 = T_*$ bez ohľadu na rozsah návrhu. Odpovedajúca variancia odhadu je*

$$\mathcal{V}[\hat{X}_0] = \int_0^{T_*} \mathrm{e}^{2[B(0)-B(\nu)]}\sigma^2(\nu)\mathrm{d}\nu.$$

Dôležitým predpokladom pre platnosť predchádzajúcej vety je absencia počiatočnej hodnoty v koeficientoch stochastickej diferenciálnej rovnice.

2.2.2 Existencia lokálne optimálnych návrhov

Ťažkosti s existenciou optimálnych návrhov, a to nielen pre uvažovanú triedu procesov, ale pre modely s korelovanými pozorovaniami vo všeobecnosti, vznikajú, keď Fisherova informačná matica $\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ nie je spojitá v hraničných bodoch $\overline{\mathfrak{T}}_n \setminus \mathfrak{T}_n$. To zdôrazňuje dôležitosť asymptotických vlastností Fisherovej informačnej matice. Samozrejme, špecifikáciou informačnej funkcie Φ, t. j., miera informácie je definovaná hodnotou $\Phi[\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)]$, môžeme potlačiť vplyv nespojitosti Fisherovej informačnej matice, preto sa zaoberáme otázkou existencie optimálnych návrhov v "silnom zmysle", čiže sa pýtame, či pre každý bod z hraničnej množiny $\boldsymbol{\tau}_0 \in \overline{\mathfrak{T}}_n \setminus \mathfrak{T}_n$ existuje návrh $\boldsymbol{\tau} \in \mathfrak{T}_n$ taký, že pre ľubovoľnú postupnosť návrhov $\{\boldsymbol{\tau}^{(k)}\}_k$ on $\mathfrak{T}_n$, kde $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{\tau}^{(k)} = \boldsymbol{\tau}_0$, Fisherova informačná matica $\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ loewnerovsky dominuje maticu $\lim_{k\to\infty} \mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}^{(k)}, \boldsymbol{\vartheta}^*)$. To znamená, že ak je splnená podmienka existencie optimálneho návrhu v silnom zmysle, potom existuje optimálny návrh bez ohľadu na výber informačnej funkcie.

Pomocou lemy 4 môžeme preskúmať limitné vlastnosti Fisherovej informačnej matice pre podkladovú stochastickú diferenciálnu rovnicu (2.4):

Lema 7. *Nech $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou* (2.4) *a $\boldsymbol{\vartheta}^*$ je prvotný odhad skutočnej hodnoty parametra $\boldsymbol{\vartheta}$. Potom, pre ľubovoľné konštanty π_1 and π_2,*

$$\lim_{\Delta\to 0}\left(\mathcal{E}_{X(t+\pi_1\Delta)}\left[\mathscr{I}_{X(t+\pi_2\Delta)|X(t+\pi_1\Delta)}(\boldsymbol{\vartheta}^*)\right] - \mathscr{I}_{\infty}(t, \boldsymbol{\vartheta}^*)(\pi_2 - \pi_1)\Delta - \mathscr{O}(t, \boldsymbol{\vartheta}^*)\right) = \mathbf{0}_{m\times m},$$

kde

$$\mathscr{I}_\infty(t,\boldsymbol{\vartheta}^*) = \left.\frac{\frac{\partial f_{\boldsymbol{\vartheta}}(t,x)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}}\Big|_{x=\mathcal{E}[X(t)]} \frac{\partial f_{\boldsymbol{\vartheta}}(t,x)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}^\mathsf{T}}\Big|_{x=\mathcal{E}[X(t)]} + \frac{\partial b_{\boldsymbol{\vartheta}}(t)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}} \frac{\partial b_{\boldsymbol{\vartheta}}(t)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}^\mathsf{T}} \mathcal{V}_{\boldsymbol{\vartheta}}[X(t)]}{\sigma_\beta^2(t)}\right|_{\boldsymbol{\vartheta}^*}$$

a

$$\mathscr{O}(t,\boldsymbol{\vartheta}^*) = \frac{1}{2} \frac{\partial \ln \sigma_\beta^2(t)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}} \frac{\partial \ln \sigma_\beta^2(t)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}^\mathsf{T}}\Bigg|_{\boldsymbol{\vartheta}^*}.$$

Keďže volatilita $\sigma(t)$ závisí výhradne na parametri β, podľa lemy 7 jediný prvok Fisherovej informačnej matice, ktorý potenciálne nie je spojitý na hraničnej množine, je diagonálny prvok $\{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau},\boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\beta\beta}$. Preto platí nasledujúca veta:

