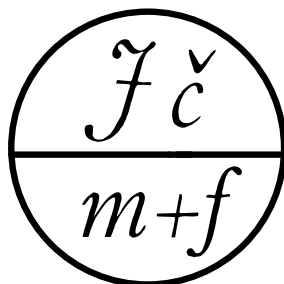




ROBUST 2006

ROBUST 2006

Sborník prací 14. zimní školy JČMF ROBUST 2006
uspořádané Jednotou českých matematiků a fyziků
za podpory KPMS MFF UK
a České statistické společnosti
ve dnech 23. – 27. ledna 2006 ve Lhotě nad Rohanovem



Praha 2006

Všechna práva vyhrazena. Tato publikace ani žádná její část nesmí být reprodukována nebo šířena v žádné formě, elektronické nebo mechanické, včetně fotokopí, bez písemného souhlasu vydavatele.

© (eds.) Jaromír Antoch a Gejza Dohnal

© Jednota českých matematiků a fyziků

ISBN 80-7015-073-4

JČMF 57-554-06

ROBUST 2006 – PÁR SLOV ÚVODEM

Ve dnech 23. – 27. ledna 2006 se ve Lhotě nad Rohanovem v prostorách hotelu Rohanov, jehož pracovníci nám navzdory tuhé zimě připravili velmi příjemné prostředí, uskutečnila již čtrnáctá zimní škola JČMF ROBUST 2006. Tato akce byla připravena skupinou pro výpočetní statistiku JČMF za podpory ČStS, KPMS MFF UK a ÚTM FSI ČVUT. Akce se zúčastnilo 101 účastníků z České republiky, Slovenska, Belgie a Německa.

Mezi účastníky bylo k naší velké radosti mnoho mladých tváří¹. Téměř polovinu účastníků totiž tvořili graduální a postgraduální studenti či ti, kteří obhájili doktorskou práci v roce 2005. Doufáme, že naše akce přispěje k tomu, že stochastika v Česko-Slovensku nevymře ani po meči ani po přeslici. Chtěli bychom také touto cestou poděkovat ČSOB, a.s., jež umožnila účast řadě graduálních studentů MFF UK v Praze, grantu GA ČR 201/05/H007, který podpořil účast desítky postdoktorálních studentů, jakož i grantům dalším, z nichž mohli školitelé uhradit vložné nejenom za sebe ale i za své doktorandy.

Tak jako v minulosti, i ROBUST 2006 byl věnován vybraným trendům matematické i aplikované statistiky, teorie pravděpodobnosti a analýzy dat. Pozvání k přednesení přehledných přednášek přijali:

- Jaromír Antoch, KPMS MFF UK, Praha, *O simulaci řídkých jevů.*
- Bohdan Maslowski, MÚ AV ČR, Praha, *Stochastické diferenciální rovnice.*
- Petr Máša, ADAstra, Praha, *Zpracování a analýza obzvláště velkých reálných dat.*
- Josef Tvrđík, OU, Ostrava, *Evoluční algoritmy.*
- Viktor Witkovský, ÚM SAV, Bratislava, *Netradičně o analýze rozptylu.*

Celkem bylo předneseno 35 přednášek. Dále bylo vystaveno 40 posterů, jež připravili především graduální a postgraduální studenti. Komise ve složení doc. Z. Prášková, RNDr. Martin Janžura a doc. V. Witkovský vyhodnotila jejich vystoupení a navrhla firmě *Elkan* k ocenění za nejlepší prezentované práce (v pořadí od nejlepší) A. Kvitkovičovou, studentku 4. ročníku MFF UK Praha, O. Konára, doktoranda MFF UK a ÚI AV ČR a M. Marušiakovou, doktorandku MFF UK Praha.

Mnoho času též bylo věnováno diskusím. Pondělní večer byl věnován otázkám výpočetní statistiky. Vystoupil na něm zástupce firmy *Elkan*, který předvedl nejnovější verzi programu *MATHEMATICA*. Z prezentace programu *S+* bohužel ze zdravotních důvodů sešlo, kolega Hlávka místo toho promptně účastníky seznámil s nejnovější verzí programového systému *R*. Vedle odborných diskusí se též konaly diskuse volnější, a to ať již během středečního výletu do Kašperských hor či na Javorník a jeho okolí. Také tanečníci, zpěváci a milovníci vepřového² si tentokrát přišli na své. I počasí nám tentokrát

¹Nejmłodší účastníci byly necelé dva roky.

²Takové dobře propečené sele je prý možná nezdravé, ale báječně chutná.

vyšlo, mrzlo sice až praštělo, ale sluníčko přesto statečně ukazovalo svoji sílu. Zvláště ti, kteří měli okna na východ, nestačili ráno co ráno obdivovat jeho překrásné východy.

Z přednesených přednášek naleznete převážnou většinu v příloženém sborníku. V články se proměnily i mnohé postery. Z vystavených posterů naleznete všechny, až na jeden, na příloženém CD. Zároveň CD obsahuje elektronickou verzi sborníku a vybrané fotografie. Jinými slovy to znamená, že do sborníku a jeho elektronické přílohy přispěli prakticky všichni přednášející. Chtěli bychom tímto poděkovat nejenom jim, ale též všem těm, kteří články recenzovali.

Budete se možná divit, že jeden příspěvek je publikován tak říkajíc *per partes*. Jednomu z editorů totiž přišlo nevhodné na jedné straně omezovat ostatní v „rozmachu pera“ a takto ušetřený prostor využít pro prezentaci svého, byť zvaného, příspěvku. Rozhodl se proto do tištěného sborníku zařadit pouze krátkou „upoutávku“, zatímco rozsáhlejší pokračování čtenář nalezne na CD. Poslední dva příspěvky dorazily příliš pozdě, takže byly zařazeny pouze na CD bez toho, že bychom měnili stránkování.

ROBUST 2006 by se neuskutečnil a jeho publikace by neexistovaly nebýt nezištné pomoci mnoha lidí. Zvláště bychom chtěli poděkovat paní Haně Bílkové, Anně Kotěšovcové, Ondřeji Vencálkovi a pracovníkům tiskárny vězeňské služby v Praze na Pankráci. Díky jim Vám všem můžeme popřát příjemné prázdninové počtení.

V Praze 1. července 2006

Jaromír Antoch a Gejza Dohnal

Antoch Jaromír	
<i>O simulaci řídkých jevů</i>	1
Arendacká Barbora	
<i>Approximate confidence intervals on the variance component in a general case of a two-component model</i>	9
Beneš Viktor, Lechnerová Radka, Klebanov Lev	
<i>Nelineární filtrování Coxových bodových procesů</i>	17
Betinec Martin	
<i>Použití ROC křivek pro hodnocení klasifikátorů</i>	25
Brabec Marek	
<i>Lognormal mixtures and size distribution of atmospheric particles</i>	35
Cézová Eliška	
<i>Statistické řízení finančních toků</i>	43
Cimermanová Katarína	
<i>Aplikácia klasifikačných metód na analýzu vydychovaných plynov pre detekciu pľúcnych chorôb</i>	51
Dienstbier Jan	
<i>Kvantilová regrese a odhad Paretova indexu</i>	59
Fabián Zdeněk	
<i>Modifikovaná Raova vzdálenost</i>	67
Fajfrová Lucie	
<i>Testy hypotéz o parametru obecného exponenciálního modelu</i>	75
Friessl Michal	
<i>Porovnání neparametrických bayesovských odhadů při cenzorování</i>	83
Hlávka Zdeňek	
<i>Funkcionální hlavní komponenty pro odhady RNH</i>	91
Hlubinka Daniel, Hurt Jan	
<i>A stochastic version of Kermack-McKendrick model of epidemics</i>	99
Jarušková Daniela	
<i>Analýza extrémů meteorologických řad</i>	109
Klaschka Jan	
<i>O intervalových odhadech pravděpodobností, zvláště malých</i>	119
Kláštěrecký Petr, Kulich Michal	
<i>A note on parameter estimation in regression models for case-cohort data</i>	127
Kolářek Jan	
<i>Volba optimální šířky okna při jádrových odhadech regresní funkce</i>	135
Komárek Arnošt, Lesaffre Emmanuel	
<i>Regrese se shlukovanými dvojitě intervalově cenzorovanými daty: Čas do vzniku zubního kazu</i>	143

Komárková Lenka, Dvořák Jiří	
<i>Vztah firem k životnímu prostředí – aplikace na logistickou regresi s ordinálními daty</i>	151
Konár Ondřej	
<i>Matematické modelování spotřeby zemního plynu domácností a maloobdobatelů</i>	159
Koubková Alena	
<i>Distribution of the delay in the change-point detection</i>	167
Kovářová Milena	
<i>Změny denních maxim a minim teploty vzduchu</i>	175
Kraus David	
<i>Zobecněné lineární modely pro značkové bodové procesy</i>	181
Kulich Michal	
<i>Odhadování percentilových křivek plicní funkce pomocí kvantilové regrese</i>	189
Legát David	
<i>Statistika a spotřebitelské úvěry</i>	197
Marek Jaroslav	
<i>Dobytí jižního pólu</i>	205
Marušiaková Miriam	
<i>Application of permutation principle in multiple structural change test</i>	213
Máša Petr	
<i>Zpracování a analýza obzvláště velkých reálných dat</i>	221
Nanášiová Olga	
<i>S-map and probability</i>	229
Neumanová Martina, Vávra Frant., Nový Pavel, Netrvalová Arnoštka	
<i>Model informačního vlivu a dezinformace</i>	237
Pawlas Zbyněk	
<i>Estimation of the variance in marked point processes</i>	245
Pešta Michal	
<i>Ideas and remarks on isotonic regression in Sobolev spaces</i>	253
Půlpán Zdeněk, Čihák Michal	
<i>Odhad neurčitosti a spolehlivosti stanovení diagnózy</i>	261
Ranocha Pavel	
<i>Iterative methods for calculation of stationary density in some autoregressive models</i>	271
Reisnerová Soňa	
<i>Model vývoje nezaměstnanosti v čase a okresech</i>	279
Saxl I., Ilucová L., Sklenička V., Svoboda M., Král P.	
<i>Problems in estimating structure of nanomaterials</i>	287
Staněk Jakub	
<i>Stochastická verze klasického modelu vývoje epidemie</i>	297

Šimeček Petr	
<i>Gene expression data analysis for in vitro toxicology</i>	305
Šimečková Marie	
<i>Statistical analysis of compulsive checking behavior in rodents – frailty models</i>	313
Špínková Milena	
<i>Příspěvek k didaktice pravděpodobnosti a statistiky</i>	321
Tvrdík Josef	
<i>Evoluční algoritmy</i>	329
Václavík Vladimír, Reif Jiří	
<i>Intervalový odhad prahového parametru některých rozdělení</i>	351
Vaněček Pavel	
<i>Beyond classification</i>	359
Víšek Jan Ámos	
<i>Kolmogorov-Smirnov statistics in multiple regression</i>	367
Wimmer Gejza	
<i>Niektoré matematicko-štatistické modely kalibrácie</i>	375
Witkovský Viktor	
<i>Analýza dát pomocou lineárneho zmiešaného modelu</i>	387
Antoch Jaromír	
<i>On simulation of rare events</i>	403
Dohnal Gejza	
<i>Markovské modely spoľehlivosti software</i>	453
Strouhal Jan	
<i>Klasifikační stromy ve spoľehlivosti software</i>	461

O SIMULACI ŘÍDKÝCH JEVŮ

Jaromír Antoch

Klíčová slova: Řídké jevy, simulace, metoda výběru podle důležitosti (importance sampling), chvost rozdělení, metoda velkých odchylek, Cramérova věta, Gärtnerova-Ellisova věta.

Abstrakt: Cílem tohoto příspěvku je podat přehled vybraných metod vhodných pro odhad pravděpodobností řídkých jevů pomocí simulací. Využívá se přitom dvou základních postupů, tj. metody výběru podle důležitosti a teorie velkých odchylek. Jsou podány jak základní myšlenky tak je diskutováno matematické pozadí problému. V textu je též uvedena řada příkladů a výsledky rozsáhlých simulačních studií. Formální důkazy byly nicméně pro nedostatek místa zkráceny na minimum.

1 Úvod

Tento příspěvek se zabývá problémem odhadu velikosti chvostu náhodné veličiny X , tj. odhadu $P(X > x)$, $x \gg 1$, kde X může mít velice komplikované rozdělení. Místo aproximací, jak je v této oblasti běžné, použijeme k tomuto účelu simulace. Přesněji řečeno, použijeme k tomu tzv. metodu výběru podle důležitosti. Princip této metody spočívá v tom, že náhodné výběry jsou simulovány z jiného rozdělení než-li má X a tvar odhadu je vhodně upraven tak, abychom dostali nestranný a konzistentní odhad. Přitom vyvstává klíčová otázka jak toto alternativní rozdělení „optimálně“ zvolit. V příspěvku ukážeme, jak nám při jejím řešení může pomoci tzv. *metoda velkých odchylek*.

Vzhledem k poměrně velkému rozsahu je tento příspěvek publikován tak říkajíc *per partes*. Autorovi totiž přišlo nevhodné omezovat ostatní v „roz-machu pera“ a sám nedodržel ani prostor pro zvané příspěvky. Tento text je proto pouze krátkou „upoutávkou“ na rozsáhlejší zpracování tématu, které čtenář nalezne na přiloženém CD. Přes poměrně velký rozsah je však i v druhé části naznačen pouze jeden z možných přístupů k této problematice. Spektrum úloh studovaných v literatuře a přístupů k nim je totiž mnohem širší.

2 Metoda výběru podle důležitosti

Předpokládejme, že nás zajímá hodnota

$$\nu = \mathbb{E} \eta(X), \quad (1)$$

kde X je náhodná veličina s hustotou $p(\cdot)$ a $\eta(\cdot)$ je reálná funkce. Pokud $\eta(x) = \mathbb{I}_{[X > x]}$, potom $\nu = P(X > x)$. Jak již bylo řečeno v úvodu, metoda výběru podle důležitosti spočívá v simulování náhodných veličin $Y^{(1)}, \dots, Y^{(k)}$ z některého jiného rozdělení $q(\cdot)$ a použití odhadu

$$\widehat{\nu}_q = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \eta(Y^{(i)}) \frac{p(Y^{(i)})}{q(Y^{(i)})}. \quad (2)$$

Snadno se přesvědčíme, že odhad $\widehat{\nu}_q$ je nestranný, konzistentní a za slabých podmínek regularity též asymptoticky normální. Následující „triviální“ příklad ilustruje blíže základní myšlenku celého postupu.

