



Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky



Mgr. Katarína Sternmüllerová

Autoreferát dizertačnej práce

Optimalizácia experimentov v nelineárnych modeloch

na získanie akademického titulu philosophiae doctor

v odbore doktorandského štúdia:

9.1.9 Aplikovaná matematika

Bratislava 2018

Dizertačná práca bola vypracovaná v dennej forme doktorandského štúdia na Katedre aplikovanej matematiky a štatistiky Fakulty matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave.

Predkladateľ: Mgr. Katarína Sternmüllerová
Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzity Komenského v Bratislave
Mlynská dolina
842 48 Bratislava

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

Oponenti:
.....
.....
.....
.....
.....

Obhajoba dizertačnej práce sa koná o h
pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore doktorandského štúdia vymenovanou
predsedom odborovej komisie dňa

v študijnom odbore 9.1.9 Aplikovaná matematika

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

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

1 Úvod

Dizertačná práca sa zaoberá optimalizovaním experimentov v nelineárnych regresných modeloch, najmä novými kritériami optimality vhodnými pre nelineárne modely.

Experiment nazveme optimálnym pokiaľ prináša experimentátorovi najviac informácie o neznámom parametri. Štandardne sa maximalizuje tzv. informačná matica, ktorá síce „meria“ veľkosť tejto informácie, ale len lokálne pretože závisí práve od hodnoty neznámeho parametra. V práci sme sa venovali aj rozšíreniu alternatívneho prístupu uvedeného v článku Pázmana a Pronzata [18], kde informačná matica nezohráva tak kľúčovú úlohu.

1.1 Navrhovanie experimentov v nelineárnom regresnom modeli

Nech meranie $y(\mathbf{x})$ spĺňa nelineárny regresný model, teda $y(\mathbf{x}) = \eta(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) + \varepsilon$, kde $\boldsymbol{\theta} \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^m$ je neznámy parameter a $\eta : \mathcal{X} \times \Theta \mapsto \mathbb{R}$ je spojité diferencovateľné zobrazenie na kompaktnom parametrickom priestore Θ . Predpokladajme, že \mathcal{X} je konečná množina bodov \mathbf{x} , v ktorých môžeme vykonať merania a že všetky merania v experimente sú vykonávané nezávisle. Návrh experimentu ξ je potom ľubovoľné pravdepodobnostné rozdelenie na \mathcal{X} a Ξ je množina všetkých takých návrhov ξ . O náhodných chybách ε predpokladáme, že majú nulovú strednú hodnotu a konštantnú (neznámu) varianciu. Pre $\boldsymbol{\theta}^0 \in \text{int}(\Theta)$ a návrh $\xi \in \Xi$ má informačná matica tvar

$$M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) \xi(\mathbf{x}),$$

kde elementárna informačná matica je

$$M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) = \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^0} \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}^\top} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^0}.$$

Cieľom štandardného prístupu k navrhovaniu experimentov je maximalizovať lokálne kritérium optimality, teda zvolenú reálnu funkciu $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)$, ktorá meria veľkosť informačnej matice $M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)$ (viď napr. monografie [20, 9]). V súčasnosti poznáme širokú škálu rôznych kritérií, medzi ktoré patria kritériá D -, A -, E -, \mathbf{c} - a G -optimality (viď napr. Kap. 5.1.2 v [20]).

V nelineárnom modeli sa nevyhneme závislosti kritériálnej funkcie na parametri $\boldsymbol{\theta}$. Pri navrhovaní experimentu teda buď uvažujeme nominálnu hodnotu parametra $\boldsymbol{\theta}^0$ nachádzajúcu sa v blízkosti skutočnej hodnoty (tzv. lokálne kritérium), alebo maximalizujeme kritérium $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ pri najhoršej možnej hodnote parametra (tzv. maximinné kritérium) či uvažujeme nejaké apriórne rozdelenie π na parametrickom priestore Θ a následne maximalizujeme strednú hodnotu $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ vzhľadom na toto apriórne rozdelenie (tzv. priemerovacie kritérium).

1.2 Navrhovanie experimentov v zovšeobecnenom regresnom modeli založenom na exponenciálnej triede rozdelení

V dizertačnej práci sme sa zamerali na zovšeobecnené regresné modely založené na exponenciálnej triede hustôt, teda pri danom $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ a neznámom parametri $\boldsymbol{\theta} \in \Theta$ pozorujeme $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^l$ s hustotou

$$f(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \exp \left\{ -\psi(\mathbf{y}) + t^\top(\mathbf{y})g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) - \kappa [g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})] \right\}, \quad (1)$$

kde ψ a κ sú známe funkcie, $t(\mathbf{y}) \in \mathbb{R}^r$ je postačujúca štatistika pre parameter $\boldsymbol{\theta}$ a $g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ zodpovedá tzv. kanonickému parametru. Modely založené na (1) zahŕňajú aj klasickú nelineárnu regresiu s normálne rozdelenými chybami či logistickú regresiu. Odhad parametra $\boldsymbol{\theta}$ sa počíta metódou maximálnej vierohodnosti. Modely popísané hustotou (1) boli uvažované napr. v [16], ale v práci sme sa opierali o vlastnosti exponenciálnych tried rozdelení rozoberaných v [4, 2, 8]. Z uvedenej literatúry vyplýva, že elementárna Fisherova informačná matica pre meranie z (1) má tvar

$$M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial g^\top(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Sigma(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \frac{\partial g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}^\top},$$

kde $\Sigma(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ je kovariančná matica postačujúcej štatistiky $t(\mathbf{y})$ pri danom \mathbf{x} a $\boldsymbol{\theta}$.