Veta 5. *Ak β nie je neznámy parameter stochastickej diferenciálnej rovnice* (2.4)*, potom optimálny návrh pre odhad parametra $\boldsymbol{\vartheta} = \boldsymbol{\vartheta}_1$ existuje v silnom zmysle, a to pre každé n a $\boldsymbol{\vartheta}^*$.*

Technika dôkazu vety 5 môže byť aplikovaná aj keď $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_\mathcal{E}^\mathsf{T}, \boldsymbol{\theta}_\mathcal{V}^\mathsf{T})^\mathsf{T}$, kde $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}_\mathcal{V}}\mathcal{E}[X(t)] = \frac{\partial}{\partial \beta}\mathcal{E}[X(t)] = 0$ a $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}_\mathcal{E}}\mathcal{V}[X(t)] = \mathbf{0}$. Potom Fisherova informácia o $(X_0, \boldsymbol{\theta}_\mathcal{E}^\mathsf{T})^\mathsf{T}$ vyplývajúca zo Schurovho doplnku je rovná bloku Fisherovej informačnej matice $\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau},\boldsymbol{\vartheta}^*)$ zodpovedajúcej $(X_0, \boldsymbol{\theta}_\mathcal{E}^\mathsf{T})^\mathsf{T}$. Tento blok je však spojitý, a teda optimálny návrh pre odhad $(X_0, \boldsymbol{\theta}_\mathcal{E}^\mathsf{T})^\mathsf{T}$ existuje v silnom zmysle.

Vo všobecnejšej situácii, za predpokladu korelácie pozorovaní je otázka existencie optimálnych návrhov komplexný problém, a to hlavne z dôvodu nekonvexnosti informácie.

Jednou z možností ako preskúmať, či sa supremálna informácia dosahuje pri konvergencii postupnosti návrhov k hraničnej množine, je zamerať sa na lokálne správanie sa Fisherovej informácie na hraničnej množine $\overline{\mathfrak{T}}_n \setminus \mathfrak{T}_n$. Na tento účel môžeme použiť pojem smerovej derivácie [16]. V oblasti navrhovania experimentov, pre konvexné množiny, pre ξ a ζ dané je smerová derivácia (maticovej/skalárnej) funkcie $\boldsymbol{h}$ v bode $\boldsymbol{\xi}$ a smere $\boldsymbol{\zeta}$ zvyčajne definovaná ako

$$\partial \boldsymbol{h}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}-\boldsymbol{\xi}) = \lim_{\Delta \searrow 0} \frac{\boldsymbol{h}[\boldsymbol{\xi} + \Delta(\boldsymbol{\zeta}-\boldsymbol{\xi})] - \lim_{\Delta\searrow 0} \boldsymbol{h}[\boldsymbol{\xi} + \Delta(\boldsymbol{\zeta}-\boldsymbol{\xi})]}{\Delta}.$$

Uvedená smerová derivácia je dodefinovaná pre inštancie, kedy funkcia $\boldsymbol{h}$ nie je spojitá v bode ξ.

Predpoklady modelu všakdávajú určité obmedzenia na výber prípustných smerov. Pre ľubovoľný hraničný bod $\boldsymbol{\tau}_0 \in \overline{\mathfrak{T}}_n \setminus \mathfrak{T}_n$ skonštruujeme prípustný smer $\boldsymbol{\tau} = (t_1, \ldots, t_n)^\mathsf{T}$ tak, že vezmeme $t_i = \{\boldsymbol{\tau}_0\}_i + \pi_i$, $i = 1, \ldots, n$, kde $\pi_i = 0$ if $\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i > \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1}$, a vezmeme $\pi_i > \pi_{i-1} \geq 0$ ak $\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i = \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1}$ a $t_i > t_{i-1}$. Ďalej vyžadujeme, aby $\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i + \pi_i > \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1} + \pi_{i-1}$. Pre Fisherovu informačnú maticu potom môžeme definovať

$$\partial \mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}_0, \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\vartheta}^*) = \lim_{\Delta\searrow 0} \frac{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}_0 + \Delta\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\vartheta}^*) - \lim_{\Delta\searrow 0} \mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}_0 + \Delta\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\vartheta}^*)}{\Delta}.$$