Příklad 2.1. Nechť se náhodná veličina X řídí standardním normálním rozdělením $N(0, 1)$ a naším cílem je spočítat $\nu_n = P(X > n)$, $n = 1, 2, \dots, 18$. Zkusíme-li pro výpočet použít běžné programy pracující v dvojité přesnosti, rychle zjistíme, že $\Phi(x) = P(X \leq x) = 1 \ \forall x > 8.1$. Můžeme samozřejmě sáhnout k programům typu Mathematica či Maple pracujícím v tzv. libovolné přesnosti nebo si v jazyce C naprogramovat rozvoje navržené v literatuře. Ne každý má však tyto programy k dispozici nebo je ochoten programovat poměrně složité rozvoje. Na druhé straně každý, kdo chce či potřebuje, si může ν_n snadno a rychle odhadnout pomocí simulací při použití prakticky libovolného programu.

Podíváme-li se do Tabulky 1. na hodnoty ν_n pro $n > 5$, je zřejmé, že s klasickou simulací, kdy simulujeme náhodná čísla z $N(0, 1)$ a registrujeme počet překročení úrovně n , neuspějeme, neboť i při extrémně dlouhých simulacích se do chvostu zpravidla ani jednou nestrefíme. Simulační metoda výběru podle důležitosti nám místo toho nabízí pro pevné n generovat čísla $Y^{(i)}$ z $N(n, 1)$, tj. čísla z $N(0, 1)$ posunutá o n , a jako odhad použít

$$\widehat{\nu}_{q,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[Y^{(i)} > n]} \cdot \frac{\phi_0(Y^{(i)})}{\phi_n(Y^{(i)})},$$

kde $\phi_\mu(x)$ je hustota rozdělení $N(\mu, 1)$,

n	ν_n	$\widehat{\nu}_{q,n}$	n	ν_n	$\widehat{\nu}_{q,n}$
1	0.159e-0	0.158e-0	10	7.619e-24	7.493e-24
2	0.023e-0	0.022e-0	11	1.910e-28	2.037e-28
3	1.349e-3	1.349e-3	12	1.776e-33	1.667e-33
4	3.167e-5	3.092e-5	13	6.117e-39	5.802e-39
5	2.866e-7	2.805e-7	14	7.793e-45	7.791e-45
6	9.865e-10	9.938e-10	15	3.670e-51	3.657e-51
7	1.279e-12	1.327e-12	16	6.388e-58	6.519e-58
8	6.220e-16	5.896e-16	17	4.105e-65	3.726e-65
9	1.128e-19	1.172e-19	18	9.740e-73	9.321e-73

Tabulka 1. Přesné hodnoty ν_n a nasimulované odhady $\widehat{\nu}_{q,n}$ získané na základě $k = 10\,000$ opakování.

Přestože jsme udělali velice málo simulací, vidíme, že výsledky jsou velmi dobré i pro velmi velké hodnoty n a tím pádem malé hodnoty ν_n . Zdá se tudíž,

že by nám tento přístup mohl pomoci též při simulování mnohem složitějších situací. Tomu, jak postupovat z určitého hlediska „optimálně“, je věnován tento příspěvek. \square

Příklad 2.2. Častěji se však zabýváme situací poněkud komplikovanější, tj. spočítat nebo alespoň odhadnout

$$\nu_n = P(n^{-1}f_n(Z_{p,n}) \in E), \quad E \subset \mathbb{R}_d, \quad (3)$$

kde $Z_{p,n}$ je náhodná veličina (vektor) s hodnotami v prostoru \mathbb{S}_n rozdělená podle některé pravděpodobnostní míry P_n na \mathbb{S}_n a $f_n : \mathbb{S}_n \rightarrow \mathbb{R}_d$. Odhad metodou výběru podle důležitosti pak má tvar

$$\hat{\nu}_{q,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[n^{-1}f_n(Z_{q,n}^{(i)}) \in E]} \cdot \frac{dP_n}{dQ_n}(Z_{q,n}^{(i)}), \quad (4)$$

kde $Z_{q,n}^{(i)}$ jsou nezávislé realizace náhodné veličiny (vektoru) $Z_{q,n}$ rozdělené podle některé pravděpodobnostní míry Q_n .

Patrně nejčastěji prakticky uvažovanou situací je volba

$$d = 1, \quad \mathbb{S}_n = \mathbb{R}_n, \quad Z_{p,n} = (X_1, \dots, X_n), \quad Z_{q,n} = (Y_1, \dots, Y_n),$$

$$P_n(E) = \int_E p(z_1, \dots, z_n) dz_1 \dots dz_n, \quad Q_n(E) = \int_E q(z_1, \dots, z_n) dz_1 \dots dz_n,$$

$$f_n(\mathbf{z}) = \sum_{j=1}^n z_j \quad \text{a} \quad \frac{dP_n}{dQ_n}(\mathbf{z}) = \frac{p(z_1, \dots, z_n)}{q(z_1, \dots, z_n)}.$$

Jsou-li navíc $\{X_j\}_{j=1}^n$ a $\{Y_j\}_{j=1}^n$ nezávislé, pak se celá situace podstatně zjednodušuje, jelikož v tomto případě

$$\nu_n = P\left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_j \in E\right) \quad \& \quad \hat{\nu}_{q,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[n^{-1} \sum_{j=1}^n Y_j^{(i)} \in E]} \cdot \prod_{j=1}^n \frac{p(Y_j^{(i)})}{q(Y_j^{(i)})},$$

kde $Y_j^{(i)}$, $i = 1, \dots, k$, $j = 1, \dots, n$, jsou nezávislé náhodné veličiny s hustotou $q(\cdot)$. Tento příklad nám mimo jiné ukazuje další z velkých výhod metody výběru podle důležitosti, totiž, že v mnoha případech stačí umět generovat pouze z marginálního rozdělení. \square

2.1 Kolik simulací je třeba provést?

K dosažení předepsané přesnosti odhadu $\hat{\nu}_q$ ($\hat{\nu}_{q,n}$) si samozřejmě můžeme „hrát“ s počtem simulací k . Základní výsledek přitom říká, že počet simulací potřebný k dosažení $100\gamma\%$ přesnosti se spolehlivostí $100\delta\%$ je

$$k_{\gamma,\delta}^{opt} = \frac{u_{(1+\delta)/2}^2}{\gamma^2} \left(\frac{U_q}{\nu^2} - 1 \right), \quad (5)$$

kde u_α je α -kvantil $N(0, 1)$, ν je odhadovaná veličina a U_q je odvozeno ve vztahu (5). V praxi samozřejmě musíme hodnoty ν a U_q nahradit jejich odhady. Podrobný rozbor této úlohy čtenář nalezne v druhé části tohoto příspěvku. Všimněme si nicméně, že vztah (??) nám bohužel nic neříká o tom, jak volit hustotu $q(\cdot)$.

2.2 Jak volit hustotu $q(\cdot)$?

Vraťme se k naší úloze odhadnout $\nu = \mathbb{E} \eta(X)$ pomocí simulací a podívejme se na rozptyl odhadu $\hat{\nu}_q$, pro nějž platí

$$\begin{aligned} k \cdot \text{var}(\hat{\nu}_q) &= \int \left(\eta(y) \frac{p(y)}{q(y)} - \nu \right)^2 q(y) dy = \int \eta^2(y) \frac{p^2(y)}{q(y)} dy - \nu^2 \quad (6) \\ &\equiv U_q - \nu^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Chceme-li zvolit $q(\cdot)$ tak, abychom výraz (5) minimalizovali, můžeme použít Jenssenovu nerovnost. Přitom platí

$$\begin{aligned} U_q &= \int \eta^2(y) \frac{p^2(y)}{q^2(y)} q(y) dy = \mathbb{E}_q \left(\eta^2(Y) \frac{p^2(Y)}{q^2(Y)} \right) \\ &\geq \left(\mathbb{E}_q |\eta(Y)| \frac{p(Y)}{q(Y)} \right)^2 = \left(\int |\eta(y)| p(y) dy \right)^2, \quad (7) \end{aligned}$$

a rovnosti je dosaženo právě tehdy je-li $|\eta(Y)| p(Y)/q(Y)$ skoro jistě konstanta. Pokud tedy zvolíme

$$q_{opt}(x) = \frac{p(x) |\eta(x)|}{\int p(x) |\eta(x)| dx}, \quad (8)$$

potom $k \cdot \text{var}(\hat{\nu}_q) = 0$. Tato volba však není tak fantastická jak by se mohlo na první pohled zdát, neboť $q_{opt}(\cdot)$ závisí právě na tom, co neznáme a chceme odhadnout. Na druhé straně nám však naznačuje jednu z cest, jak při hledání „optimální“ hustoty $q(\cdot)$ postupovat.

Další úvahu začněme speciální situací kdy $\eta(\cdot) = \mathbb{I}_{[E]}(\cdot)$, tj. případem, kdy řídkým jevem je sama množina E . Je zřejmé, že v tomto případě nosič nenulové hmoty $q_{opt}(\cdot)$ je podmnožinou E . To nás intuitivně vede k takové volbě, jež zaručí co možná nejvíce zásahů množiny E během simulací. Za druhé je jasné, že $q_{opt}(\cdot)$ má na E týž tvar jako původní hustota až na to, že tato je přeškálována hodnotou ν^{-1} . Má-li tedy některá oblast E více pravděpodobnostní hmoty než oblast jiná, měla by mít tuto vlastnost i $q_{opt}(\cdot)$. V případě, kdy $\eta(\cdot)$ je některá obecná funkce, musíme samozřejmě vzít v úvahu též její tvar na množině E a její „interferenci“ s hustotou $p(\cdot)$. Výše uvedené úvahy lze shrnout následovně:

1. Hledanou hustotu $q(\cdot)$ z níž budeme generovat zvolme tak, abychom jev E zasáhli co nejčastěji.
2. Hledanou hustotu $q(\cdot)$ z níž budeme generovat zvolme tak, abychom s větší pravděpodobností zasáhli ty oblasti E , které mají větší pravděpodobnost než oblasti s pravděpodobností menší.

Tyto dva principy stály v literatuře u mnoha *ad hoc* návrhů pro volbu hustoty $q(\cdot)$. Mezi nejpopulárnější mezi nimi patří:

1. Metoda posunutí (*the mean translation method*).
2. Metoda změny parametru měřítka (*the variance scaling method*).

Vraťme se zpět k úloze odhadnout pomocí simulací $P(X > m)$, $m \in \mathbb{R}_1$, a ukažme si použití těchto dvou metod. Metoda posunutí odpovídá volbě

$$q(x) = p(x - m).$$

Její popularita je spojená nejenom s její jednoduchostí, ale též s jasným pravidlem o kolik původní hustotu posunout. Na druhé straně metoda změny parametru měřítka spočívá ve volbě

$$q(x) = \frac{1}{a} p\left(\frac{x}{a}\right).$$

Bohužel, v tomto případě neexistuje jednoduchý návod na to, jak parametr měřítka a při pevné hodnotě m zvolit. Řadu dalších nápadů lze nalézt v monografii Srinivasan (2002). Příklady použití obou těchto metod spolu s příklady a výsledky poměrně rozsáhlých simulací lze nalézt v druhé části tohoto příspěvku.

3 Pravděpodobnosti řídkých jevů a metoda velkých odchylek

Vraťme se zpět k úloze (6), tj. odhadnout

$$\nu_n = P(n^{-1} f_n(Z_{p,n}) \in E), \quad E \subset \mathbb{R}_d,$$

pomocí odhadu $\hat{\nu}_{q,n}$ uvedeného v (6) Jak jsme viděli, pro jeho rozptyl platí

$$k \cdot \text{var}(\hat{\nu}_{q,n}) = U_{q,n} - \nu_n^2 \geq 0.$$

Jinými slovy to znamená, že asymptotický řád (v n) s nímž $U_{q,n}$ klesá k nule nemůže být větší než řád s nímž klesá ν_n^2 .

Předpokládáme-li, že existují následující limity, tj.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \nu_n = -I \quad \text{a} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log U_{q,n} = -R, \quad (9)$$

pak zřejmě $R \leq 2I$. Nechť je naším cílem nalezení takového rozdělení $q(\cdot)$ pro nějž $R = 2I$. Podaří-li se nám to, nazveme *odpovídající simulační proceduru vydatnou (eficientní)*. Bohužel, hledání odhadů jež jsou vydatné ve výše uvedeném smyslu není přímočará úloha. Jednou z cest, jak takové rozdělení nalézt, nabízí tzv. *metoda velkých odchylek*.

3.1 Metoda velkých odchylek

Nechť X_1, \dots, X_n jsou nezávislé náhodné veličiny se střední hodnotou ζ , konečným rozptylem σ^2 a $\bar{X}_n = n^{-1} \sum_{i=1}^n X_i$. Je dobře známo, že potom

$$\sqrt{n}(\bar{X}_n - \zeta) \xrightarrow{\mathcal{D}} N(0, \sigma^2), \quad n \rightarrow \infty,$$

takže $P(\bar{X}_n - \zeta \geq a/\sqrt{n}) \rightarrow 1 - \Phi(a/\sigma)$. Jinými slovy to znamená, že typické hodnoty odchylek \bar{X}_n od ζ jsou řádu $n^{-1/2}$ a hodnoty $\bar{X}_n - \zeta$ jež překročí pevnou hodnotu $a > 0$ tvoří při rostoucím n posloupnost *řidkých*, tj. málo pravěpodobných, jevů. Teorie velkých odchylek, kterou zahájil Cramér (1938) a jejíž první statistické aplikace ukázal Chernoff (1952), se mimo jiné zabývá pravděpodobnostmi takovýchto jevů, tj. pravděpodobnostmi $\nu_n = P(\bar{X}_n - \zeta \geq a)$, $a > 0$. Je zřejmé, že při pevném $a > 0$ konverguje $\nu_n \rightarrow 0$ při $n \rightarrow \infty$. Chernoff (1952) ukázal, že za výše uvedených předpokladů

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log P(\bar{X}_n - \zeta \geq a) = \log \varrho, \quad (10)$$

kde $\varrho = \inf_t [e^{at} M(t)]$ a $M(t) = \mathbb{E} e^{t(X-\zeta)}$ je momentová vytvořující funkce $X - \zeta$. Jeho výsledky byly později zobecněny řadou autorů pro mnohem obecnější situace, blíže viz druhá část příspěvku. Z (??) snadno vyplývá, že $\nu_n \approx \varrho^n$. Poznamenejme, že se nejedná o ekvivalenci nýbrž pouze o exponenciální řád s nímž $\nu_n \rightarrow 0$ při $n \rightarrow \infty$ ³.

3.2 Jak spojit metodu velkých odchylek a simulační metodu výběru podle důležitosti

Výše uvedený pojem vydatnosti simulační procedury hraje klíčovou roli při volbě rozdělení z něž simulujeme, neboť se snažíme najít takovou hustotu $g(\cdot)$, jež nám zaručuje vydatnou (eficientní) simulační proceduru z hlediska velkých odchylek. Podívejme se na problém přesněji.