Klasický prístup navrhovania experimentov v zovšeobecnených regresných modeloch (nie nutne založených na exponenciálnych triedach rozdelení) bol popísaný napr. v [1] a opiera sa o maximalizáciu vhodných funkcií matice $\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \xi(\mathbf{x})$ vzhľadom na ξ . Podobne ako v obyčajnej nelineárnej regresii je možné použiť lokálne, maximálne a priemerovacie kritériá na odstránenie nežiaducej závislosti od $\boldsymbol{\theta}$.

V práci sme však za účelom navrhovania experimentov použili aj I-divergenciu (Kullback-Leiblerovu I divergenciu, viď [13]), ktorá meria vzdialenosť medzi dvomi rozdeleniami pravdepodobnosti a ukázali sme jej istý súvis s Fisherovou informačnou maticou. Pre naše potreby bolo nutné merať vzdialenosť dvoch hustôt (1) pri hodnote parametra $\boldsymbol{\theta}^0$ a $\boldsymbol{\theta}$. V modeloch založených na exponenciálnych triedach má táto I-divergencia tvar

$$I_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\theta}^0, \boldsymbol{\theta}) = \mu^\top(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) \left[g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) - g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \right] + \kappa [g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})] - \kappa [g(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0)],$$

kde $\mu(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0)$ označuje strednú hodnotu $t(\mathbf{y})$ pri \mathbf{x} a $\boldsymbol{\theta}^0$.

2 Ciele dizertačnej práce

Dizertačnú prácu a jej ciele možno rozdeliť do troch viac-menej nezávislých celkov:

1. Navrhovanie experimentov pomocou lineárneho programovania:

- prepísať kritériá D -, A - a E_k -optimality do takej formy, ktorá umožňuje využitie lineárneho programovania pri optimalizácii experimentu a

- využiť tieto nové formulácie kritérií na riešenie zložitejších problémov ako je hľadanie tzv. robustného návrhu vzhľadom na triedu ortogonálne invariantných kritérií alebo optimalizovanie experimentu pri doplnkových lineárnych ohraničeniach.
2. Navrhovanie experimentov pomocou kritérií inšpirovaných teóriou rizika:
- definovať kritérium založené na podmienenej hodnote v riziku ako konkávnou funkciu návrhu ξ a uvažovať aj diskkrétne apriórne rozdelenia (vychádzajúc z [24], kde bolo toto kritérium použité za účelom navrhovania experimentu po prvýkrát),
 - analyzovať a interpretovať toto kritérium,
 - študovať vzťah tohto kritéria k priemerovaciemu, maximálnemu, lokálnemu a kvantilovému kritériu,
 - odvodiť smerovú deriváciu a dokázať vetu o ekvivalencii pre toto kritérium a
 - ukázať možnosť výpočtu optimálnych návrhov pomocou lineárneho programovania.
3. Formulácia rozšírených kritérií optimality za účelom obmedzenia mylných odhadov v zovšeobecnených regresných modeloch:
- predefinovať rozšírené kritériá E -, c - a G -optimality z [18] tak, aby boli aplikovateľné aj v zovšeobecnených regresných modeloch založených na exponenciálnych triedach rozdelení,
 - navrhnúť rozšírené verzie aj pre kritériá MV -, L - a A -optimality,
 - dokázať, že tieto kritériá sú naozaj rozšírením klasických kritérií optimality a
 - aplikovať lineárne programovanie a kritérium založené na podmienenej hodnote v riziku aj v zovšeobecnených regresných modeloch.

3 Výsledky práce

3.1 Navrhovanie experimentov pomocou lineárneho programovania

V Kap. 9.5.3 monografie Pronzata a Pázmana [20] bolo ukázané akým spôsobom možno použiť metódy lineárneho programovania na optimalizáciu experimentov pomocou kritérií E -, c - a G -optimality.

V článku [5], na ktorom je založená táto časť, sa podarilo pomocou maticovej algebry odvodiť ekvivalentné formulácie ďalších konkávných a pozitívne homogénnych kritérií optimality vhodných pre aplikáciu lineárneho programovania, menovite:

kritérium D -optimality

$$\begin{aligned} \forall \xi \in \Xi^+ \quad \phi_D(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) &\equiv \left\{ \det [M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)] \right\}^{1/m} \\ &= \min_{\zeta \in \Xi^+} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \frac{\det^{1/m} [M(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0)]}{m} \mathbf{f}^\top(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) M^{-1}(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) \xi(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

kde $\Xi^+ = \{\xi : M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) \text{ je regulárna}\}$ a $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) = \left. \frac{\partial \eta(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^0}$,

kritérium A -optimality

$$\begin{aligned} \forall \xi \in \Xi^+ \quad \phi_A(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) &\equiv \frac{1}{\text{tr} \{ [M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)]^{-1} \}} \\ &= \min_{\zeta \in \Xi^+} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \frac{\|M^{-1}(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0)\|_{\ell(2)}^2}{\{\text{tr} [M^{-1}(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0)]\}^2} \xi(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