Vektor $\boldsymbol{\tau}_0 + \Delta\boldsymbol{\pi}$ má ostro rastúce zložky a konverguje k $\boldsymbol{\tau}_0$ pre $\Delta \to 0$. Navyše, smerová derivácia $\partial\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}_0, \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ je pozitívne homogénna v $\boldsymbol{\pi}$, a preto podmienka $\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i + \pi_i > \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1} + \pi_{i-1}$ nie je nevyhnutná, keďže pre ľubovoľne malé Δ sú zložky vektora $\boldsymbol{\tau}_0 + \Delta\boldsymbol{\pi}$ ostro rastúce. Postačuje teda slabšia podmienka na výber smeru $\boldsymbol{\pi}$:

$$\boldsymbol{\pi} = \begin{cases} 0, & \{\boldsymbol{\tau}_0\}_i > \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1} \\ \pi_i > \pi_{i-1}, & \{\boldsymbol{\tau}_0\}_i = \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1} \end{cases}.$$

Využitím modifikovanej smerovej derivácie sme dokázali nasledujúcu vetu:

Veta 6. *Nech* $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ *je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou* (2.4) *a* $\boldsymbol{\vartheta}^*$ *je prvotný odhad skutočnej hodnoty parametra* $\boldsymbol{\vartheta}$*. Ak pre hraničný návrh* $\boldsymbol{\tau}_0 \in \overline{\mathfrak{T}}_n \setminus \mathfrak{T}_n$ *existuje vektor* $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\tau}_0)$ *nezáporných konštánt taký, že matica*

$$\mathscr{Z}(\boldsymbol{\tau}_0, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\vartheta}^*) = \sum_{i=1, \{\boldsymbol{\tau}_0\}_i = \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1}}^{n} \alpha_i \begin{pmatrix} \{\mathscr{I}_\infty(\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\theta}} & \{\mathscr{I}_\infty(\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\theta}\beta} \\ \{\mathscr{I}_\infty(\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\beta\boldsymbol{\theta}} & \{\mathscr{I}_\infty(\{\boldsymbol{\tau}_0\}_i, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\beta\beta} \end{pmatrix}$$

je kladne definitná, potom sa supremálna informácia nedosahuje, keď konvergujeme k $\boldsymbol{\tau}_0$*, a to bez ohľadu na voľbu informačnej funkcie.*

Poznamenávame, že matica $\mathscr{I}_\infty(t, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ má hodnosť najviac dva. Zo subaditivity hodnosti matice ako funkcie vyplýva, že hodnosť matice $\mathscr{Z}(\boldsymbol{\tau}_0, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ je najviac dvojnásobok kardinality množiny $\{i : \{\boldsymbol{\tau}_0\}_i \neq \{\boldsymbol{\tau}_0\}_{i-1}\}$. Veta 6 je preto užitočná najmô v prípadoch, kedy sa overuje existencia optimálnych návrhov v silnom zmysle a $\dim(\boldsymbol{\theta}) = 1$ ($\dim(\boldsymbol{\vartheta}) = 3$). Napriek tomu môže táto veta dať určité indikácie aj pre vyššie dimenzie parametra $\boldsymbol{\theta}$.

2.2.3 Ultimátna efektívnosť návrhov

Definícia ultimátnej efektívnosti tak, ako je uvedená v článku [17] je aplikovateľná iba ak je $\lim_{n\to\infty} \Phi[\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}, \boldsymbol{\vartheta}^*)]$ konečná, čo v našej situácii, kde parameter β je konzistentne odhadnuteľný, nemusí platiť. Preto sme sa zamerali na subparameter $\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}$: Vo všeobecnosti, ak if $\boldsymbol{\vartheta} = (\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}^\mathsf{T}, \boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}^\mathsf{T})^\mathsf{T}$ je delenie parametra na dva subparametre a $\boldsymbol{\tau} \in \mathfrak{T}_n$, potom Fisherova informačná matica $\mathscr{I}_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ zodpovedajúca $\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}$ je daná Schurovým doplnkom

$$\mathscr{I}_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*) = \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}} - \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}} \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}^-_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}} \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}},$$

kde $\{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}^-_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}}$ je ľubovoľná zovšeobecnená inverzia matice $\{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}}$. Navyše Schurov doplnok zachováva loewnerovske usporiadanie matíc [11], preto:

Tvrdenie 1. *Ak optimálny návrh pre odhad parametra* $\boldsymbol{\vartheta}$ *existuje v silnom zmysle, potom optimálny návrh pre odhad parametra* $\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}$ *tiež existuje v silnom zmysle.*

Definícia 1 (Modifikácia definície ultimátnej informácie)**.** *Nech* $\{\boldsymbol{\tau}^{(n)}\}_{n\geq m} \in \mathfrak{C}_{\mathcal{D}}$ *a nech* $\boldsymbol{\vartheta} = (\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}^\mathsf{T}, \boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}^\mathsf{T})^\mathsf{T}$ *je rozdelenie neznámeho parametra, pre ktoré platí*

$$\lambda_{\max}\left(\{\mathscr{I}_\infty(\boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}}\right) < \infty,$$