Jelikož $\nu_n \rightarrow 0$ při $n \rightarrow \infty$ exponenciálně rychle, počet simulací potřebný pro dosažení předepsané přesnosti s danou spolehlivostí též roste exponenciálně rychle. Jedinou výjimkou je případ, kdy $U_{q,n} \rightarrow 0$ řádově stejně rychle jako ν_n^2 , $n \rightarrow \infty$. Filosofie hledání eficientní (z hlediska velkých odchylek) procedury je tedy založena na minimalizaci asymptotického rozptylu odhadu $\hat{\nu}_{q,n}$ tak, aby $U_{q,n}/\nu_n^2 \rightarrow const$ pro $n \rightarrow \infty$, $0 < const < \infty$.

Jinými slovy, pro pevné n se na celý problém díváme jako na jeden z posloupnosti (uvažováno v n) odpovídajících problémů velkých odchylek a jako řešení použijeme jim odpovídající asymptotické řešení. Doufáme přitom, že asymptotika funguje dobře, nebo alespoň uspokojivě, již pro malé hodnoty n ,

³Čtenář snadno nahlédne, že je-li například $X - \zeta$ symetrická kolem nuly, potom také

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} P(|\bar{X}_n - \zeta| \geq a) = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log 2P(\bar{X}_n - \zeta \geq a) = \log \varrho.$$

což je pro malé hodnoty odhadovaných pravděpodobností zpravidla pravda. Ukazuje se, že v řadě případů se jedná o mnohem jednodušší, přístupnější a přitom dostatečně přesnou cestu než hledání takové hustoty, jež v dané úloze minimalizuje přímo rozptyl odhadu metodou výběru podle důležitosti.

Vyvstává samozřejmě přirozená otázka, zda vydatné odhady pro námi uvažovaný typ problémů vůbec existují. Odpověď je dle očekávání kladná. Vede k nim například volba

$$dQ_n = \nu_n^{-1} \cdot \mathbf{I}_{[n^{-1}f_n(Z_{p,n}) \in E]} dP_n,$$

tj. volba $q_{opt(\cdot)}$ ze vztahu (7), pro níž $U_{q,n} = \nu_n^2$ a $k \cdot \text{var} \hat{\nu}_{q,n} = 0$. Jak jsme nicméně viděli v odstavci 2.2, tato hustota je prakticky k ničemu, neboť zásadně závisí na tom co odhadujeme.

Mnohem důležitější z praktického hlediska se ukazuje volba

$$q_0(\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x})e^{\langle \boldsymbol{\theta}_w, f(\mathbf{x}) \rangle}}{M_f(\boldsymbol{\theta}_w)}, \quad (11)$$

kde $M_f(\boldsymbol{\theta}) = \mathbb{E} e^{\langle \boldsymbol{\theta}, f(\mathbf{X}) \rangle}$ je momentová vytvořující funkce $f(\mathbf{X})$, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ označuje skalární součin, $\boldsymbol{\theta}_w = \arg \sup_{\boldsymbol{\theta}} [\langle \boldsymbol{\theta}, w \rangle - \log M_f(\boldsymbol{\theta})]$ a w je tak zvaný dominující bod množiny E , tj. takový bod, jež leží na hranici množiny E a pro nějž existuje právě jeden bod $\boldsymbol{\theta}_w$ takový, že $\nabla \varphi(\boldsymbol{\theta}_w) = w$, kde

$$\varphi(\boldsymbol{\theta}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(\boldsymbol{\theta}) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \mathbb{E} e^{\langle \boldsymbol{\theta}, f_n(Z_{p,n}) \rangle}.$$

Details viz druhá část tohoto příspěvku.

Podívejme se nyní na dva ilustrativní příklady.

Příklad 3.1. Nechť $\{X_j\}_{j=1}^n$ jsou nezávislé náhodné veličiny s normálním rozdělením $N(0, 1)$ a zajímá nás odhad $P(n^{-1} \sum_{j=1}^n X_j > T)$. Všimněme si, že tato úloha je prakticky ekvivalentní úloze studované v příkladu 2.1. Snadno zjistíme, že $M_X(\theta) = e^{\theta^2/2}$, dominující bod množiny $E = (T, \infty)$ je bod T a $\theta_T = T$. Potom „optimální“ hustota z níž bychom měli simulovat, a jež vede na vydatnou simulační proceduru, je podle (41) tvaru

$$q_T(x) = \frac{\phi_0(x)e^{\theta_T x}}{M_X(\theta_T)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(x-T)^2/2}.$$

To však není nic jiného než hustota, kterou dostaneme pomocí metody posunutí, což znamená, že v tomto speciálním případě je metoda posunutí vydatnou (eficientní) simulační procedurou. Poznamenejme, že řídí-li se X_j rozdělením $N(0, \sigma^2)$, potom k vydatné simulační proceduře vede volba $q_T(x) \sim N(T, \sigma^2)$. \square

Příklad 3.2. Necht $\{X_j\}_{j=1}^n$ jsou nezávislé náhodné veličiny s normálním rozdělením $N(0, 1)$ a zajímá nás odhad $P(n^{-1} \sum_{j=1}^n X_j^2 > T)$. V tomto případě $f(x) = x^2$, $M_f(\theta) = (1 - 2\theta)^{-1/2}$, $\theta < 1/2$, dominující bod množiny $E = (T, \infty)$ je bod T a $\theta_T = (T - 1)/2T$. Potom „optimální“ hustota, z níž bychom měli simulovat a jež vede na vydatnou simulační proceduru, je podle (41) tvaru

$$q_T(x) = \frac{\sqrt{1 - 2\theta_T}}{\sqrt{2\pi}} e^{\theta_T x^2} e^{-x^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} e^{-x^2/2T}.$$

To znamená, že v tomto případě k vydatné simulační proceduře vede metoda změny měřítka původní hustoty. \square

Reference

- [1] Antoch J. (2006), *On simulation of rare events*. This volume, strana 403.
- [2] Chernoff H. (1952), *A measure of asymptotic efficiency for tests of a hypothesis based on sums of random variables*. Annals of Mathematical Statistics **23**, 493–507.
- [3] Cramér H. (1938), *Sur un nouveau theoreme-limite de la theorie des probabilités*. Actualités Scientifiques et Industrielles **736**, Colloque consacré à la théorie des probabilités, Vol. 3., Hermann, Paris, 5–23.
- ...
- [4] Srinivasan R. (2002), *Importance Sampling*. Springer-Verlag, Berlin.

Další citace jsou uvedeny v druhé části příspěvku.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GA ČR 201/06/0186 a výzkumným záměrem MSM 0021620839.

Adresa: J. Antoch, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín
E-mail: jaromir.antoch@mff.cuni.cz

APPROXIMATE CONFIDENCE INTERVALS ON THE VARIANCE COMPONENT IN A GENERAL CASE OF A TWO-COMPONENT MODEL

Barbora Arendacká

Keywords: Confidence intervals, variance component, mixed linear models.

Abstract: The paper compares properties of 3 approximate confidence intervals on the variance component corresponding to the random factor in a general case of a mixed linear model with two variance components, supposing only that more than a minimum number of observations is available. Namely, relationships between intervals suggested by Park and Burdick [6], Hartung and Knapp [5] and Thomas and Hultquist [8] are investigated. It is shown that the latter, originally derived for an unbalanced one-way random effects model, can be used in a general case as well. The properties of the 3 intervals are illustrated also through a simulation study.

1 Introduction

Suppose that an n -dimensional vector of observations y comes from a multivariate normal distribution $N_n(X\beta, \sigma_1^2 ZZ^T + \sigma^2 I_n)$, where X, Z are known matrices and $\beta, (\sigma_1^2, \sigma^2)^T$ are vectors of unknown parameters ($\sigma_1^2 \geq 0, \sigma^2 > 0$). Further suppose that $\mathcal{R}(Z) \not\subseteq \mathcal{R}(X)$, where $\mathcal{R}(A)$ denotes the space generated by columns of the matrix A . The task is to construct a confidence interval on the component σ_1^2 . Since this parameter is not influenced by a translation in mean, the usual next step is a reduction of the problem by constructing a maximal invariant with respect to that transformation, i.e. y is transformed into $B^T y$, where $BB^T = M_X = I_n - X(X^T X)^- X$ and $B^T B = I_{n-\text{rank}(X)}$. The vector $B^T y \sim N_{n-\text{rank}(X)}(0, \sigma_1^2 B^T Z Z^T B + \sigma^2 I)$ and a minimal sufficient statistic for its family of distributions is a vector consisting of mutually independent quadratic forms

$$U_i = y^T B E_i B^T y \sim (\lambda_i \sigma_1^2 + \sigma^2) \chi_{\nu_i}^2, \quad i = 1, \dots, r,$$

where $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_r \geq 0$ are the distinct eigenvalues of the matrix $B^T Z Z^T B$, ν_i are their multiplicities and E_i are the corresponding matrices from the spectral decomposition of $B^T Z Z^T B$ ($E_i E_i = E_i, E_i E_j = 0, i \neq j$). If $\lambda_r = 0$, then $E_r = I - \sum_{i=1}^{r-1} E_i$. The smallest eigenvalue is nonzero only in cases with minimum observations available, therefore in the following we will suppose that $\lambda_r = 0$, i.e. $U_r \sim \sigma^2 \chi_{\nu_r}^2$.

Construction of a confidence interval on σ_1^2 is complicated by the presence of the nuisance parameter σ^2 and known solutions are only approximate. Some of them are applicable only in special cases of the model, e.g.

the well-known Williams-Tukey interval [11], [9], [3] suitable for models with $r = 2$ or intervals for different ANOVA models with mixed effects [4]. Apart from the asymptotic interval based on the REML estimator of σ_1^2 and Satterthwaite's approximation, which cannot be recommended for small-sized samples (see [6]), in a general case of our model one can construct an interval derived by Park and Burdick [6] and that proposed by Hartung and Knapp [5]. These intervals will be considered in detail in sections 2 and 4. In section 3 we will show that the interval derived by Thomas and Hultquist [8], originally designated for unbalanced one-way random effects models, can be used in a general setting as well. This interval is based on the same sum of squares as the Park-Burdick interval, which is reflected also in similar results obtained by these two methods in a simulation study described in section 5. In that study all the 3 mentioned intervals were compared with respect to the probability of coverage and the average length.

In the following $F_{m,n;\alpha}, \chi_{m;\alpha}^2$ denote the α quantiles of the corresponding F and χ^2 distributions. Also, the notation established in this section will be used further throughout the text.

2 Park-Burdick interval (PB interval)

Park and Burdick [6] suggested a confidence interval on σ_1^2 based on the following mean sums of squares

$$S_M^2 = y^T F^T (FZZ^T F^T)^+ Fy/s \text{ and } S_E^2 = y^T (I - P_{X^*})y/p,$$

where $X^* = [X, ZZ^T]$, P_A is the orthogonal projector on $\mathcal{R}(A)$, $F = P_{X^*} - P_X$, $s = \text{rank}(X^*) - \text{rank}(X)$ and $p = n - \text{rank}(X^*)$ (supposing that $s, p > 0$). Since

$$(FZZ^T F^T)^+ = (M_X ZZ^T M_X)^+ = (BB^T ZZ^T BB^T)^+ = \sum_{i=1}^{r-1} BE_i B^T / \lambda_i$$

and $FBE_i B^T = BE_i B^T$, $i = 1, \dots, r-1$
(because $FM_X ZZ^T M_X = FFZZ^T M_X = FZZ^T M_X = M_X ZZ^T M_X$),

$$sS_M^2 = \sum_{i=1}^{r-1} U_i / \lambda_i.$$

It is obvious that $s = \text{rank}(FZZ^T F^T) = \sum_{i=1}^{r-1} \nu_i$, from which it follows immediately that $p = \nu_r$ ($s + p = n - \text{rank}(X)$) and because $pS_E^2 / \sigma^2 \sim \chi_p^2$ for an arbitrary configuration of parameters σ_1^2, σ^2 , by Theorem 3.3 in [7] we get $pS_E^2 = U_r$.

Denote $h = \sum_{i=1}^{r-1} \nu_i (\sum_{i=1}^{r-1} \nu_i / \lambda_i)^{-1}$. Then $E(S_M^2) = \sigma_1^2 + \sigma^2 / h$ and in [6] it is shown that under the limit $\sigma_1^2 / \sigma^2 \rightarrow \infty$, $sS_M^2 / E(S_M^2)$ has a χ_s^2 distribution. The same limiting distribution remains valid also in the case when

all nonzero eigenvalues of the matrix FZZ^TF^T approach a common nonzero constant ($\lambda_i \rightarrow \lambda, i = 1, \dots, r-1$). Moreover S_E^2 and S_M^2 are independent.

Based on the stated properties of S_E^2 , S_M^2 and the fact that $\sigma_1^2 = E(S_M^2) - E(S_E^2)/h$, Park and Burdick employed the method described in [4](pp. 37-39) and their proposed $(1 - 2\alpha)100\%$ confidence interval on σ_1^2 , $[L_{PB}, U_{PB}]$ is of the form

$$\begin{aligned} L_{PB} &= S_M^2 - S_E^2/h - (G_1^2 S_M^4 + H_2^2 S_E^4/h^2 + G_{12} S_M^2 S_E^2/h)^{1/2} \\ U_{PB} &= S_M^2 - S_E^2/h + (H_1^2 S_M^4 + G_2^2 S_E^4/h^2 + H_{12} S_M^2 S_E^2/h)^{1/2} \end{aligned} \quad (1)$$

where $G_1 = 1 - 1/F_{s,\infty;1-\alpha}$, $G_2 = 1 - 1/F_{\nu_r,\infty;1-\alpha}$, $H_1 = 1/F_{s,\infty;\alpha} - 1$, $H_2 = 1/F_{\nu_r,\infty;\alpha} - 1$, $G_{12} = [(F_{s,\nu_r;1-\alpha} - 1)^2 - G_1^2 F_{s,\nu_r;1-\alpha}^2 - H_2^2]/F_{s,\nu_r;1-\alpha}$, $H_{12} = [(1 - F_{s,\nu_r;\alpha})^2 - H_1^2 F_{s,\nu_r;\alpha}^2 - G_2^2]/F_{s,\nu_r;\alpha}$. Negative bounds are put equal to 0. However, as the authors remark in [6], the method used requires independent mean sums of squares that are χ^2 distributed after appropriate scaling. Therefore good properties of the derived interval may be expected for large values of σ_1^2/σ^2 , or in models with not very different $\lambda_i, i = 1, \dots, r-1$.