kde $\|\cdot\|_{\ell(2)}$ označuje euklidovskú normu,

kritérium E_k -optimality

$$\begin{aligned} \forall \xi \in \Xi \quad \phi_{E_k}(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) &\equiv \sum_{i=1}^k \lambda_i [M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)] \\ &= \min_{\zeta \in \Xi} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \left\| P^{(k)}(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0) \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) \right\|_{\ell(2)}^2 \xi(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

kde $\lambda_1 [M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)] \leq \dots \leq \lambda_m [M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)]$ sú usporiadané vlastné čísla matice $M(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)$, $\mathbf{u}_1 [M(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0)], \dots, \mathbf{u}_m [M(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0)]$ sú zodpovedajúce ortonormálne vlastné vektory a $P^{(k)}(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0) = \sum_{i=1}^k \mathbf{u}_i [M(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0)] \mathbf{u}_i^\top [M(\zeta, \boldsymbol{\theta}^0)]$ je ortogonálny projektor.

Z uvedeného vyplýva, že tieto kritériá optimality sa dajú vyjadriť pomocou vhodne zvolenej funkcie $H(\zeta, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0)$ a množiny Ξ^* ako $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) = \min_{\zeta \in \Xi^*} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} H(\zeta, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) \xi(\mathbf{x})$. Optimálny návrh experimentu ξ^* maximalizujúci kritérium $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)$ je potom riešením problému lineárneho programovania s nekonečne veľa lineárnymi ohraňeniami:

$$\begin{aligned} &\max (\mathbf{0}^\top, 1) \begin{pmatrix} \xi \\ t \end{pmatrix} \\ \text{tak, že } &\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} H(\zeta, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0) \xi(\mathbf{x}) \geq t \text{ pre každé } \zeta \in \Xi^*, \\ &\xi(\mathbf{x}) \geq 0 \text{ pre každé } \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \text{ a } \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \xi(\mathbf{x}) = 1. \end{aligned} \tag{2}$$

Tento problém sme riešili pomocou iteračného algoritmu navrhnutého autormi Shimizu a Ai-yoshi [23]. Neskôr sa ukázalo, že k rovnakému algoritmu a prepisu kritérií môžeme dospieť použitím subgradientov (viď napr. Kap. 3.1.5–3.1.6 z [15]) a metódy *cutting planes* z článku Kelley [12], viď. Kap. 9.5.3 z [20]. Použitý algoritmus poskytuje pravidlo zastavenia, ktoré sa líši od bežných pravidiel založených na vete o ekvivalencii.

Ďalej sme sa v práci venovali riešeniu komplexnejších problémov navrhovania experimentov, kde môžu byť uplatnené práve metódy lineárneho programovania. Jedným z nich je problém hľadania návrhu experimentu robustného vzhľadom na triedu tzv. ortogonálne invariantných kritérií. Harman [11] dokázal, že takýto návrh je riešením nasledovnej optimalizačnej úlohy

$$\xi_{\text{ef}}^* = \arg \max_{\xi \in \Xi} \min_{1 \leq k \leq m} \left[\frac{\phi_{E_k}(\xi, \boldsymbol{\theta}^0)}{\max_{\nu \in \Xi} \phi_{E_k}(\nu, \boldsymbol{\theta}^0)} \right]. \quad (3)$$

Úlohu (3) je možné formulovať ako úlohu lineárneho programovania s nekonečne veľa ohraničeniami a opäť aplikovať algoritmus Shimizu a Aiyoshiho [23]. Hlavnou myšlienkou je, že najprv vypočítame hodnotu menovateľa vo výraze v (3) pre každé k (napríklad metódou lineárneho programovania) a označíme ju $E_k(\text{opt}, \boldsymbol{\theta}^0)$. Problém lineárneho programovania, ktorý rieši (3) potom pozostáva aj z týchto ohraničení:

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \frac{H_{E_k}(\zeta, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^0)}{E_k(\text{opt}, \boldsymbol{\theta}^0)} \xi(\mathbf{x}) \geq t \text{ pre každé } \zeta \in \Xi \text{ a pre každé } k \in \{1, \dots, m\},$$

kde H_{E_k} označuje funkciu H zodpovedajúcu kritériu ϕ_{E_k} . Podotýkame, že v článku [10] bol problém (3) riešený metódami semidefinitného programovania.

Všimnime si, že medzi lineárne ohraničenia v (2) ľahko pridáme ďalšie — napríklad lineárne ohraničenie na cenu experimentu. Dodaním ďalších lineárnych ohraničení, ako sme ukázali v [5], môžeme tiež optimalizovať jedno kritérium pri súčasnom dolnom ohraničení na hodnotu iného kritéria.

Ďalej sme dokázali vetu, ktorá rozširuje naše úvahy z lokálnych na priemerovacie kritériá v nelineárnych regresných modeloch.

Veta 1. *Nech π je apriórne rozdelenie na parametrickom priestore Θ . Označme $\Xi_{\Theta} = \{\xi : M(\xi, \boldsymbol{\theta}) \text{ je regulárna } \forall \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$. Môžeme písať*

$$\int_{\Theta} \phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) d\pi(\boldsymbol{\theta}) = \min_{\zeta \in \Xi^*} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} H_{AVE}(\zeta, \mathbf{x}) \xi(\mathbf{x}),$$

pre každé $\xi \in \Xi^*$, kde $H_{AVE}(\zeta, \mathbf{x}) = \int_{\Theta} H(\zeta, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) d\pi(\boldsymbol{\theta})$ a $\Xi^* = \Xi_{\Theta}$ pre D - a A -optimalitu a $\Xi^* = \Xi$ pre kritériá E_k -optimality.