$\lambda_{\max}$ *označuje najväčšie vlastné číslo, a*

$$\{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}} \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}^-_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}} \{\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}, \boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{II}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}} \to \mathbf{0}_{\dim(\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}})\times\dim(\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}})}, \tag{2.6}$$

ako $n \to \infty$*. Potom (lokálna) ultimátna efektívnosť návrhu* $\boldsymbol{\tau} \in \mathfrak{T}_n$ *pre odhad parametra* $\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}$ *vzhľadom na informačnú funkciu* Φ*, skrátene (lokálna) ultimátna* Φ*-efektívnosť, je pomer*

$$\operatorname{ueff}(\boldsymbol{\tau} \mid \Phi, \boldsymbol{\vartheta}^*) = \frac{\Phi[\mathscr{I}_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\vartheta}^*)]}{\Phi[\{\mathscr{I}_\infty(\boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}\boldsymbol{\vartheta}_{\mathrm{I}}}]}.$$

Z lemy 4 a lemy 7 sme dostali:

Veta 7. *Nech* $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ *je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou* (2.4) *a nech* $\{\boldsymbol{\tau}^{(n)}\}_{n\geq m} \in \mathfrak{C}_{\mathcal{D}}$*. Potom*

$$\lim_{n\to\infty} \left(\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}, \boldsymbol{\vartheta}^*) - \mathscr{I}_\infty(\boldsymbol{\vartheta}^*) - \sum_{i=2}^{n} \mathscr{O}(t_i, \boldsymbol{\vartheta}^*) \right) = \mathbf{0}_{m\times m},$$

kde

$$\mathscr{I}_\infty(\boldsymbol{\vartheta}^*) = \frac{\frac{\partial \mathcal{E}[X(T_*)]}{\partial \boldsymbol{\vartheta}} \frac{\partial \mathcal{E}[X(T_*)]}{\partial \boldsymbol{\vartheta}^\mathsf{T}}}{\mathcal{V}[X(T_*)]}\Bigg|_{\boldsymbol{\vartheta}^*} + \frac{1}{2}\frac{\partial \ln \mathcal{V}[X(T_*)]}{\partial \boldsymbol{\vartheta}} \frac{\partial \ln \mathcal{V}[X(T_*)]}{\partial \boldsymbol{\vartheta}^\mathsf{T}}\Bigg|_{\boldsymbol{\vartheta}^*} + \int_{T_*}^{T^*} \mathscr{I}_\infty(t, \boldsymbol{\vartheta}^*)\mathrm{d}t,$$

a $\mathscr{I}_\infty(t, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ *a* $\mathscr{O}(t, \boldsymbol{\vartheta}^*)$ *sú definované v leme 7.*

Keďže parameter β je konzistentne odhadnuteľný, použitím predchádzajúcej vety a v súlade s definíciou 1 vieme vypočítať ultimátnu Φ-efektívnosť návrhov pre subparameter $\boldsymbol{\vartheta}_\mathrm{I} = (X_0, \boldsymbol{\theta}^\mathsf{T})^\mathsf{T}$.

2.2.4 Procesy Ornsteinovho-Uhlenbeckovho typu

Predchádzajúce výsledky sa síce vzťahujú na lineárne stochastické diferenciálne rovnice, otázkou však je možnosť rozšírenia výsledkov aj na iné, nelineárne rovnice. Motiváciou tu je hlavne Fisherova-Neymannova veta o faktorizácii o postačujúcich štatistikách, ktorá nás doviedla k nasledujúcej definícii:

Definícia 2. *Nech* $\mu_{\boldsymbol{\theta}\beta}(t, y)$ *a* $\gamma_\beta(t, y)$ *sú dostatočne hladké funkciea nech proces* $\{Y(t)\}_{t\geq 0}$ *je popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou*

$$\mathrm{d}Y(t) = \mu_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t, Y(t))\mathrm{d}t + \gamma_\beta(t, Y(t))\mathrm{d}W(t).$$