Really, if $\sigma_1^2/\sigma^2 \rightarrow \infty$, then sS_M^2/σ_1^2 converges in distribution $sS_M^2/\sigma_1^2 \xrightarrow{\mathcal{D}} Q$, where $Q \sim \chi_s^2$ and $S_E^2/S_M^2 = \frac{\sigma^2 S_E^2/\sigma^2}{\sigma_1^2 S_M^2/\sigma_1^2} \xrightarrow{\mathcal{D}} 0$. Since

$$L_{PB} = S_M^2(1 - S_E^2/(hS_M^2) - (G_1^2 + H_2^2 S_E^4/(h^2 S_M^4) + G_{12} S_M^2/(hS_E^2))^{1/2})$$

$$U_{PB} = S_M^2(1 - S_E^2/(hS_M^2) + (H_1^2 + G_2^2 S_E^4/(h^2 S_M^4) + H_{12} S_E^2/(hS_M^2))^{1/2})$$

and G_1, H_1 are positive constants for all commonly used values of $\alpha (\leq 0.1)$, it is obvious that for $\sigma_1^2/\sigma^2 \rightarrow \infty$ (by Cramer-Wold Theorem([2], p. 49))

$(L_{PB}/\sigma_1^2, U_{PB}/\sigma_1^2) \xrightarrow{\mathcal{D}} (Q/\chi_{s;1-\alpha}^2, Q/\chi_{s;\alpha}^2)$. Then for the probability of coverage of the true value of σ_1^2 it holds

$$P(L_{PB} \leq \sigma_1^2 \leq U_{PB}) \rightarrow P(\chi_{s;\alpha}^2 \leq Q \leq \chi_{s;1-\alpha}^2) = 1 - 2\alpha.$$

If all nonzero eigenvalues λ_i coincide (i.e. $r = 2$), the proposed interval is exact also for $\nu_2 \rightarrow \infty$ and it includes zero in accordance with the result of the uniformly most powerful invariant test of the nullity of σ_1^2 on the significance level α (i.e. when the hypothesis of the nullity is not rejected).

3 Thomas-Hultquist interval (TH interval)

In [8] Thomas and Hultquist proposed an interval on σ_1^2 for the case of an unbalanced one-way random-effects model, $y_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij}$, $i = 1, \dots, a$, $j = 1, \dots, n_i$. This is a special case of our model, in which Z is a block matrix with $1_{n_1}, \dots, 1_{n_a}$ on the diagonal and the matrix $X = 1_n$, where $n = \sum_{i=1}^a n_i$ and 1_k denotes a vector of length k consisting of ones. The TH interval is based on: U_r , the sum of squares within groups from the ANOVA table, and $S_{\bar{y}}^2 = \frac{1}{a-1} \sum_{i=1}^a (\bar{y}_i - \frac{1}{a} \sum_{i=1}^a \bar{y}_i)^2$, the sample variance of the sample means in the groups. It holds: $U_r/\sigma^2 \sim \chi_{\nu_r}^2$ ($\nu_r = n - a$), U_r and $S_{\bar{y}}^2$ are

independent and in [8] it is proved that if all $n_i \rightarrow k$ or if $\sigma_1^2/\sigma^2 \rightarrow \infty$, then $(a-1)S_y^2/(\sigma_1^2 + \tilde{n}\sigma^2)$ is χ_{a-1}^2 distributed, ($\tilde{n} = (1/a) \sum_{i=1}^a (1/n_i)$). Considering that if $n_i \rightarrow k$, then $\lambda_i \rightarrow \lambda$, it is apparent that S_y^2 and S_M^2 have similar limiting properties. Actually, $(a-1)S_y^2 = sS_M^2 = \sum_{i=1}^{r-1} U_i/\lambda_i$. Namely,

$$(a-1)S_y^2 = y^T Z(Z^T Z)^{-1}(I_a - 1_a 1_a^T/a)(Z^T Z)^{-1} Z^T y$$

$$\sum_{i=1}^{r-1} U_i/\lambda_i = y^T \left(\sum_{i=1}^{r-1} B E_i B^T / \lambda_i \right) y = y^T (M_X Z Z^T M_X)^+ y$$

and by directly checking the properties of the Moore-Penrose generalized inverse, using the special forms of the matrices X, Z , it can be shown that $(M_X Z Z^T M_X)^+ = Z(Z^T Z)^{-1}(I_a - 1_a 1_a^T/a)(Z^T Z)^{-1} Z^T$. Also $\sum_{i=1}^{r-1} \nu_i/\lambda_i = \text{tr}(M_X Z Z^T M_X)^+ = \text{tr} Z(Z^T Z)^{-1}(I_a - 1_a 1_a^T/a)(Z^T Z)^{-1} Z^T = \text{tr}(Z^T Z)^{-1}(I_a - 1_a 1_a^T/a) = \frac{a-1}{a} \sum_{i=1}^a 1/n_i = \frac{s}{\tilde{h}} \sum_{i=1}^a 1/n_i$, from which $1/h = \tilde{n}$.

Thomas and Hultquist applied the Williams-Tukey [11, 9, 3] procedure on U_r, S_y^2 and the proposed $(1-2\alpha)100\%$ interval, $[L_{TH}, U_{TH}]$, is of the form:

$$L_{TH} = \frac{s}{\chi_{s,1-\alpha}^2} \left(S_M^2 - \frac{1}{h} S_E^2 F_{s,\nu_r;1-\alpha} \right), \quad U_{TH} = \frac{s}{\chi_{s,\alpha}^2} \left(S_M^2 - \frac{1}{h} S_E^2 F_{s,\nu_r;\alpha} \right). \quad (2)$$

Negative bounds are put equal to 0. It can be shown that the TH interval is exact if $\sigma_1^2/\sigma^2 \rightarrow \infty$ and similarly to the PB interval, if $r = 2$, it is exact also for $\nu_2 \rightarrow \infty$ and it contains zero in accordance with the result of the uniformly most powerful invariant test of the nullity of σ_1^2 on the significance level α (if $r = 2$, the TH interval coincides with the Williams-Tukey interval). Also, both PB and TH intervals contain zero at the same time ([4], p. 39).

4 Hartung-Knapp interval (HK interval)

Hartung and Knapp [5] proposed an $(1-2\alpha)100\%$ approximate confidence interval on σ_1^2 based on an exact interval for the ratio of the variance components σ_1^2/σ^2 derived by Wald [10] (see also [7]). The bounds of the HK interval are obtained by multiplying the bounds of the exact confidence interval on σ_1^2/σ^2 by an unbiased estimator of $\sigma^2 : U_r/\nu_r$. More precisely, $L_{HK} = lU_r/\nu_r$, $U_{HK} = uU_r/\nu_r$, where l, u are nonnegative solutions (or zeros if nonnegative solutions do not exist) to the following equations:

$$\sum_{i=1}^{r-1} \frac{U_i}{\lambda_i l + 1} = s F_{s,\nu_r;1-\alpha} U_r/\nu_r \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^{r-1} \frac{U_i}{\lambda_i u + 1} = s F_{s,\nu_r;\alpha} U_r/\nu_r. \quad (4)$$

As the left sides in the stated equations are strictly decreasing functions of l, u respectively, on $(-1/\lambda_1, \infty)$, if there exists a nonnegative solution, it is unique. The solutions can be obtained e.g. by the Newton-Raphson method.

Since under the limit $\nu_r \rightarrow \infty$ the estimator U_r/ν_r becomes precise, it is obvious that the HK interval is exact for $\nu_r \rightarrow \infty$. The interval also contains zero in accordance with the result of the Wald test of nullity of σ_1^2 on the significance level α . Denote $V_i = U_i/(\lambda_i\sigma_1^2)$, then for $\sigma_1^2/\sigma^2 \rightarrow \infty$, $(V_1, \dots, V_{r-1}, \frac{U_r}{\sigma^2} \frac{\sigma^2}{\sigma_1^2}) \xrightarrow{D} (Q_1, \dots, Q_{r-1}, 0)$, where $Q_i \sim \chi_{\nu_i}^2$ and the Q_i s are mutually independent. For the probability of coverage of the true value of σ_1^2 it holds

$$\begin{aligned} & P(L_{HK} \leq \sigma_1^2 \leq U_{HK}) = \\ & = P\left(sF_{s,\nu_r;\alpha}U_r/\nu_r \leq \sum_{i=1}^{r-1} \frac{U_i}{\lambda_i\sigma_1^2\nu_r/U_r + 1} \leq sF_{s,\nu_r;1-\alpha}U_r/\nu_r\right) = \\ & = P\left(sF_{s,\nu_r;\alpha} \leq \sum_{i=1}^{r-1} \frac{V_i}{1 + \frac{1}{\lambda_i} \frac{U_r}{\nu_r} \frac{\sigma^2}{\sigma_1^2}} \leq sF_{s,\nu_r;1-\alpha}\right), \end{aligned}$$

thus under the limit $\sigma_1^2/\sigma^2 \rightarrow \infty$ we get

$$P(L_{HK} \leq \sigma_1^2 \leq U_{HK}) \rightarrow P\left(sF_{s,\nu_r;\alpha} \leq \sum_{i=1}^{r-1} Q_i \leq sF_{s,\nu_r;1-\alpha}\right).$$

Denote the limiting probability of coverage $P_{2\alpha,s,\nu_r}$. In Table 1 the differences between $P_{2\alpha,s,\nu_r}$ and the required confidence level $1 - 2\alpha$ are stated for 90%, 95% and 99% intervals and different values of s, ν_r . Naturally, these

	$P_{2\alpha,s,\nu_r} - (1 - 2\alpha)$				
	$s = 2$ $\nu_r = 4$	$s = 2$ $\nu_r = 25$	$s = 10$ $\nu_r = 25$	$s = 10$ $\nu_r = 50$	$s = 30$ $\nu_r = 50$
$2\alpha = 0.1$	0.0484	0.0160	0.0479	0.0294	0.0614
$2\alpha = 0.05$	0.0248	0.0113	0.0283	0.0187	0.0355
$2\alpha = 0.01$	0.0050	0.0036	0.0067	0.0051	0.0083

Table 1: The differences between the probability of coverage of an $(1 - 2\alpha)$ 100% HK interval when $\sigma_1^2/\sigma^2 \rightarrow \infty$ and the required confidence level.

differences are smaller if s is substantially smaller than ν_r . The fact that the HK interval tends to be conservative for large σ_1^2/σ^2 was observed also by Hartung and Knapp [5] in their simulation study.

5 Simulation study

Performance of the 3 approximate intervals will be now illustrated on 6 concrete examples of our model. The forms of the matrices X, Z for the different

examples are stated in Table 2. Designs No. 2, 3, 6 were considered also in [6, 5] and Example 4 in [1]. In each example, for fixed β and values of the variance components $\sigma_1^2 = 0.001, 0.1, \dots, 0.999$, and $\sigma^2 = 1 - \sigma_1^2$, the vector of observations y was generated 10 000-times and 95% PB, TH and HK intervals were constructed. The bounds of the HK interval were computed using the Newton-Raphson method with tolerance 10^{-14} . The choice of the values of the variance components was inspired by their choice in [6]. Figure 1 displays the simulated probabilities of coverage and the average lengths of the 95% intervals relative to σ_1^2 . Note that increase of σ_1^2 implies increase of σ_1^2/σ^2 . In plots concerning the probability of coverage, bounds which there is a 95% chance for the simulated value to lie between if the true probability of coverage is 0.95 (using the normal approximation to the binomial) are displayed as well.

	X	Z	s	ν_r
1	1_7	$n_i : 2, 2, 3$	2	4
2	$[1_{30} v_{30}]$	$n_i : 5, 10, 15$	2	26
3	$[1_{102} v_{102}]$	$n_i : 1, 1, 100$	2	98
4	$[1_{30} t]$ $t : 30 \times 1,$ $t_i = -3 + 6 * (i - 1)/29$	$diag(1_6, 1_6, 1_6, 1_6, 1_6, w)$ $w : 30 \times 1,$ $w_i = (-2 + 4 * (i - 1)/29)^2$	5	23
5	1_{14}	$n_i : 1, 1, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2$	9	4
6	$[1_{59} v_{59}]$	$n_i : 1, 1, 4, 5, 6, 6, 8, 8, 10, 10$	9	48

Table 2: Forms of the matrices X, Z in the considered examples and the degrees of freedom s, ν_r . v_k is a $k \times 1$ vector with coordinates in $[0,1]$, 1_k is a $k \times 1$ vector consisting of ones. If not stated otherwise, Z is a block diagonal matrix with 1_{n_i} on the diagonal.

Discussion

Examples 1, 2 and 5 represent a situation when the values of $1/\lambda_i$ are not very far apart from each other, which contributes to the optimality of the TH and PB intervals for $\sigma_1^2 = 0$. Low values of ν_r in these examples result in the conservativeness of the HK intervals, which is especially conspicuous in Example 5, where $s > \nu_r$. The effect of higher ν_r on the conservativeness of the HK intervals can be observed comparing Examples 1, 2 and 3, or 5 and 6.

Results in Examples 3, 4 and 6 show that in models with low ν_r and much different $1/\lambda_i$, the TH and PB intervals may not maintain the required confidence level even for relatively large values of σ_1^2/σ^2 . However, in all considered situations the confidence level reached by the TH interval was at least as high as that obtained by the PB interval.