V dizertačnej práci sme sa venovali aj možnosti ako tieto výsledky rozšíriť pre prípad navrhovania experimentov v zovšeobecnených regresných modeloch založených na exponenciálnej triede rozdelení. Hlavný rozdiel pri odvodzovaní preformulovaných kritérií D -, A - a E_k -optimality spočíva v použití matice $F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial g^{\top}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Sigma^{1/2}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ namiesto vektora $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$.

3.2 Navrhovanie experimentov pomocou kritérií inšpirovaných teóriou rizika

Pázman a Pronzato poukazujú vo svojej práci [17] na niektoré nedostatky priemerovacích a maximálnych kritérií, ktoré sú bežne používané na odstránenie závislosti kritéria optimality od

skutočnej (neznámej) hodnoty parametra. Ako alternatívu navrhujú použiť kvantilové kritérium pri pevne zvolenej hladine $\alpha \in [0, 1]$

$$\Phi_{\alpha}^Q(\xi) = \max \{t \in \mathbb{R} : Pr[\phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) \geq t] \geq 1 - \alpha\}.$$

Spomínané nedostatky sa síce kvantilovým kritériom odstránili, ale zároveň autori pripúšťajú výraznú nevýhodu kvantilového kritéria, ktorou je jeho nekonkávnosť, resp. nekonvexnosť, čo so sebou prináša isté obtiažnosti pri výpočte optimálnych návrhov.

Na druhej strane, v roku 2015 Valenzuela, Rojas a Hjalmarsson [24] poprvýkrát navrhli použitie podmienenej hodnoty v riziku (CVaR, z ang. *Conditional Value at Risk*) pri navrhovaní experimentov a inšpirovali sa pri tom prácami z oblasti teórie rizika. Na základe týchto prác [19, 21, 22] sa nám podarilo previesť hlbšiu analýzu kritéria založeného na CVaR. Hlavnou výhodou tohto kritéria, ktorá bola zmienená už v [24], je jeho konkávnosť (aby sme boli úplne presní, práce [19, 21, 22, 24] uvažujú konvexnú verziu CVaR, čo je typické pre teóriu rizika) a súčasne, že má veľmi podobné vlastnosti ako kvantilové kritérium.

Nami definované CVaR kritérium je pre $\alpha \in (0, 1]$ dané nasledovným predpisom

$$\Phi_{\alpha}(\xi) = \max_{c \in \mathbb{R}} \left\{ c + \frac{1}{\alpha} E[\min\{0, \phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) - c\}] \right\}. \quad (4)$$

Kritérium je konkávne v ξ , ak je aj pôvodné kritérium $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ konkávne v ξ a jeho formulácia v (4) sa najviac podobá na definíciu CVaR v [19], ale vychádza zo vzťahu prvotne odvodeného v [21]. Na základe [22] vieme, že jedným z bodov, ktoré pre dané ξ riešia maximalizačný problém v (4) je bod $c = \Phi_{\alpha}^Q(\xi)$. Vychádzajúc z [22], kde je dokázané ekvivalentné tvrdenie, sme ukázali, že CVaR kritérium sa nachádza vždy medzi dvomi podmienenými strednými hodnotami, konkrétne

$$E[\phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) \mid \phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) < \Phi_{\alpha}^Q(\xi)] \leq \Phi_{\alpha}(\xi) \leq E[\phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) \mid \phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) \leq \Phi_{\alpha}^Q(\xi)], \quad (5)$$

čo nám pomohlo interpretovať CVaR kritérium (4). Uvedené výsledky platia pre ľubovoľné apriórne rozdelenie π na parametrickom priestore Θ , a teda pre ľubovoľnú náhodnú premennú $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ (diskrétnu alebo spojitú). Ak je $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ spojitá náhodná premenná, tak (5) platí so znamienkom rovnosti a navyše

$$\Phi_{\alpha}(\xi) = \frac{1}{\alpha} \int_{\{\boldsymbol{\theta} : \phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) \leq \Phi_{\alpha}^Q(\xi)\}} \phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) d\pi(\boldsymbol{\theta}),$$

čo je výraz analogický k definícii CVaR kritéria v [24].

V ďalšej časti sme sa viac zaoberali CVaR kritériom z pohľadu navrhovania experimentov. Podarilo sa nám ukázať, že pre $\alpha = 1$ sa CVaR kritérium zhoduje s priemerovacím kritériom a za určitých podmienok konverguje CVaR kritérium pre $\alpha \rightarrow 0$ k maximinnému kritériu. Kým priemerovacie kritérium môže viesť k veľmi zlým hodnotám pre niektoré body parametrického priestoru, maximinné kritérium je zas príliš orientované na okraje parametrického priestoru (viď

[17]). Práve vhodnou voľbou parametra α by sme mohli dosiahnuť primeraný kompromis medzi týmito dvomi kritériami, ktorý bude dostatočne robustný a súčasne nebude zameraný len na okrajové body. Hodnota $\alpha = 0.5$ súvisí s mediánom a vedie k podobným výsledkom ako priemerovacie kritérium, preto zrejme vhodná voľba parametra α bude niekde z intervalu $(0, 0.5)$. Musíme podotknúť, že na rozdiel od kvantilového kritéria, kritérium CVaR nie je invariantné vzhľadom na nelineárne škálovanie pôvodného kritéria $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$.