Ak existujú dostatočne hladké funkcie $a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)$, $b_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)$, $\sigma_\beta(t)$ *a* $\varphi(t, y)$, *kde* φ *je bijektívna v* y *a* $\frac{\partial \varphi(t,y)}{\partial \boldsymbol{\vartheta}} = \mathbf{0}_m$ *pre všetky* $t \geq 0$ *a* $y \in \mathbb{R}$, *také, že proces* $\{X(t)\}_{t\geq 0} = \{\varphi(t, Y(t))\}_{t\geq 0}$ *je popísaný rovnicou*

$$\mathrm{d}X(t) = [a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t) + b_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)X(t)]\mathrm{d}t + \sigma_\beta(t)\mathrm{d}W(t),$$

potom hovoríme, že proces $\{Y(t)\}_{\geq 0}$ *je Ornsteinovho-Uhlenbeckovho typu s asociovanými koeficientmi* $a(t)$, $b(t)$ *a* $\sigma(t)$. *Tento fakt označujeme symbolom* $\{Y(t)\} \in \mathcal{OU}_{a(t),b(t),\sigma(t)}$.

Veta 8. *Nech* $\{Y(t)\}_{t\geq 0}$ *je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou*

$$\mathrm{d}Y(t) = \mu(t, Y(t))\mathrm{d}t + \sigma(t)g(t, Y(t))\mathrm{d}W(t),$$

kde funkcie $\mu(t, y)$ *and* $g(t, y)$ *sú dostatočne hladké a* $\frac{\partial g(t,y)}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0$ *pre všetky* $t \geq 0$ *a* $y \in \mathbb{R}$. *Ak je splnená podmienka*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \frac{\mathrm{d}y}{g(t,y)} = a(t) + b(t)\int \frac{\mathrm{d}y}{g(t,y)} + \frac{1}{2}\sigma^2(t)\frac{\partial g(t,y)}{\partial y} - \frac{\mu(t,y)}{g(t,y)}$$

pre nejaké funkcie $a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)$ *a* $b_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t)$, *potom* $\{Y(t)\}_{t\geq 0} \in \mathcal{OU}_{a_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t),b_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t),\sigma_\beta(t)}$.

Dôsledok 1. *Nech* $\{Y(t)\}_{t\geq 0} \in \mathcal{OU}_{a_{\boldsymbol{\theta},\beta},b_{\boldsymbol{\theta},\beta},\sigma_\beta}$ *je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou*

$$\mathrm{d}Y(t) = \mu_{\boldsymbol{\theta},\beta}(Y(t))\mathrm{d}t + \sigma_\beta g(Y(t))\mathrm{d}W(t)$$

a nech $\mu(y)$ *je dané. Potom* $g(y)$ *rieši obyčajnú diferenciálnu rovnicu*

$$\left(b - \frac{\partial \mu(y)}{\partial y}\right)g(y) + \mu(y)\frac{\partial g(y)}{\partial y} + \frac{1}{2}\sigma^2 g^2(y)\frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} = 0.$$

2.2.5 Príklad aplikácie výsledkov na Gompertzovom rastovom modeli

V Gompertzovom rastovom modeli [6] je očakávaná veľkosť nádoru $Y_{\theta_1,\theta_2}(t)$ riešením obyčajnej diferenciálnej rovnice

$$\frac{\mathrm{d}Y(t)}{\mathrm{d}t} = \theta_2 Y(t) - \theta_1 Y(t)\ln Y(t),\ Y(0) = Y_0 \text{ známe,} \tag{2.7}$$

kde faktor spomaľujúci rast θ_1 a vnútorná miera rastu θ_2 sú neznáme parametre v sfére záujmu, a počiatočná veľkosť Y_0 je zvyčajne známa a získaná z prvej detekcie (pri pokusoch z prvej infekcie). Riešenie rovnice (2.7) je známe v explicitnej uzavretej podobne:

$$Y_{\theta_1,\theta_2}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{e}^{-\theta_1 t}\ln Y_0 + (1-\mathrm{e}^{-\theta_1 t})\frac{\theta_2}{\theta_1}}, \tag{2.8}$$

čo vysvetľuje popularitu modlu v aplikáciách.

Lokálne D-optimálny návrh Gomperzovho modelu, kde očakávaná veľkosť nádoru (2.8) je kontaminovaná homoskedastickým bielym šumom, bol analyzovaný v článku [12].

Gompertzov model je možné prepísať do stochastickej diferenciálnej rovnice nasledovne [13]:

$$\mathrm{d}Y(t) = [\theta_2 Y(t) - \theta_1 Y(t)\ln Y(t)]\mathrm{d}t + \beta Y(t)\mathrm{d}W(t),\ Y(0) = Y_0 \text{ známe.} \tag{2.9}$$

Tu, čím väčší je nádor, tým kolísavejšia je jeho veľkosť a naopak.