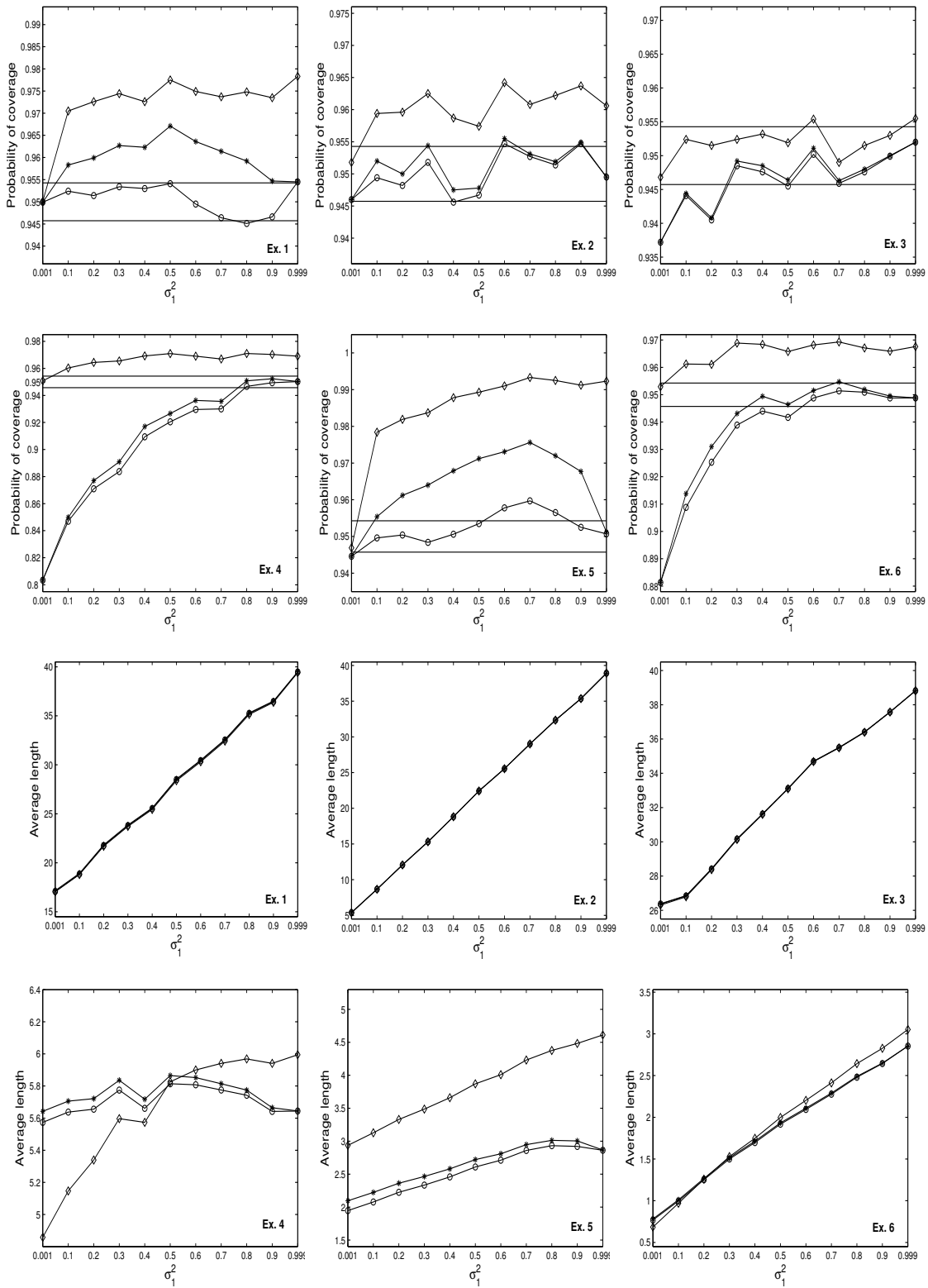


Figure 1: Simulated probabilities of coverage and average lengths of 95% TH(*), PB(o) and HK(◇) intervals in examples from Table 2.

Bigger differences in the average lengths between the intervals were observed in Examples 4 and 6 ($1/\lambda_i$ far apart and ν_r not much greater than s) and in Example 5 ($s > \nu_r$, $s > 2$).

Based on the stated results we conclude that the TH and PB intervals can be recommended for usage only if values of $1/\lambda_i$ in the model do not differ too much from each other and then the TH interval is preferable to the PB interval with respect to the higher confidence level obtained. However, if the values of $1/\lambda_i$ are far apart, it is more suitable to employ the HK interval despite its conservativeness for small ν_r .

Reference

- [1] Arendacká B. (2005). *Generalized confidence intervals on the variance component in mixed linear models with two variance components*. *Statistics* **39**, 275–286.
- [2] Billingsley P. (1968). *Convergence of probability measures*. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- [3] Boardman T.J. (1974). *Confidence intervals for variance components – a comparative Monte Carlo study*. *Biometrics* **30**, 251–262
- [4] Burdick R.K., Graybill F.A. (1992). *Confidence intervals on variance components*. Marcel Dekker Inc., New York.
- [5] Hartung J., Knapp G. (2000). *Confidence intervals for the between group variance in the unbalanced one-way random effects model of analysis of variance*. *Journal of Statistical Computation and Simulation* **65**, 311–323.
- [6] Park D.J., Burdick R.K. (2003). *Performance of confidence intervals in regression models with unbalanced one-fold nested error structures*. *Communications in Statistics Simulation and Computation* **32**, 717–732.
- [7] Seely J., El-Bassiouni Y. (1983). *Applying Wald's variance component test*. *The Annals of Statistics* **11**, 197–201.
- [8] Thomas J.D., Hultquist R.A. (1978). *Interval estimation for the unbalanced case of the one-way random effects model*. *The Annals of Statistics* **6**, 582–587.
- [9] Tukey J.W. (1951). *Components in regression*. *Biometrics* **7**, 33–69.
- [10] Wald A. (1947). *A note on regression analysis*. *The Annals of Mathematical Statistics* **18**, 586–589.
- [11] Williams J.S. (1962). *A confidence interval for variance components*. *Biometrika* **49**, 278–281.

Acknowledgement: The work was supported by the grants VEGA 1/3016/06 and VEGA 2/4026/04.

Address: B. Arendacká, Institute of Measurement Science, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava, SR

E-mail: barendacka@gmail.com

NELINEÁRNÍ FILTROVÁNÍ COXOVÝCH BODOVÝCH PROCESŮ

Viktor Beneš, Radka Lechnerová, Lev Klebanov

Klíčová slova: Nelineární filtrace, Coxův bodový proces, bayesovské MCMC, Metropolis-Hastingsův algoritmus.

Abstrakt: Tento článek se zabývá nelineárním filtrováním Coxových bodových procesů v čase. Tato úloha spočívá v odhadování podmíněné střední hodnoty náhodné intenzity Coxova bodového procesu při dané jeho realizaci. Podmíněná střední hodnota byla určena na základě simulace podmíněného rozdělení s využitím Metropolis-Hastingsova algoritmu. V článku je rovněž ukázán příklad numerického výpočtu.

1 Úvod

Filtrování bodových procesů je klasický problém pocházející z aplikací z medicínské diagnostiky a optické komunikace, viz [8] a citace uvnitř. Události registrované v čase jsou modelovány jako realizace nehomogenního bodového procesu, jehož intenzita závisí na náhodné funkci. Tak vzniká dvojně stochastický proces. V případě, že podmíněně při dané realizaci intenzity jde o Poissonův proces, nepodmíněný proces se nazývá Coxův. Filtrování má za cíl odhadnout náhodnou intenzitu při daném pozorování výsledného bodového procesu. Nelineární filtrování vede na výpočet podmíněné střední hodnoty. Klasický přístup k řešení vede na stochastickou diferenciální rovnici studovanou mnoha autory ([2], [3], [5], [6], [9]). Tato rovnice je obtížně numericky řešitelná. V předloženém článku se zabýváme alternativním postupem pomocí bayesovského Monte Carlo ([4]). Zde je hledaná podmíněná střední hodnota určena ze simulace podmíněného rozdělení při využití Metropolis-Hastingsova algoritmu. V závěru článku je uveden příklad numerického zpracování.

2 Filtrování bodových procesů

Náhodný bodový proces v čase je lokálně konečná náhodná čítací míra na reálné polopřímce \mathbb{R}_+ opatřené borelovskou σ -algebrou \mathcal{B} . Coxův bodový proces Φ s řídicí náhodnou mírou Λ na \mathbb{R}_+ je dán podmínkou, že

$$\bar{\Phi} = [\Phi \mid \Lambda = \bar{\Lambda}]$$

je Poissonův bodový proces s mírou intenzity $\bar{\Lambda}$. Budeme předpokládat, že existuje náhodná funkce X , jež je hustotou Λ vzhledem k Lebesgueově míře, X se nazývá řídicí intenzita procesu Φ . Předpokládejme, že

$$\mathbb{E}X(t) < \infty, \quad \text{pro každé } t \in \mathbb{R}_+.$$

Označme

$$N(t) = \Phi([0, t]), \quad t \in \mathbb{R}_+,$$

tj. $N(t)$ je počet bodů Coxova procesu v intervalu $[0, t]$.

Úloha filtrování spočívá v nalezení optimálního odhadu $\widehat{X}(t)$ funkce $X(t)$ vzhledem ke střední kvadratické chybě při daném $\{N(s), 0 \leq s < t\}$. Hledáme tedy náhodnou funkci $\widehat{X}(t)$ minimalizující

$$\mathbb{E}[|X(t) - \widehat{X}(t)|^2 \mid N(s), 0 \leq s < t].$$

Řešením je podmíněná střední hodnota řídicí intenzity

$$\widehat{X}(t) = \mathbb{E}[X(t) \mid N(s), 0 \leq s < t]. \quad (1)$$

3 Bayesovský přístup

Pro řešení úlohy nelineárního filtrování a následně predikce lze užít přímý Bayesův přístup (viz [4]). Pokud přijmeme další předpoklad, že náhodná intenzita $X(t)$ je Markovův proces, tak při znalosti jeho přechodového mechanismu dává spojení filtrace současné hodnoty s přechodovou pravděpodobností predikci intenzity do budoucnosti.

Při implementaci tohoto přístupu je vhodné provést diskretizaci procesu, tj. rozdělíme sledovaný časový interval na úseky stejné délky $\Delta > 0$. Zavedeme značení pro $i = 0, 1, \dots, k$ následovně: $t_i = i\Delta$, hodnoty procesu $X_i = X(t_i)$ a dále $N_i = N_{t_i}$ je počet bodů Coxova procesu Φ v intervalu $(t_{i-1}, t_i]$.

Pro Markovův proces X_t lze hustotu sdruženého rozdělení

$$P(X_1 \leq x_1, \dots, X_k \leq x_k \mid N_1 = n_1, \dots, N_k = n_k),$$

zapsat přibližně jako (viz [4])

$$\begin{aligned} & f(x_1, \dots, x_k \mid n_1, \dots, n_k) \propto \\ & \propto f(n_1, \dots, n_k \mid x_1, \dots, x_k) f(x_1, \dots, x_k) \approx \\ & \approx \prod_{i=1}^k f(n_i \mid x_i) \prod_{i=1}^k f(x_i \mid x_{i-1}) f(x_0), \end{aligned} \quad (2)$$

kde

$$f(n_i \mid x_i) = \frac{(x_i \Delta)^{n_i}}{n_i!} e^{-x_i \Delta}.$$

Hustotu sdruženého rozdělení tohoto procesu lze tedy zapsat jako součin součinu Poissonových pravděpodobností $f(n_i \mid x_i)$ (vyplývá z definice Coxova procesu) a součinu přechodových hustot $f(x_i \mid x_{i-1})$ (plyne z markovské vlastnosti procesu).

4 Analytická část řešení

V dalším textu se zaměříme na konkrétní situaci a na ní si ukážeme postup při filtrování bodového procesu. Nechť $X(t)$, $t \geq 0$, je řešením stochastické diferenciální rovnice

$$dX(t) = -\gamma X(t)dt + dZ(\gamma t), \gamma > 0, \quad (3)$$

kde Z je Poissonův proces s intenzitou ν . $X(t)$ je Markovův proces a lze jej zapsat jako

$$X(t) = e^{-\gamma t} X(0) + \int_0^t e^{-\gamma(t-s)} dZ(\gamma s). \quad (4)$$

Význam a aplikace podobných procesů ve financích jsou popsány v článku [1].

Pro aplikaci bayesovského přístupu ve filtrování potřebujeme přechodové jádro resp. jeho hustotu. Vyjdeme z věty 2.2 v [7], kde dostáváme přechodovou charakteristickou funkci pro přechod z x za dobu t ve tvaru:

$$M_t(x, z) = \exp \left[ibxz + \nu \int_b^1 \frac{e^{iyz} - 1}{y} dy \right], \quad (5)$$

kde $b = e^{-\gamma t}$. Člen $ibxz$ zde představuje posun o bx v $X(t)$.

Chceme získat přechodovou hustotu inverzní Fourierovou transformací (5), ovšem v tomto tvaru $M_t(x, z)$ není integrovatelné. Následujícím postupem se podaří tento problém obejít a dospět k vyjádření (6). Označme \bar{H}, \bar{F}_j charakteristické funkce odpovídající distribučním funkcím H, F_j , $j = 0, 1$, kde

$$\begin{aligned} \bar{H}(u) &= \exp \left\{ \nu \int_b^1 \frac{e^{iux} - 1}{x} dx \right\} = \\ &= a \exp \left\{ \nu \int_b^1 \frac{e^{iux}}{x} dx \right\}, \end{aligned}$$

$a = b^\nu$. Odpovídající distribuční funkci lze zapsat jako

$$H(y) = aF_{\delta_0}(y) + (1 - a)F_0(y),$$

kde F_{δ_0} je degenerovaná v 0. Dále budeme hledat rozklad funkce F_0

$$F_0(y) = \frac{a}{1 - a} G(y) + \frac{1 - 2a}{1 - a} F_1(y),$$

takový, aby funkce G byla v uzavřeném tvaru a funkce F_1 byla hladká. Máme

$$\bar{F}_0(u) = \frac{\bar{H}(u) - a}{1 - a} = \frac{a}{1 - a} \times \left[\nu \int_b^1 \frac{e^{iux}}{x} dx + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\nu^k}{k!} \left(\int_b^1 \frac{e^{iux}}{x} dx \right)^k \right]$$

a hledaný vztah je

$$\bar{F}_1(u) = \frac{a}{1 - 2a} \left[\frac{1}{\log b} \int_b^1 \frac{e^{iux}}{x} dx + \exp \left(\nu \int_b^1 \frac{e^{iux}}{x} dx \right) - 1 \right],$$

zde G má hustotu pravděpodobnosti

$$p_G(y) = \begin{cases} \frac{1}{\gamma t y}, & \text{pro } b < y < 1, \\ 0, & \text{jinak.} \end{cases}$$

F_1 je hladká a

$$F_1'(x) = p_1(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{F}_1(u) e^{-iux} du.$$

Pro diskrétní přechod procesu $X(t)$ za dobu Δ (srovnej s (4))

$$x_{t_i} = x_{t_{i-1}} e^{-\gamma\Delta} + \int_{t_{i-1}}^{t_i} e^{-\gamma(t_i-s)} dZ(\gamma s),$$

kde Z je Poissonův bodový proces s intenzitou ν , vychází přechodová hustota ve tvaru

$$f(x_i | x_{i-1}) = ap_G(x_i - bx_{i-1}) + (1-2a)p_1(x_i - bx_{i-1}) + a\delta_{(bx_{i-1})}(x_i). \quad (6)$$

Poznamenejme, že zde je díky diskretizaci použit tento vztah $b = e^{-\gamma\Delta}$.