Keďže CVaR kritérium je konkávne, má zmysel preňho sformulovať vetu o ekvivalencii, ktorá úzko súvisí so smerovou deriváciou. Podarilo sa nám ukázať, že ak je kritérium $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ konkávna a spojitá funkcia v ξ pre každé $\boldsymbol{\theta} \in \Theta$, tak návrh ξ^* je CVaR optimálny práve vtedy ak

$$\sup_{\nu \in \Xi, b \in \mathbb{R}} \left[b - c + \frac{1}{\alpha} E \left[\begin{cases} 0 & \text{ak } \phi(\xi^*, \boldsymbol{\theta}) > c \\ \min\{0, \mathcal{F}_{\phi(\cdot, \boldsymbol{\theta})}(\xi^*, \nu) - (b - c)\} & \text{ak } \phi(\xi^*, \boldsymbol{\theta}) = c \\ \mathcal{F}_{\phi(\cdot, \boldsymbol{\theta})}(\xi^*, \nu) - (b - c) & \text{ak } \phi(\xi^*, \boldsymbol{\theta}) < c \end{cases} \right] \right] = 0,$$

pričom $\mathcal{F}_{\phi(\cdot, \boldsymbol{\theta})}(\xi, \nu)$ označuje smerovú deriváciu kritéria $\phi(\cdot, \boldsymbol{\theta})$ v bode ξ a v smere ν . Výrazné zjednodušenie nastane ak je $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ spojitá náhodná premenná a kritérium $\bar{\phi}[M(\xi, \boldsymbol{\theta})] = \phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ je diferencovateľné na množine informačných matíc. Označme $G(\xi, \boldsymbol{\theta}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ gradient $\bar{\phi}$ vzhľadom na $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ v bode $M(\xi, \boldsymbol{\theta})$ a $k(\xi, \boldsymbol{\theta}) = \text{tr}[M(\xi, \boldsymbol{\theta})G(\xi, \boldsymbol{\theta})]$. Potom návrh ξ^* je CVaR-optimálny vtedy a len vtedy ak

$$0 = \max_{\substack{\mathbf{x} \in \mathcal{X} \\ b \in \mathbb{R}}} \left[b - \Phi_{\alpha}^Q(\xi^*) + \frac{1}{\alpha} E \left[\begin{cases} 0 & \text{ak } \phi(\xi^*, \boldsymbol{\theta}) > \Phi_{\alpha}^Q(\xi^*) \\ \text{tr}[M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})G(\xi^*, \boldsymbol{\theta})] - k(\xi^*, \boldsymbol{\theta}) - (b - \Phi_{\alpha}^Q(\xi^*)) & \text{ak } \phi(\xi^*, \boldsymbol{\theta}) < \Phi_{\alpha}^Q(\xi^*) \end{cases} \right] \right].$$

Ďalej sme sa v práci venovali metodike výpočtu optimálnych návrhov. Podobne ako v prácach [19, 21, 22, 24] sme riešili úlohu nájdenia takého návrhu ξ^* a takého c^* , že $(\xi^*, c^*) = \arg \max_{\xi \in \Xi, c \in \mathbb{R}} w_{\alpha}(\xi, c)$, kde $w_{\alpha}(\xi, c) = c + \frac{1}{\alpha} E[\min\{0, \phi(\xi, \boldsymbol{\theta}) - c\}]$. Na riešenie tejto úlohy sme sa rozhodli použiť Kelleyho metódu *cutting planes* [12]. Najprv sme však museli vyjadriť subgradient funkcie w_{α} v bode $(\tilde{\xi}, \tilde{c})$, pričom sme dostali

$$\nabla w_{\alpha}(\tilde{\xi}, \tilde{c}) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\alpha} E \left[\begin{cases} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ 0 \end{pmatrix} & \text{ak } \phi(\tilde{\xi}, \boldsymbol{\theta}) > \tilde{c}, \\ \begin{pmatrix} \nabla_{\xi} \phi(\tilde{\xi}, \boldsymbol{\theta}) \\ -1 \end{pmatrix} & \text{inak} \end{cases} \right],$$

kde $\nabla_{\xi} \phi(\tilde{\xi}, \boldsymbol{\theta})$ je subgradient kritéria $\phi(\xi, \boldsymbol{\theta})$ vzhľadom na ξ v bode $\tilde{\xi}$. Pokiaľ bolo zložité vyčísliť strednú hodnotu v subgradiente presne, použili sme jej aproximáciu na základe Monte Carlo simulácií, pričom sme generovali nezávislé realizácie z apriórneho rozdelenia π (podobne

postupovali aj v [24] pri aproximácii strednej hodnoty v (4) . Algoritmus, ktorý opäť riešil problém lineárneho programovania s nekonečne veľa ohraničeniami, sme potom otestovali na príkladoch, kde sme porovnali optimálne návrhy vzhľadom na priemerovacie, maximinné, kvantilové a CVaR kritérium.