Ak definujeme $\{X(t)\}_{t\geq 0} = \{\ln Y(t)\}_{t\geq 0}$, potom $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ rieši stochastickú diferenciálnu rovnicu

$$\mathrm{d}X(t) = \left(\theta_2 - \frac{1}{2}\beta^2 - \theta_1 X(t)\right)\mathrm{d}t + \beta\mathrm{d}W(t).$$

Čiže $\{Y(t)\}_{t\geq 0}$ je proces Ornsteinovho-Uhlenbeckovho typu s asociovanými koeficientmi

$$a_{\theta_2,\beta}(t) = \theta_2 - \frac{1}{2}\beta^2,\ b_{\theta_1}(t) = -\theta_1 \text{ a } \sigma_\beta(t) = \beta.$$

Ak položíme $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1,\theta_2)^\mathsf{T} = \boldsymbol{\vartheta}_\mathrm{I}$, dostaneme asymptotickú Fisherovu informačnú maticu pre $\boldsymbol{\theta}$

$$\begin{aligned}\{\mathscr{I}_\infty(\boldsymbol{\vartheta}^*)\}_{\boldsymbol{\theta\theta}} = \frac{\frac{\partial\mathcal{E}[X(T_*)]}{\partial\boldsymbol{\theta}}\frac{\partial\mathcal{E}[X(T_*)]}{\partial\boldsymbol{\theta}}}{\mathcal{V}[X(T_*)]} + \frac{\partial\ln\mathcal{V}[X(T_*)]}{\partial\boldsymbol{\theta}}\frac{\partial\ln\mathcal{V}[X(T_*)]}{\partial\boldsymbol{\theta}} \\ + \frac{1}{\beta^2}\int_{T_*}^{T^*}\begin{pmatrix}\mathcal{E}^2[X(t)] + \mathcal{V}[X(t)] & -\mathcal{E}[X(t)] \\ -\mathcal{E}[X(t)] & 1\end{pmatrix}\mathrm{d}t,\end{aligned}$$

kde $\mathcal{E}[X(t)] = \mathrm{e}^{-\theta_1 t}\ln Y_0 + \frac{1}{\theta_1}(\theta_2 - \frac{1}{2}\beta^2)(1-\mathrm{e}^{-\theta_1 t})$ a $\mathcal{V}[X(t)] = \frac{\beta^2}{2\theta_1}(1-\mathrm{e}^{-2\theta_1 t})$.

Týmto sme získali všetky potrebné údaje pre výpočet ultimátnej efektívnosti návrhov.

2.3 Zovšeobecnenie výsledkov pre asymptotickú Fisherovu informačnú maticu

Uvažujme všeobecnú situáciu, kedy pozorujeme Itōov proces $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou

$$\mathrm{d}X(t) = f_{\boldsymbol{\theta},\beta}(t, X(t))\mathrm{d}t + \sigma_\beta(t, X(t))\mathrm{d}W(t). \tag{2.10}$$

Predpokladáme, že existuje slabé riešenie rovnice (2.10), jeho prechodová hustota $p(x, s \mid y, t) = \frac{\partial}{\partial x} \Pr[X(t+s) < x \mid X(t) = y]$ a jej prvé a druhé derivácie vzhšadom na neznámy parameter $\boldsymbol{\vartheta} = (\boldsymbol{\theta}^\mathsf{T}, \beta)^\mathsf{T}$ sú polospojité sprava v bode $s = 0$ a integrovateľné v y vzhľadom na pravdepodobnostnú mieru $\mu(A) = \int_A p(z, t \mid X(0), 0)\mathrm{d}z$. Ďalej požadujeme, aby prechodová hustota spĺňala obvyklé podmienky regularity.

Potom dostávame nasledujúcu vetu:

Veta 9. *Nech* $\{X(t)\}_{t \geq 0}$ *je proces popísaný stochastickou diferenciálnou rovnicou* (2.10) *spĺňajúcou príslušné predpoklady a nech* $\{\boldsymbol{\tau}^{(n)}\}_{n \geq m} \in \mathfrak{C}_\mathcal{D}$. *Potom*

$$\lim_{n \to \infty} \left(\mathscr{I}(\boldsymbol{\tau}^{(n)}, \boldsymbol{\vartheta}^*) - \mathscr{I}_\infty(\boldsymbol{\vartheta}^*) - \sum_{i=2}^{n} \mathscr{O}(t_i, \boldsymbol{\vartheta}^*) \right) = \mathbf{0}_{m \times m},$$