Předchozí výraz má názornou interpretaci: je-li počet skoků procesu X v daném intervalu 0, potom je tam chování X deterministické, čemuž odpovídá degenerovaná složka $\delta_{(bx_{i-1})}$. Pro právě jeden skok má přechodové rozdělení hustotu, která není sice spojitá, ale lze analyticky vyjádřit (p_G). Případ dvou či více skoků shrneme do třetího členu (p_1), zde je hustota spojitá omezená a lze užít inverzní vzorec. Pro ni provedeme přibližný numerický výpočet diskrétní Fourierovou transformací, užitím vlastností:

$$p_1(x) = \frac{1}{\pi} \left\{ \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \bar{F}_1(u) \cos(ux) du + \int_0^{\infty} \operatorname{Im} \bar{F}_1(u) \sin(ux) du \right\},$$

kde

$$\begin{aligned} \bar{F}_1(u) &= \frac{a}{1-2a} \left[\exp(\nu y_u) \cos(\nu z_u) - 1 - \frac{y_u}{\gamma\Delta} + \right. \\ &\quad \left. + i \left\{ \exp(\nu y_u) \sin(\nu z_u) - \frac{z_u}{\gamma\Delta} \right\} \right] \end{aligned}$$

je hermitovsky symetrická funkce,

$$y_u = \int_b^1 \frac{\cos(ux)}{x} dx, \quad z_u = \int_b^1 \frac{\sin(ux)}{x} dx.$$

Tedy hledaná hustota p_1 tvoří reálnou část výstupu z algoritmu rychlé Fourierovy transformace (FFT).

5 Aplikace MCMC

Na základě simulované realizace Coxova procesu s řídicí intenzitou $X(t)$ chceme provést filtrování, tj. vypočítat podmíněnou střední hodnotu (1). Aproximujeme ji střední hodnotou z podmíněného rozdělení (2), které se simuluje Metropolis-Hastingsovým algoritmem MCMC. Pomocí zmíněného algoritmu se postupně generuje Markovův řetězec $\{x_i^{(l)}\}_{l=0}^{\infty}$, který má hledané rozdělení (2) jako stacionární. Tedy řetězec pro x_m má limitní rozdělení marginální od hustoty $f(x_1, \dots, x_m \mid n_1, \dots, n_m)$. V každém kroku se z návrhového rozdělení generuje návrh y . Návrh je potom přijat s pravděpodobností

$$\alpha(x_i, y) = \min(1, h(x_i, y)),$$

kde $h(x_i, y)$ je Metropolis-Hastingsův poměr. Protože za návrhové rozdělení byla zvolena gaussovská náhodná procházka a tedy symetrické rozdělení, tak lze návrhovou hustotu z Metropolis-Hastingsova poměru zkrátit. Dále uvažme, že x_i se projeví v součinech ve vztahu (2) jen ve členech $f(n_i \mid x_i)$ a $f(x_i \mid x_{i-1})$, $f(x_{i+1} \mid x_i)$. Po úpravě lze tedy Metropolis-Hastingsův poměr zjednodušit pro $i = 1, \dots, k-1$ na

$$h(x_i, y) = \frac{f(n_i \mid y)f(y \mid x_{i-1})f(x_{i+1} \mid y)}{f(n_i \mid x_i)f(x_i \mid x_{i-1})f(x_{i+1} \mid x_i)},$$

resp. pro $i = k$ na

$$h(x_k, y) = \frac{f(n_k \mid y)f(y \mid x_{k-1})}{f(n_k \mid x_k)f(x_k \mid x_{k-1})}.$$

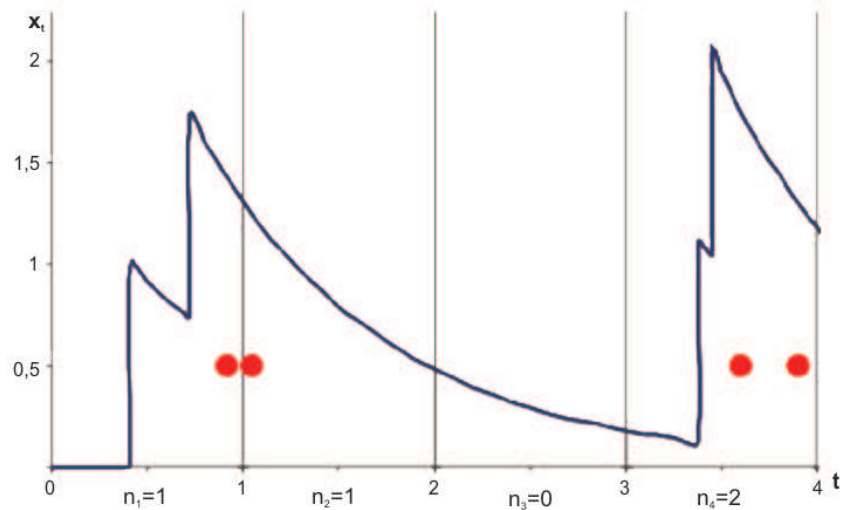
Jak již bylo zmíněno výše, hustota $f(x_i \mid x_{i-1})$ je váženým součtem tří funkcí, z nichž funkci p_G lze vyjádřit analyticky, degenerovanou hustotu δ jsme aproximovali strmou trojúhelníkovou hustotou a funkci p_1 jsme počítali numericky za pomoci algoritmu rychlé Fourierovy transformace.

6 Příklad

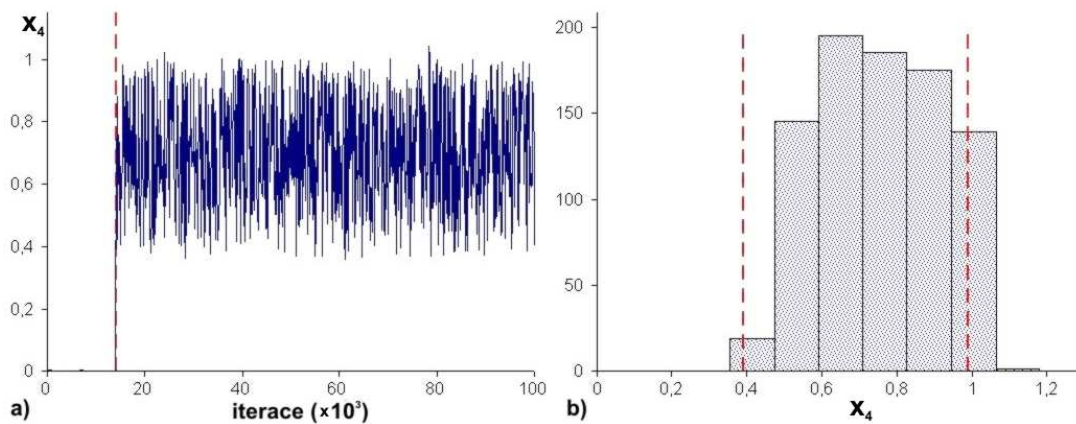
Demonstraci celého výpočtu provádíme na základě simulace realizace řídicího procesu $X(t)$ s parametry $\nu = 1$, $\gamma = 1$ a $x_0 = 0$ a následné realizace Coxova procesu, viz obrázek 1. Pro $k = 4$ vstupujeme do výpočtu s četnostmi $n_1 = 1, n_2 = 1, n_3 = 0, n_4 = 2$ na intervalech délky $\Delta = 1$.

Pomocí Metropolis-Hastingsova algoritmu jsme potom simulovali hodnoty $\{x_i^{(l)}\}$, $i = 1, \dots, 4$, kde za návrhové rozdělení jsme zvolili gaussovskou náhodnou procházku s nulovou střední hodnotou a rozptylem 0, 1 a počáteční hodnoty $x_0^{(l)}$ i $x_i^{(0)}$ jsme volili nulové.

Abychom odstranili vliv výchozí hodnoty simulace na výpočet aposteriorní střední hodnoty, bylo nutné na základě průběhu simulace určit tzv. čas zapálení řetězce. Pro další výpočty jsme uvažovali jen hodnoty realizací získané ze simulace po tomto bodě. Na obrázku 2a) je zobrazen průběh simulace



Obrázek 1: Realizace čtyř bodů (puntíky) Coxova procesu s realizací x_t řídicího procesu (čára). Parametry procesu jsou $\nu = 1$, $\gamma = 1$ a $x_0 = 0$, dále $\Delta = 1$.



Obrázek 2: a) Průběh simulace filtrované hodnoty x_4 náhodné intenzity Coxova procesu. Svislá přerušovaná čára odpovídá času zapálení řetězce. b) Histogram získaný ze simulace a) po času zapálení. Svislými přerušovanými čarami je naznačen 95% interval kredibility.

hodnoty x_4 a svislou čarou je zde naznačen čas zapálení řetězce. Histogram těchto hodnot vidíme na obrázku 2b) a je zde také naznačen 95% interval kredibility. Aposteriorní střední hodnoty a 95% intervaly kredibility realizací řetězce pro x_1, x_2, x_3 a x_4 jsou zaznamenány v tabulce 1. V této tabulce můžeme sledovat závislost spočtených hodnot na vstupní situaci (viz obrázek 1).

i	apost. stř. hodnota	95% interval
1	0,65854	(0,38;0,98)
2	0,86116	(0,56;1,26)
3	0,00019	(-0,002;0,003)
4	0,70275	(0,39;0,99)

Tabulka 1: Aposteriorní střední hodnoty pro realizaci x_1, \dots, x_4 procesu s podmíněnou střední hodnotou (1) a 95% interval kredibility.

Reference

- [1] Barndorff-Nielsen O., Shephard N. (2001). *Non-Gaussian Ornstein-Uhlenbeck based models and some of their uses in financial economics*. JRSS B **63**, 167–241.
- [2] Beneš V., Prokešová M. (2005). *Nonlinear filtration in doubly stochastic point processes*. In Proceedings of the 4th International Conference Aplimat 2005 (ed. Kováčová, M.), SjF STU Bratislava, 415–420.
- [3] Brémaud P. (1981). *Point processes and queues: martingale dynamics*. Springer, Berlin.
- [4] Brix A., Diggle P. (2001). *Spatio-temporal prediction for log-Gaussian Cox processes*. JRSS B **63**, 823–841.
- [5] Karr A.F. (1986). *Point processes and their statistical inference*. Marcel Dekker, Inc., New York.
- [6] Liptser R.S., Shiriyayev A.N. (2000). *Statistics in random processes, II: applications*. Springer, New York.
- [7] Sato K. (1999). *Lévy processes and infinitely divisible distributions*. Cambridge University Press.
- [8] Snyder D.L. (1972). *Filtering and detection for doubly stochastic Poisson processes*. IEEE Trans. Inform. Theory **18**, 91–102.
- [9] Snyder D., Miller M. (1991). *Random point processes in time and space*. Springer Verlag, New York.

Poděkování: Tato práce byla podporována granty MŠMT 0021620839 a GAAV IAA 101120604.

Adresa: V. Beneš, L. Klebanov, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín
R. Lechnerová, SVŠES, s. r. o., Lindnerova 575, 180 00 Praha 8 – Libeň
E-mail: benesv@karlin.mff.cuni.cz, radka.lechnerova@svses.cz, klebanov@karlin.mff.cuni.cz

POUŽITÍ ROC KŘIVEK PRO HODNOCENÍ KLASIFIKÁTORŮ

Martin Betinec

Klíčová slova: ROC, klasifikace, strojové učení, ztrátová funkce, riziko

Abstrakt: ROC křivka je nástroj užívaný pro hodnocení a grafické znázornění chování klasifikačních pravidel při klasifikaci objektů do dvou tříd. Její použití přináší řadu výhod. Jednou z nich je, že netrpí zkreslením způsobeným asymetrickým zastoupením objektů jednotlivých tříd v populaci, a proto se s ní lze setkat v širokém spektru aplikací od medicíny přes bankovníctví až po sociální vědy. Z ROC křivky se navíc odvozují i některé další míry kvality klasifikace, jako např. plocha pod ROC křivkou. Kromě toho umožňuje také pracovat s tradičními statistickými kritérii jako je např. riziko klasifikátoru.

Tato práce se zabývá hledáním optimální klasifikace pro různá kritéria kvality (pravděpodobnost chybných rozhodnutí, celková správnost, riziko) na základě znalosti ROC křivky a porovnáváním klasifikátorů podle nich.

1 Úvod

ROC křivka (z angl. *Receiver Operating Characteristic*) byla původně vyvinuta pro rozpoznávání signálů v elektronice, odkud pochází i její název. Jejím prostřednictvím hledá příjemce signálu (*receiver*) prahovou hodnotu (*operating point*) rozhodovacího pravidla tak, aby co nejlépe odlišil přítomnost signálu od jeho nepřítomnosti, neboli našel optimální klasifikaci.

Tentýž cíl sledujeme i v této práci. Nejprve v části 2 zavedeme model klasifikační situace a upřesníme pojem klasifikátoru. Následující část 3 bude věnována kritériím pro hodnocení klasifikací. Hlavní náplň této práce je obsažena v části 4, kde představíme pojem ROC křivky a jejích vlastností a ukážeme, jak s pomocí ROC grafu hodnotit navržené klasifikace podle různých kritérií a porovnávat klasifikátory.

2 Model klasifikace

Předpokládejme, že u každého z n -tice klasifikovaných objektů sledujeme p -tici znaků popsaných realizacemi $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^T \in \mathcal{X}$, $i = 1, \dots, n$, náhodného vektoru \mathbf{X} . Prostor $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^p$ nazvěme *stavový*. Pro zkrácení zápisu ztotožníme v dalších úvahách objekty a realizace vektoru \mathbf{X} na nich, v obecném případě budeme tedy o objektu s realizací \mathbf{x} znaků \mathbf{X} hovořit jako o objektu \mathbf{x} .

Předpokládejme dále, že množina sledovaných objektů se skládá ze dvou disjunktních tříd, označme je \mathcal{G}_1 a \mathcal{G}_0 , lišících se tím, zda jejich prvky nesou (\mathcal{G}_1), resp. nenesou (\mathcal{G}_0), určitou vlastnost definující cíl klasifikace – tzv. *podmínku* – zpravidla se jedná o výskyt jevu, který je předmětem výzkumu (one-

mocnění, preference zákazníka, bonita klienta apod.). Přítomnost podmínky indikuje binární náhodná veličina G svou realizací na každém z objektů, tedy $G = j$ pro $\mathbf{x} \in \mathcal{G}_j$, $j \in \{0, 1\}$. Pravděpodobnosti $\pi_j := \mathbf{P}(G = j)$, $j \in \{0, 1\}$, budeme nazývat *apriorní*.

Pro úplnost dodejme, že pojem ROC křivky lze zobecnit i na vícetřídní klasifikační problém, viz např. [5], my však setrváme u dvou tříd.