3.3 Formulácia rozšírených kritérií optimality za účelom obmedzenia mylných odhadov v zovšeobecnených regresných modeloch

Pázman a Pronzato sa v článku [18] a v Kap. 7 monografie [20] venujú problému stability a jednoznačnosti odhadu metódou najmenších štvorcov v klasickej nelineárnej regresii. Tomuto problému môžeme predchádzať ešte na úrovni návrhu experimentu použitím ich rozšírených kritérií optimality, ktoré na jednej strane maximalizujú informáciu obsiahnutú v experimente, no na strane druhej minimalizujú možnosť mylného odhadu parametrov. Menovite autori zaviedli rozšírené kritériá E -, c - a G -optimality, ktoré sa pri klasickom lineárnom regresnom modeli a v modeli s obmedzeným parametrickým priestorom správajú tak isto ako štandardné kritériá E -, c - a G -optimality.

V práci sme rozšírili výsledky [18] a Kap. 7 z [20] pre účely stabilizovania odhadov metódou maximálnej vierohodnosti v zovšeobecnených regresných modeloch založených na exponenciálnej triede rozdelení. Kľúčovú úlohu tu zohráva I -divergencia, ktorá nesie informáciu o variabilite odhadu metódou maximálnej vierohodnosti ale súčasne odráža aj tzv. identifikovateľnosť parametra, čo je pojem často spomínaný v Kap. 7 z [20]. Niektoré výsledky sme publikovali v článku [6].

Vo všeobecnosti sme v práci definovali (konkávne a pozitívne homogénne) rozšírené kritériá optimality pre nominálnu hodnotu parametra $\boldsymbol{\theta}^0$ nasledovne

$$\phi_{\rho}^{ext}(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) \equiv \inf_{(\boldsymbol{\theta}^1, \dots, \boldsymbol{\theta}^k) \in \Theta^k} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \sum_{i=1}^k 2I_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\theta}^0, \boldsymbol{\theta}^i) \xi(\mathbf{x}) \left[\frac{1}{\rho^2(\boldsymbol{\theta}^0; \boldsymbol{\theta}^1, \dots, \boldsymbol{\theta}^k)} + K \right], \quad (6)$$

kde $k \in \mathbb{N}$ je dané číslo, $K \geq 0$ je ladiaca konštanta a $\rho : \mathbb{R}^{m \times (k+1)} \rightarrow \mathbb{R}$, $(\boldsymbol{\theta}^0, \boldsymbol{\theta}^1, \dots, \boldsymbol{\theta}^k) \mapsto \rho(\boldsymbol{\theta}^0; \boldsymbol{\theta}^1, \dots, \boldsymbol{\theta}^k)$ je vzdialenosť medzi k -ticou bodov $\boldsymbol{\theta}^1, \dots, \boldsymbol{\theta}^k$ a nominálnou hodnotou $\boldsymbol{\theta}^0$ na parametrickom priestore Θ . Práve voľba vzdialenosti ρ , s čím súvisí aj voľba k , určuje, o rozšírenie akého kritéria sa jedná.

V práci sme sa intenzívnejšie venovali aj kritériám, ktoré sme nazvali pseudonormné. Pseudonorma $\|\cdot\|_P$ je zobrazenie, ktoré spĺňa všetky vlastnosti normy $\|\cdot\|$ okrem nasledovnej: $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = \mathbf{0}$. Často sme pritom pracovali s normou resp. pseudonormou definovanou na priestore matíc $\mathbb{R}^{m \times k}$. Klasická (nerozšírená) verzia pseudonormných kritérií je

$$\phi_{\|\cdot\|_P}(\xi, \boldsymbol{\theta}) = \inf_{A \in \mathbb{R}^{m \times k}: \|A\|_P=1} \text{tr} \left[A^{\top} M(\xi, \boldsymbol{\theta}) A \right]. \quad (7)$$

Detle, Heiligers a Studen [7] sa venujú konvexnej verzii týchto kritérií s normou a nazývajú ich minimaxné kritériá (my sme použili názov pseudonormné kritériá na odlíšenie od maximinných

kritérií, ktoré tu značia niečo iné). Článok [7] okrem toho obsahuje dôležité tvrdenie o úlohe duálnej normy (viď napr. [3] pre definíciu duálnej normy) pri prechode medzi konvexnými a konkávnymi kritériami a ďalší relevantný výsledok sa týka faktu, že trieda L_p kritérií pre $p \geq 1$ patrí do triedy (7) a dostaneme ju použitím Schattenovej normy $\|\cdot\|_{S(q)}$ (viď napr. [3] pre definíciu Schattenovej normy) pri $k = m$ a vhodne zvolenom q . Na základe [7] sme teda mohli vyjadriť A -optimalitu a kritérium MV -optimality (viď napr. [14]) ako prvky triedy (7). Okrem toho sú prvkami triedy (7) aj ďalšie kritériá, o ktorých je to však dobre známe (viď napr. Kap. 5.1.2 z [20]). V Tabuľke 1 sme zhrnuli niektoré kritériá patriace do pseudonormnej triedy (7).

kritérium	k	pseudonorma
E	1	$\ \mathbf{u}\ _{\ell(2)} = \sqrt{\mathbf{u}^\top \mathbf{u}}$
MV	1	$\ \mathbf{u}\ _{\ell(\infty)} = \max_{i=1, \dots, m} u_i $
\mathbf{c}	1	$\ \mathbf{u}\ _{P\mathbf{c}} = \mathbf{u}^\top \mathbf{c} $
G	1	$\ \mathbf{u}\ _{PG} = \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \mathbf{u}^\top \mathbf{f}(\mathbf{x}) $
A	m	$\ A\ _{S(1)} = \text{tr}[(A^\top A)^{1/2}]$
L	$m > k > 1$	$\ A\ _{PL} = \text{tr}(A^\top L) $

Tabuľka 1: Niektorí známi predstavitelia pseudonormnej triedy. Klasické definície jednotlivých kritérií možno nájsť napríklad v Kap. 5.1.2 z [20].