kde

$$\mathscr{I}_\infty(\boldsymbol{\vartheta}^*) = \mathscr{I}_{X(t_1)|X(0)}(\boldsymbol{\vartheta}) + \int_{T_*}^{T^*} \mathcal{E}_{X(t)} \left[\left. \frac{\frac{\partial f_{\boldsymbol{\vartheta}}(t, X(t))}{\partial \boldsymbol{\vartheta}} \frac{\partial f_{\boldsymbol{\vartheta}}(t, X(t))}{\partial \boldsymbol{\vartheta}^\mathsf{T}}}{\sigma_\beta^2(t, X(t))} \right|_{\boldsymbol{\vartheta}^*} \right] \mathrm{d}t,$$

a

$$\mathscr{O}(t, \boldsymbol{\vartheta}^*) = \frac{1}{2} \mathcal{E}_{X(t)} \left[\left. \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\vartheta}} \ln \sigma_\beta^2(t, X(t)) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\vartheta}^\mathsf{T}} \ln \sigma_\beta^2(t, X(t)) \right|_{\boldsymbol{\vartheta}^*} \right].$$

Literatúra

[1] V. V. Anisimov, V. V. Fedorov, and S. L. Leonov. Optimal design of pharmacokinetic studies described by stochastic differential equations. *mODa 8 – Advances in Model-Oriented Design and Analysis*, pages 9–16, 2007.

[2] H. Dette, J. Kunert, and J. Pepelyshev. Exact optimal designs for weighted least squares analysis with correlated errors. *Statistica Sinica*, 18:135–154, 2008.

[3] H. Dette, A. Pepelyshev, and A. Zhigljavsky. Optimal design for linear models with correlated observations. *The Annals of Statistics*, 41:143–176, 2013.

[4] R. L. Eubank, P. L. Smith, and P. W. Smith. A note on optimal and asymptotically optimal designs for certain time series models. *The Annals of Statistics*, 10:1295–1301, 1982.

[5] V. V. Fedorov, S. L. Leonov, and V. A. Vasiliev. Pharmacokinetic Studies Described by Stochastic Differential Equations: Optimal Design for Systems with Positive Trajectories. *mODa 9 – Advances in Model-Oriented Design and Analysis*, pages 73–80, 2010.

[6] B. Gompertz. On the nature of the function expressive of the law of human mortality, and on a new mode of determining the value of Life Contingencies. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 115:513–585, 1825.

[7] R. Harman. On exact optimal sampling designs for processes with a product covariance structure. In *Experiments for Processes with Time or Space Dynamics*, Isaac Newton Institute, Cambridge, 2011.

[8] R. Harman and F. Štulajter. Optimality of equidistant sampling designs for a nonstationary Ornstein-Uhlenbeck process. *Proceedings of the 6th St. Petersburg Workshop on Simulation*, 2:1097–1101, 2009.

[9] R. Harman and F. Štulajter. Optimal sampling designs for the Brownian motion with a quadratic drift. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 141:2480–2488, 2011.

[10] J. Kiseľák and M. Stehlík. Equidistant and D-optimal designs for parameters of Ornstein-Uhlenbeck process. *Statistics & Probability Letters*, 78:1388–1396, 2008.

[11] C.-K. Li and R. Mathias. Extremal characterizations of the Schur Complement and resulting inequalities. *SIAM Review*, 42:233–236, 2000.

[12] G. Li. Optimal and efficient designs for Gompertz regression models. *Annals of Institute of Statistical Mathematics*, 64:945–957, 2012.

[13] C. F. Lo. Stochastic Nonlinear Gompertz Model of Tumour Growth. In *Proceedings of the World Congress on Engineering*, 2009.

[14] K. V. Mardia and R. T. Marshall. Maximum Likelihood Estimation of Models for Residual Covariance in Spatial Regression. *Biometrika*, 71:135–146, 1984.

[15] B. Øksendal. *Stochastic Differential Equations*. Springer, 2000.

[16] A. Pázman. *Foundations of optimum experimental design*. Riedel, 1986.

[17] A. Pázman. Criteria for optimal design of small-sample experiments with correlated observations. *Kybernetika*, 43:453–462, 2007.

[18] A. Pázman and W. G. Müller. Optimal design of experiments subject to correlated errors. *Statistics & Probability Letters*, 52:29–34, 2001.

[19] J. Sacks and D. Ylvisaker. Designs for regression problems with correlated errors. *The Annals of Mathematical Statistics*, 37:66–89, 1966.

[20] J. Sacks and D. Ylvisaker. Designs for regression problems with correlated errors: Many parameters. *The Annals of Mathematical Statistics*, 39:49–69, 1968.