Rozhodovací pravidlo, neboli *klasifikátor*, lze chápat jako rozklad stavového prostoru \mathcal{X} , tedy jako zobrazení $d : \mathcal{X} \rightarrow \{0, 1\}$ přiřazující každému objektu jednu z tříd. Klasifikátor je též možno interpretovat jako odhad \widehat{G} skutečné třídní příslušnosti G založený na znalosti realizace náhodného vektoru \mathbf{X} , tedy $\widehat{G} := d(\mathbf{X})$. V tomto textu se omezíme pouze na klasifikátory rozřazující objekty prostřednictvím tzv. *diagnostické veličiny* (též *diskriminační* či *skórové funkce*) $Y = Y(\mathbf{X})$ a *prahové hodnoty* $\theta \in \mathbb{R}$ podle pravidla

$$Y \leq \theta \implies \widehat{G} = 0 \quad \& \quad Y > \theta \implies \widehat{G} = 1. \quad (1)$$

Klasifikátor $\widehat{G} = \widehat{G}(\cdot, \cdot)$ je tak funkcí Y (tedy klasifikační metody) a prahové hodnoty θ . Explicitní tvar diagnostické veličiny závisí na použité klasifikační metodě. Jmenujme alespoň některé volby, details lze nalézt např. v [1], [6].

V případě *lineární diskriminační analýzy* je $Y := \mathbf{a}^T \mathbf{X}$, kde vektor parametrů $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^p$ je odhadnut klasifikátorem v trénovací fázi procesu učení.

Dalším příkladem je *logistická regrese*, kde se rozhoduje podle odhadu aposteriorní pravděpodobnosti $\mathbf{P}(G = 1 | \mathbf{X} = \mathbf{x})$, tedy $Y := \frac{\alpha \exp\{\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}\}}{1 + \alpha \exp\{\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{X}\}}$, přičemž klasifikátor odhaduje vektor parametrů $(\alpha, \boldsymbol{\beta})^T \in \mathbb{R}^{p+1}$.

Rozdělení diagnostické veličiny Y popisuje distribuční funkce F_Y . Podmíněné rozdělení Y na objektech z \mathcal{G}_0 , resp. z \mathcal{G}_1 , je určeno distribučními funkcemi F_0 , resp. F_1 , definovanými vztahem:

$$F_Y(y) = \mathbf{P}(Y \leq y | G = 0) \cdot \pi_0 + \mathbf{P}(Y \leq y | G = 1) \cdot \pi_1 = \pi_0 F_0(y) + \pi_1 F_1(y).$$

3 Hodnocení klasifikace

Pro pevně zvolenou prahovou hodnotu $\theta \in \mathbb{R}$ dospějeme metodou reprezentovanou diagnostickou veličinou Y podle vztahu (1) ke *klasifikaci*, neboli k roztržení zadaných objektů $\mathbf{x}_1 \dots, \mathbf{x}_n$. Představme si některé ze způsobů jejího hodnocení.

3.1 Celková správnost

Velmi častou mírou úspěšnosti klasifikace je *pravděpodobnost správné klasifikace*, zvaná též *celková správnost*, kterou budeme značit Acc (z angl. *overall accuracy*), tedy $\text{Acc} = \mathbf{P}(\widehat{G} = G)$, což dle vztahu (1) znamená

$$\begin{aligned} \text{Acc}(\theta) &= \mathbf{P}(Y \leq \theta | G = 0) \cdot \pi_0 + \mathbf{P}(Y > \theta | G = 1) \cdot \pi_1 \\ &= \pi_0 F_0(\theta) + \pi_1 (1 - F_1(\theta)) = \pi_0 \cdot Sp(\theta) + \pi_1 \cdot Se(\theta). \end{aligned} \quad (2)$$

Veličiny Sp a Se budou popsány v části 3.2.

V češtině se někdy *accuracy* překládá jako *přesnost*. Tento název ovšem bývá v teorii strojového učení vyhrazen pro překlad anglického termínu *precision* nesoucího odlišný význam, viz [2], proto jej v dalším nebudeme užívat.

Komplementární mírou k celkové správnosti je *celková chyba*, neboli pravděpodobnost chybné klasifikace $\text{Err} = \text{P}(\widehat{G} \neq G) = 1 - \text{Acc}$.

Časté využití Acc a Err plyne z jejich snadné interpretovatelnosti a jednoduchosti výpočtu jejich empirických odhadů – relativního počtu správně (resp. špatně) zařazených objektů. Obě míry závisí na apriorních pravděpodobnostech výskytu π_0 a π_1 . Tato vlastnost způsobuje nevhodnost Acc (resp. Err) jako míry kvality klasifikátoru v případě asymetrického zastoupení skupin \mathcal{G}_0 a \mathcal{G}_1 ve sledované populaci. Je-li π_1 velmi malé, pak z hlediska celkové správnosti (resp. chyby) se bude klasifikátor, který automaticky zařadí všechny objekty do \mathcal{G}_0 , jevit velmi dobře, ačkoli na objektech z \mathcal{G}_1 zcela selže.

Příkladem asymetrické binární veličiny může být výskyt sledované (vzácné) choroby, podpora extrémistických stran, výskyt (sociálních, psychických) deviací, nedůvěryhodnost klienta banky, apod. Důsledkem asymetrického zastoupení obou modalit veličiny G v populaci je rozdílná míra informace, kterou každá z úrovní znaku G o sledovaných objektech poskytuje. Dva náhodně vybraní voliči extrémistických stran budou mít pravděpodobně mnohem více společného než náhodně vybraná dvojice těch, kdo extrémisty nevolí (ti kromě jisté míry zdravého rozumu nemusí mít společného téměř nic).

Mnoho praktických aplikací vede ke klasifikaci do asymetrických binárních tříd. Tuto situaci lze řešit zavedením měr hodnotících chování klasifikátoru v každé ze tříd \mathcal{G}_0 , \mathcal{G}_1 odděleně, soustředíme se proto na některé z nich.

3.2 Senzitivita a specificita

Schopnost klasifikátoru rozpoznat přítomnost sledovaného znaku G ve skupině \mathcal{G}_1 udává tzv. *senzitivita*: $Se = \text{P}(\widehat{G} = 1 \mid G = 1)$. Naproti tomu *specificita* definovaná vztahem $Sp = \text{P}(\widehat{G} = 0 \mid G = 0)$ je mírou toho, nakolik klasifikátor označuje jako nositele podmínky pouze ty objekty, které ji skutečně nesou. Pro klasifikátor definovaný vztahem (1) a $\theta \in \mathbb{R}$ je

$$Se(\theta) = \text{P}(\widehat{G}(Y, \theta) = 1 \mid G = 1) = \text{P}(Y > \theta \mid G = 1) = 1 - F_1(\theta). \quad (3)$$

$$Sp(\theta) = \text{P}(\widehat{G}(Y, \theta) = 0 \mid G = 0) = \text{P}(Y \leq \theta \mid G = 0) = F_0(\theta). \quad (4)$$

Na základě pozorování $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ lze veličiny $Se(\theta)$ a $Sp(\theta)$ odhadnout.

Empirické odhady $Se(\theta)$ a $Sp(\theta)$ se většinou počítají z tzv. *matice záměn* (z angl. *confusion matrix*), což je kontingenční tabulka mezi skutečnými příslušnostmi objektů \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, n$, a predikcemi klasifikátoru o nich. Názvy jednotlivých polí matice záměn odpovídají anglické terminologii:

		Realita	
		\mathcal{G}_0	\mathcal{G}_1
Predikce	\mathcal{G}_0	TN	FN
	\mathcal{G}_1	FP	TP

Matice záměn

TN – *True Negatives*, FN – *False Negatives*,
FP – *False Positives*, TP – *True Positives*,

Označení *True* se vztahuje ke shodám predikce a skutečnosti, zatímco *False* k neshodám. Pojmy *Positives*, resp. *Negatives* znamenají, že klasifikátor objekty zařadil do \mathcal{G}_1 , resp. do \mathcal{G}_0 .

V jazyce matice záměn lze vyjádřit empirické odhady veličin (3), (4) a (2)

$$\widehat{Se}(\theta) = \frac{TP}{TP + FN} \quad \widehat{Sp}(\theta) = \frac{TN}{TN + FP} \quad \text{a} \quad \widehat{Acc}(\theta) = \frac{TP + TN}{n}. \quad (5)$$

Výše uvedený postup je ekvivalentní s napočítáním empirických distribučních funkcí \widehat{F}_1 a \widehat{F}_0 a jejich dosazením do (3), (4).

Pojmy *sensitivita* a *specificita* pocházejí z medicínských aplikací. V teorii strojového učení se pro *Se* používá označení *úplnost* (z angl. *recall*) a TPR (*True Positive Rate*) – motivovaný vyjádřením $\widehat{Se}(\theta)$, viz (5). Často se místo *Sp* užívá veličiny zvané FPR – *False Positive Rate* nebo také *Alarm Rate*:

$$FPR(\theta) = 1 - Sp(\theta) = P(\widehat{G}(Y, \theta) = 1 \mid G = 0) = 1 - F_0(\theta), \quad \theta \in \mathbb{R}, \quad (6)$$

jejíž empirický odhad má tvar $\widehat{FPR}(\theta) = FP/(TN + FP)$. Analogicky je pro $\theta \in \mathbb{R}$ možno definovat (a odhadnout) míru zvanou *False Negative Rate*:

$$FNR(\theta) = P(\widehat{G}(Y, \theta) = 0 \mid G = 1) = 1 - Se(\theta) = 1 - TPR(\theta) = F_1(\theta). \quad (7)$$

S rostoucí (resp. klesající) prahovou hodnotou θ klesají (resp. rostou) hodnoty FPR(θ) a TPR(θ), limitně platí

$$\lim_{\theta \rightarrow +\infty} FPR(\theta) = \lim_{\theta \rightarrow +\infty} TPR(\theta) = 0 \quad \text{a} \quad \lim_{\theta \rightarrow -\infty} FPR(\theta) = \lim_{\theta \rightarrow -\infty} TPR(\theta) = 1.$$

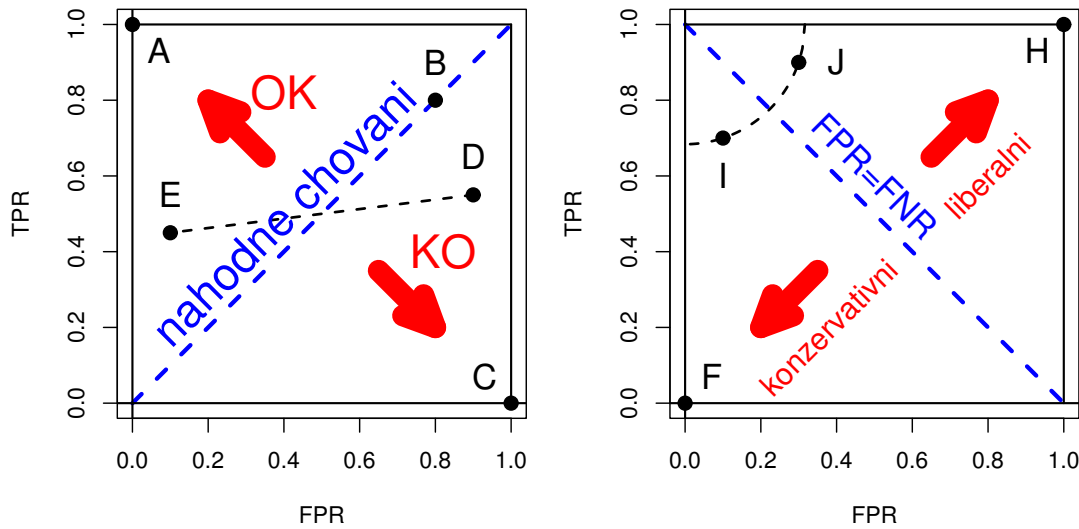
Klasifikátor je možné považovat za test $H_0 : G = 0$ proti $H_1 : G = 1$. V důsledku toho lze FPR interpretovat jako *pravděpodobnost chyby prvního druhu* a TPR jako *sílu testu*.

4 ROC křivka a její vlastnosti

Klasifikátor zavedený vztahem (1) poskytne pro pevné $\theta \in \mathbb{R}$ jednu konkrétní klasifikaci objektů, kterou lze pomocí *sensitivity* a *specificity* (resp. FPR) ohodnotit i v případě velmi odlišného zastoupení modalit veličiny G . K dobremu zhodnocení klasifikace je však nutné současně kontrolovat obě dvě míry. Tento požadavek naplňuje zobrazení obou měr do tzv. ROC grafu.

4.1 ROC graf

V ROC grafu se na vodorovné ose vynáší FPR(θ), zatímco na svislé ose TPR(θ), viz obrázek 1. Množina $[0, 1]^2 = \{[FPR, TPR] \mid FPR, TPR \in [0, 1]\}$ pokrývající výsledky všech možných klasifikací se nazývá *ROC prostor*.



Obrázek 1: ROC prostor.

Rozhodnutí ideálního klasifikátoru zní $\hat{G} = 1$ pro všechna $\mathbf{x} \in \mathcal{G}_1$ a $\hat{G} = 0$ pro všechna $\mathbf{x} \in \mathcal{G}_0$, tj. $\text{TPR} = 1$, $\text{FPR} = 0$. Obrazem nejlepší klasifikace v ROC prostoru je bod $A = [0, 1]$, zatímco bod $C = [1, 0]$ reprezentuje nejhorší možné rozhodnutí.

Body ležící na rostoucí diagonále (tj. $\text{TPR}(\theta) = \text{FPR}(\theta) =: p$) odpovídají náhodnému rozhodování, kdy je $P(\hat{G} = 1) = p$ bez ohledu na hodnotu realizace \mathbf{x} . Uvedená vlastnost je důsledkem vztahu $P(\hat{G} = 1) = \text{TPR} \cdot \pi_1 + \text{FPR} \cdot \pi_0$. Příkladem je bod B , pro nějž $P(\hat{G} = 1) = 0.8$.

Body ležící nad diagonálou reprezentují lepší klasifikace než poskytuje náhodné rozhodování, body pod diagonálou horší. Vytvoříme-li z daného klasifikátoru nový inverzí jeho rozhodování, tj. ($\hat{G}_{\text{new}} := 1 - \hat{G}_{\text{old}}$), budou obrazy jejich rozhodnutí v ROC prostoru středově souměrné podle bodu $[0.5, 0.5]$ (viz body D a E , resp. A a C), neboť $\text{TPR}_{\text{new}} = 1 - \text{TPR}_{\text{old}}$ a $\text{FPR}_{\text{new}} = 1 - \text{FPR}_{\text{old}}$. Každou klasifikaci, která je horší než náhodná, lze takto změnit na lepší.