Keď vzdialenosť $\rho(\cdot)$ z (6) definujeme pomocou pseudonormy, dostaneme rozšírené pseudonormné kritériá

$$\phi_{\|\cdot\|_P}^{ext}(\xi, \boldsymbol{\theta}^0) = \inf_{(\boldsymbol{\theta}^1, \dots, \boldsymbol{\theta}^k) \in \Theta^k} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \sum_{i=1}^k 2I_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\theta}^0, \boldsymbol{\theta}^i) \xi(\mathbf{x}) \left[\frac{1}{\|\boldsymbol{\theta}^0 - \boldsymbol{\theta}^1, \dots, \boldsymbol{\theta}^0 - \boldsymbol{\theta}^k\|_P^2} + K \right]. \quad (8)$$

Aplikovaním konkrétnych pseudonoriem z Tabuľky 1 dostávame rozšírenia známych kritérií E -, \mathbf{c} - a G -optimality, a tiež MV -, A - a L -optimality, ktoré v prvotnom článku Pázmana a Pronzata [18] neboli uvažované.

To, že kritériá v (8) sú naozaj rozšírením kritérií (7), vyplýva z nasledovných vlastností, ktoré boli pri splnení určitých podmienok v práci dokázané:

- v prípade klasického lineárneho regresného modelu s normálne rozdelenými chybami sa kritériá (8) zhodujú s tými v (7),
- ak parametrický priestor Θ je m -rozmerná guľa s polomerom r , tak kritériá v (8) konvergujú pre $r \rightarrow 0$ ku kritériám (7),
- ak model neobsahuje žiadne prekrytia v $\boldsymbol{\theta}^0$ pri danom návrhu ξ (teda $\sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} I_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\theta}^0, \boldsymbol{\theta}) \xi(\mathbf{x})$ konverguje k nule len pre $\boldsymbol{\theta} \rightarrow \boldsymbol{\theta}^0$), tak kritériá v (8) konvergujú pre $K \rightarrow \infty$ ku kritériám (7).

V dizertačnej práci sme rozobrali aj alternatívne všeobecnejšie definície rozšírených kritérií \mathbf{c} - a G -optimality, ktoré sme rozpracovali v článku [6] vychádzajúc z [18].

Literatúra

- [1] A. C. Atkinson, V. V. Fedorov, A. M. Herzberg, R. Zhang. Elemental information matrices and optimal experimental design for generalized regression models. *J. Stat. Plan. Inference*, 144:81–91, 2014.
- [2] O. Barndorff-Nielsen. *Information and Exponential Families in Statistical Theory*. Wiley, 1978.
- [3] R. Bhatia. *Matrix Analysis*. Graduate Texts in Mathematics, Vol. 169. Springer Science + Business Media, New York, 1997.
- [4] L. D. Brown. *Fundamentals of Statistical Exponential Families with Applications in Statistical Decision Theory*. IMS Lecture Notes Monogr. Ser., Volume 9. Institute of Mathematical Statistics, Hayward, CA, 1986.
- [5] K. Burclová, A. Pázman. Optimal design of experiments via linear programming. *Stat. Papers*, 57:893–910, 2016.
- [6] K. Burclová, A. Pázman. Optimum design via I-divergence for stable estimation in generalized regression models. In J. Kunert, C. H. Müller, A. C. Atkinson (Eds.), *mODa 11—Advances in Model-Oriented Design and Analysis*, s. 55–62. Springer, 2016.
- [7] H. Dette, B. Heiligers, W. J. Studden. Minimax designs in linear regression models. *The Annals of Statistics*, 23(1):30–40, 1995.
- [8] B. Efron. The geometry of exponential families. *Ann. Stat.*, 6(2):362–376, 1978.
- [9] V. V. Fedorov, S. L. Leonov. *Optimal Design for Nonlinear Response Models*. CRC Press, 2014.
- [10] L. Filová, M. Trnovská, R. Harman. Computing maximin efficient experimental designs using the methods of semidefinite programming. *Metrika*, 75(5):709–719, 2012.
- [11] R. Harman. Minimal efficiency of designs under the class of orthogonally invariant information criteria. *Metrika*, 60:137–153, 2004.
- [12] J. E. Kelley. The cutting-plane method for solving convex programs. *J Soc Indust Appl Math*, 8:703–712, 1960.
- [13] S. Kullback, R. A. Leibler. On information and sufficiency. *Ann Math Stat*, 22(1):79–86, 1951.
- [14] J. López-Fidalgo, B. Torsney, R. Ardanuy. MV-optimization in weighted linear regression. In A. C. Atkinson, L. Pronzato, H. P. Winn (Eds.), *MODA 5—Advances in Model-Oriented Data Analysis and Experimental Design*, s. 39–50. Physica, Heidelberg, 1998.