[21] J. Sacks and D. Ylvisaker. Designs for regression problems with correlated errors III. *The Annals of Mathematical Statistics*, 41:2057–2074, 1970.

[22] G. Wahba. On the regression design problem of Sacks and Ylvisaker. *The Annals of Mathematical Statistics*, 42:1035–1053, 1971.

[23] G. Wahba. Regression design for some equivalence classes of kernels. *The Annals of Statistics*, 2:925–934, 1974.

[24] M. Zagoraiou and A. B. Antognini. Optimal design for parameter estimation of the Ornstein-Uhlenbeck process. *Applied Stochastic Models in Business and Industry*, 25:583–600, 2009.

[25] A. Zhigljavsky, H. Dette, and A. Pepelyshev. A new approach to optimal design for linear models with correlated observations. *Journal of American Statistical Association*, 105:1093–1103, 2010.

Vedecká aktivita

Zoznam publikácií

[1] Lacko V: Ultimate efficiency of experimental designs for Ornstein-Uhlenbeck type processes, *Journal of Statistical Planning and Inference* (v tlači). SCI-E, SCOPUS

[2] Pázman A, Lacko V (2012): *Prednášky z regresných modelov: Odhadovanie parametrov strednej hodnoty a štatistická optimalizácia experimentu*, Vydavateľstvo Univerzity Komenského, ISBN 978-80-223-3070-1.

[3] Lacko V (2012): Planning of experiments for a nonautonomous Ornstein-Uhlenbeck process, *Tatra Mountains Mathematical Publications* **51**, pp101-113.

[4] Lacko V, Harman R (2012): A conditional distribution approach to uniform sampling on spheres and balls in L_p spaces, *Metrika* **75** (7), pp939-951. SCI-E, SCOPUS.

  [o1] Malham SJA, Wiese A (2013): Chi-square simulation of the CIR process and the Heston model, *International Journal of Theoretical and Applied Finance* **16** (3), Art. No. 1350014. SCOPUS.

[5] Harman R., Lacko V. (2010): On decompositional algorithms for uniform sampling from n-spheres and n-balls, *Journal of Multivariate Analysis* **101** (10), pp2297-2304. CCC, SCI, SCOPUS.

  [o1] Peake MJ, Trevelyan J, Coates G (2014): The equal spacing of N points on a sphere with application to partition-of-unity wave diffraction problems, *Engineering Analysis with Boundary Elements* **40**, pp114–122. CCC, SCI, SCOPUS.

  [o1] Malham SJA, Wiese A (2013): Chi-square simulation of the CIR process and the Heston model, *International Journal of Theoretical and Applied Finance* **16** (3), Art. No. 1350014. SCOPUS.

Prezentácia výsledkov na medzinárodných konferenciách

- mODa 10 – The 10th International Workshop in Model-Oriented Design and Analysis, Łagów Lubuski, Poľsko, 2013: *On efficiency of designs for processes of Ornstein-Uhlenbeck type*. Prednáška.
- 17th European Young Statisticians Meeting, Universidade Nova de Lisboa, Lisabon, Portugalsko, 2011: *Optimal exact sampling designs for nonautonomous nonstationary Ornstein-Uhlenbeck process*. Prednáška.

- Experiments for Processes With Time or Space Dynamics, Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences, Cambridge, UK, 2011: *Planning of experiments for a nonautonomous Ornstein-Uhlenbeck process*. Plagát.
- PROBASTAT'11, Smolenice, Slovenská republika, 2011: *Planning of experiments for a nonautonomous Ornstein-Uhlenbeck process*. Prednáška.

Grantová činnosť

- *Optimalizácia experimentov pre procesy popísané stochastickými diferenciálnymi rovnicami II* (hlavný riešiteľ)
  UK/5/2014
- *Metódy optimálneho navrhovania experimentov* (spoluriešiteľ)
  VEGA 1/0163/13
  Hlavný riešiteľ: doc. Mgr. Radoslav Harman, PhD.
- *Nové metódy matematickej štatistiky* (spoluriešiteľ)
  VEGA 2/0038/12
  Hlavný riešiteľ: doc. RNDr. František Rublík, CSc.
- *Optimalizácia experimentov pre procesy popísané stochastickými diferenciálnymi rovnicami*
  UK/87/2012
- *Štatistická optimalizácia experimentov* (spoluriešiteľ)
  UK/383/2011
  Hlavný riešiteľ: Mgr. Jana Michaliková
- *Nové metódy matematickej štatistiky* (spoluriešiteľ)
  VEGA 1/0077/09
  Hlavný riešiteľ: prof. RNDr. Andrej Pázman, DrSc.