- [15] Y. Nesterov. *Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course*. Springer Science + Business Media, New York, 2004.
- [16] A. Pázman. *Nonlinear Statistical Models*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1993.
- [17] A. Pázman, L. Pronzato. Quantile and probability-level criteria for nonlinear experimental design. In J. López-Fidalgo, J. M. Rodríguez-Díaz, B. Torsney (Eds.), *mODa 8—Advances in Model-Oriented Design and Analysis*, s. 157–164. Physica-Verlag, Heidelberg, 2007.
- [18] A. Pázman, L. Pronzato. Optimum design accounting for the global nonlinear behavior of the model. *Ann Stat*, 42(4):1426–1451, 2014.
- [19] G. C. Pflug. Some remarks on the Value-at-Risk and the Conditional Value-at-Risk. In S. P. Uryasev (Eds.), *Probabilistic Constrained Optimization. Nonconvex Optimization and Its Applications*, volume 49, s. 272–281. Springer, Boston, MA, 2000. Dostupné na <http://www.pacca.info/public/files/docs/public/finance/Active%20Risk%20Management/gpf1.pdf>. [cit. 11.4.2018].
- [20] L. Pronzato, A. Pázman. *Design of Experiments in Nonlinear Models. Asymptotic Normality, Optimality Criteria and Small-Sample Properties*. Lecture Notes in Statistics, Vol. 212. Springer, New York, Heidelberg, 2013.
- [21] R. T. Rockafellar, S. Uryasev. Optimization of conditional value-at-risk. *Journal of Risk*, 2:21–41, 2000. Dostupné na http://www.ise.ufl.edu/uryasev/files/2011/11/CVaR1_JOR.pdf. [cit. 11.4.2018].
- [22] R. T. Rockafellar, S. Uryasev. Conditional value-at-risk for general loss distributions. *Journal of Banking & Finance*, 26:1443–1471, 2002.
- [23] K. Shimizu, E. Aiyoshi. Necessary conditions for min-max problems and algorithms by a relaxation procedure. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 25(1):62–66, 1980.
- [24] P. E. Valenzuela, C. R. Rojas, H. Hjalmarsson. Uncertainty in system identification: learning from the theory of risk. *IFAC-PapersOnLine*, 48(28):1053–1058, 2015.

Vedecká činnosť

Zoznam publikácií a ohlasov

[P1] K. Burclová, A. Pázman. Optimal design of experiments via linear programming. *Stat. Papers*, 57:893—910, 2016.

citované v: B. P. M. Duarte, G. Sagnol, W. K. Wong. An algorithm based on semidefinite programming for finding minimax optimal designs. *Computational Statistics and Data Analysis*, 119:99—117, 2018.

[P2] K. Burclová, A. Pázman. Optimum design via I-divergence for stable estimation in generalized regression models. In J. Kunert, C. H. Müller, A. C. Atkinson (Eds.), *mODa 11—Advances in Model-Oriented Design and Analysis*, s. 55—62. Springer, 2016.

Prednášky na medzinárodných konferenciách

- ODAM 2015—Olomoucian Days of Applied Mathematics, Olomouc, Česká republika, 2015. *Simultaneous Optimal Design via Linear Programming*.
- PROBASTAT 2015, Smolenice, Slovensko, 2015. *Optimal Design of Experiments via Linear Programming*.
- 19th European Young Statisticians Meeting, Praha, Česká republika, 2015. *Experience with linear programming for experimental design*.
- mODa 11—Model-Oriented Data Analysis and Optimum Design, Hamminkeln-Dingden, Nemecko, 2016. *Optimum Design via I-Divergence for Stable Estimation in Generalized Regression Models*.
- ODAM 2017—Olomoucian Days of Applied Mathematics, Olomouc, Česká republika, 2017. *Experimental Design for Avoiding False Estimates in Nonlinear Models*.

Grantová aktivita

- Metódy optimálneho navrhovania experimentov (spoluriešiteľ)
VEGA 1/0163/13
Hlavný riešiteľ: doc. Mgr. Radoslav Harman, PhD.
- Metódy optimálneho navrhovania experimentov (spoluriešiteľ)
VEGA 1/0521/16
Hlavný riešiteľ: doc. Mgr. Radoslav Harman, PhD.

- Využitie poznatkov z teórie rizika pri navrhovaní experimentov (hlavný riešiteľ)
Grant UK/162/2017

Optimum design in nonlinear models

The thesis deals with some new approaches of optimal experimental design in nonlinear models. Following the paper Pázman and Pronzato [18] and the monograph Pronzato and Pázman [20], we construct new forms of optimality criteria, we investigate their mathematical properties, and we demonstrate the possibility of obtaining optimal experimental designs using the methods of linear programming.

In the thesis we extend the criteria which are considered in [18] and are related to the stability of the least square estimate in a nonlinear regression model. Namely, applying the I-divergence, we can at the design stage of the experiment reach the improvement of the stability of the maximum likelihood estimate in a generalized regression model based on the exponential family of distributions. In addition, we formulate some other optimality criteria which follow similar purposes but are closely related to different well-known optimality criteria not considered in [18].

Further, we elaborate the issues of the criterion based on the Conditional Value at Risk, which was used in optimal experimental design by Valenzuela, Rojas and Hjalmarsson [24] for the first time. We analyse this criterion from the point of view of the optimal experimental design and we use linear programming to calculate optimal designs.