Klasifikace reprezentované v pravé polovině obrázku 1 body I a J jsou stejně vzdálené od ideálního rozhodnutí (bodu $[0, 1]$), liší se různým hodnocením chybných rozhodnutí. Body ležící na klesající diagonále ($\text{TPR} = 1 - \text{FPR}$) jsou obrazy klasifikací, u nichž jsou oba typy klasifikačních chyb stejně pravděpodobné. Je-li zařazení objektu z \mathcal{G}_0 do \mathcal{G}_1 závažnější chybou než zařazení objektu z \mathcal{G}_1 do \mathcal{G}_0 , jeví se lépe klasifikace, pro níž platí, že $\text{FPR} \leq \text{FNR}$, která je v ROC grafu reprezentovaná bodem ležícím pod klesající diagonálou (bod I v obrázku 1). Tendence zařadit objekt do \mathcal{G}_1 je v případě I nižší než u J , proto se rozhodnutí I , resp. příslušný klasifikátor, označuje za *konzervativní*. Při opačném hodnocení závažnosti klasifikačních chyb, bude důležité zachovat nízkou hodnotu $\text{FNR} = 1 - \text{TPR}$, tedy vysoké TPR , vhodnější bude rozhodnutí označované za *liberalní* nacházející se nad klesající diagonálou (bod J). Příkladem extrémně konzervativní klasifikace je bod $F = [0, 0]$, kde

$\widehat{G} \equiv 0$ pro všechna x , což odpovídá volbě $\theta = +\infty$. Rerezentantem extrémně liberální klasifikace je bod $H = [1, 1]$, kde $\widehat{G} \equiv 1$, tj. $\theta = -\infty$.

4.2 ROC křivka

Pro hodnocení klasifikátoru je užitečné znát $FPR(\theta)$ a $TPR(\theta)$ pro všechny možné klasifikace, tedy pro všechny potenciální volby $\theta \in \mathbb{R}$. Grafickou reprezentaci uvedené znalosti představuje pro daný klasifikátor Y typu (1) tzv. *ROC křivka* (viz též obrázek 2) daná předpisem:

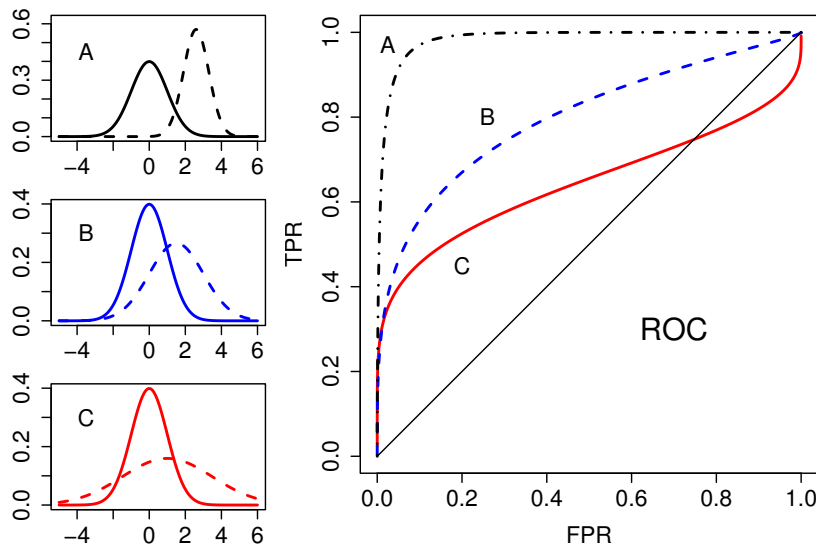
$$\{[FPR(\theta), TPR(\theta)], \theta \in \mathbb{R}\} \equiv \{[1 - F_0(\theta), 1 - F_1(\theta)], \theta \in \mathbb{R}\} \quad (8)$$

Na obrázku 2 jsou ROC křivky tří klasifikátorů spolu s hustotami diagnostických veličin Y každého z nich (plnou čarou v \mathcal{G}_0 , přerušovanou v \mathcal{G}_1). Klasifikátor A je nejlepší z uvedených, neboť nejvíce separuje \mathcal{G}_0 od \mathcal{G}_1 (viz hustoty Y v obrázku A), příslušná ROC křivka se pro všechny volby $\theta \in \mathbb{R}$ nachází nejbližě bodu $[0, 1]$. Nejhůře se jeví klasifikátor C , levá část grafu hustot diagnostické veličiny Y prozrazuje, že skupiny \mathcal{G}_0 a \mathcal{G}_1 nejsou pomocí Y lineárně separovatelné a pravidlo (1) pro malé hodnoty θ nefunguje. V důsledku toho graf ROC křivky C leží pro malá θ pod diagonálou.

Označíme-li pro snazší čitelnost vodorovnou souřadnici ROC grafu $\xi := 1 - F_0(\theta)$, lze ROC křivku (8) alternativně vyjádřit jako rostoucí funkci ξ

$$ROC(\xi) = 1 - F_1(F_0^{-1}(1 - \xi)), \quad \xi \in [0, 1], \quad (9)$$

neboť pro zvolený klasifikátor Y existuje jednoznačná korespondence mezi bodem na ROC křivce (tj. $[\xi, ROC(\xi)]$, $\xi \in [0, 1]$) a volbou prahové hodnoty $\theta = F_0^{-1}(1 - \xi)$, která reprezentuje příslušnou klasifikaci podle pravidla (1).



Obrázek 2: Hustoty skórových funkcí Y_A , Y_B , Y_C reprezentující tři různé klasifikátory (plně v \mathcal{G}_0 , čárkovaně v \mathcal{G}_1) a jim odpovídající ROC křivky.

4.3 Optimální klasifikace a porovnávání klasifikátorů

Jednotlivé klasifikace navržené klasifikátorem (1) jsou hodnoceny prostřednictvím vhodného *kritéria* (viz část 3) formulovaného na základě konkrétních podmínek dané klasifikační úlohy. Znalost ROC křivky umožňuje k danému klasifikátoru Y nalézt takovou klasifikaci (resp. jí odpovídající prahovou hodnotu θ_{opt}), která je dle uvažovaného kritéria optimální.

Při porovnávání různých klasifikátorů lze každý z nich reprezentovat příslušnou hodnotou θ_{opt} a zvoleným kritériem následně ohodnotit jí odpovídající klasifikace. Věnujme se některým nejčastějším kritériím podrobněji.

4.3.1 Pravděpodobnost chybných rozhodnutí Vedou-li podmínky úlohy k požadavku na omezení jedné z klasifikačních chyb, např. $FPR \leq \alpha$, lze zopakovat úvahy učiněné v části 4.1 při hodnocení klasifikací reprezentovaných v obrázku 1 body I a J . Díky monotonii v ξ odpovídá θ_{opt} bodu $[\alpha, ROC(\alpha)]$, $\alpha \in [0, 1]$.

V případě omezení $FNR \leq \beta$, $\beta \in [0, 1]$, bude θ_{opt} korespondovat s bodem $[\xi, ROC(\xi)]$, pro nějž $ROC(\xi) = 1 - \beta$, tedy bodem $[1 - F_0(F_1^{-1}(\beta)), 1 - \beta]$.

Porovnáváme-li například klasifikátory, které jsou v obrázku 3 reprezentované ROC křivkami procházejícími body I a J , s omezením $FPR \leq 0.25$, bude lepší klasifikátor I . Omezíme-li naopak $FNR \leq 0.25$, bude vhodnější J .

4.3.2 Celková přesnost Je-li mírou optimality klasifikace celková přesnost, vypadá situace následovně. Každý bod ROC prostoru odpovídá hodnocení nějaké hypotetické klasifikace. Pro pevnou hodnotu Acc lze ze vztahu (2) vyjádřit TPR jako lineární funkci FPR v ROC prostoru:

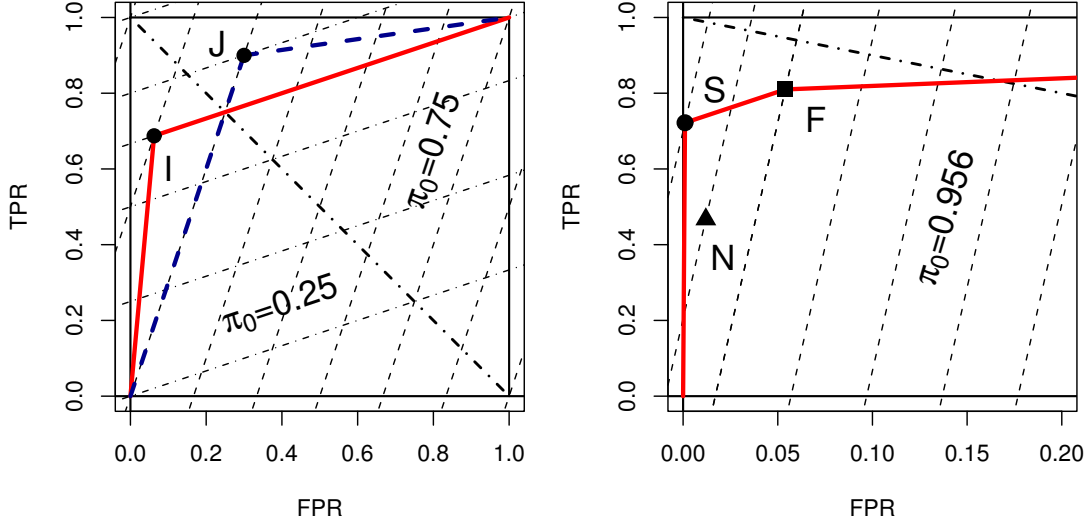
$$TPR = \frac{\pi_0}{\pi_1} FPR + \frac{1}{\pi_1} (Acc - \pi_0) \quad (10)$$

Pro pevný poměr apriorních pravděpodobností π_0/π_1 tvoří body v ROC prostoru splňující (10) systém rovnoběžek lišících se vzájemně hodnotou Acc zvaný *iso-Acc přímky*. Název plyne z toho, že body ROC prostoru (a jim odpovídající klasifikace) náležící téže přímce dosahují stejné hodnoty Acc a jsou tedy z hlediska Acc nerozlišitelné. V bodě, kde každá *iso-Acc* přímka protíná klesající diagonálu (tj. $TPR = 1 - FPR$), platí dle vztahu (2), že $Acc = TPR$.

θ_{opt} odpovídá bodu, v němž se dané ROC křivky dotýká *iso-Acc* přímka s nejvyšší hodnotou Acc (tj. nejvýše položená). Situaci ilustruje obrázek 3.

Je-li $\pi_0/\pi_1 = 3$ (tj. $\pi_0 = 0.75$), převažuje v Acc vliv bodů z \mathcal{G}_0 . Závažnější chybou se stává FP a optimální je konzervativní klasifikátor, dosahující v bodě I hodnoty $Acc_I = 0.875$, zatímco liberálnější klasifikátor v bodě J nabývá pouze $Acc_J = 0.75$. Z obrázku 3 je patrné, že pro $\pi_0 = 0.75$ dosahuje klasifikátor J stejné přesnosti jako klasifikátor zmiňovaný v části 3.1 zařazující všechny objekty automaticky do \mathcal{G}_0 reprezentovaný bodem $[0, 0]$.

V případě opačného poměru apriorních pravděpodobností $\pi_0/\pi_1 = 1/3$ dosahuje vyšší celkové přesnosti liberální klasifikátor J , tj. $Acc_J = 0.85$, za-



Obrázek 3: Vlevo: volba optimální prahové hodnoty θ pro $L(1|0) = L(0|1)$ při $\pi_0 = 0.75$ (*iso-Acc* přímky značeny tence čárkovaně), resp. $\pi_0 = 0.25$ (tence čerchovaně). Vpravo: porovnání klasifikačních metod – *SVM* (S), *NN* (N) a *FLDA* (F) – pro $\pi_0 = 0.956$ (pro lepší čitelnost zobrazen pouze výřez ROC grafu). Klesající diagonála (pro odečtení Acc) je tučně čerchována.

tímco $\text{Acc}_I = 0.75$, což je stejná hodnota, jako u klasifikátoru zařazujícího všechny objekty automaticky do \mathcal{G}_1 , který je reprezentován bodem $[1, 1]$.

4.3.3 Riziko klasifikátoru Nejsou-li chyby FP a FN shodně penalizované, lze hodnocení kvality klasifikátoru (2) zobecnit. Označíme-li ztrátu utrpěnou rozhodnutím $\hat{G} = j$ o objektu z \mathcal{G}_i jako $L(j|i)$, $i, j \in \{0, 1\}$, pak pro riziko $R = E[L(Y, G)]$ klasifikátoru, které je zobecněním $\text{Err} = 1 - \text{Acc}$, platí

$$R = \pi_0 [L(0|0)(1 - \text{FPR}) + L(1|0) \cdot \text{FPR}] + \pi_1 [L(0|1)(1 - \text{TPR}) + L(1|1) \cdot \text{TPR}].$$

Pro pevnou volbu ztrátové funkce $L(\cdot|\cdot)$ a dané π_0 tvoří body ROC prostoru systém rovnoběžných přímek $\text{TPR} = a + b \cdot \text{FPR}$, kde

$$a = \frac{\pi_0 L(0|0) + \pi_1 L(0|1) - R}{\pi_1 \cdot (L(0|1) - L(1|1))}, \quad b = \frac{L(1|0) - L(0|0)}{L(0|1) - L(1|1)} \cdot \frac{\pi_0}{\pi_1}. \quad (11)$$

Na každé z přímek je hodnota rizika R konstantní, odtud název: *iso-R přímky*. Pro hledání optimální hodnoty θ i pro interpretaci parametrů (11) lze užít podobných úvah jako v části 4.3.2. Konzervativní klasifikátor bude lepší pokud je $b > 1$, tj. je-li chybné zařazení objektu z \mathcal{G}_0 závažnější chybou nebo pokud jsou objekty z \mathcal{G}_0 v populaci častěji zastoupené. Vyšší hodnota a odpovídá nižšímu riziku, tedy lepší klasifikaci, podrobněji viz [4].

4.4 Srovnávání podle obrazů klasifikací v ROC prostoru

Rozhodování některých často užívaných klasifikačních metod nelze převést na porovnávání jediné diagnostické veličiny Y s jedinou prahovou hodnotou θ , jako tomu bylo v pravidle (1) (resp. takový převod může být neprůhledný). Příkladem mohou být *klasifikační stromy*, *neuronové sítě* (dále jen *NN*) nebo *support vector machines* (*SVM*). Ačkoli k takovýmto klasifikátorům nelze sestavit ROC křivku způsobem popsáným vztahem (8), je možné je porovnat podle obrazů jimi navržených klasifikací daných dat v ROC grafu. K tomuto záměru lze využít postupy uvedené v části 4.3, jimiž se porovnávaly klasifikátory podle optimálních klasifikací.

Cimermanová v článku [3] rozpoznává přítomnost plicní choroby u pacientů pomocí trojice klasifikačních metod (*SVM*, *NN* a *Fisherovy (kanonické) lineární diskriminační analýzy* – dále jen *FLDA*). K vyhodnocení výsledků použila trojici měr odpovídajících *FNR*, *FPR* a $\text{Err} = 1 - \text{Acc}$, značených v [3] po řadě jako *P1*, *P2* a *P3*.

Výsledky (viz data pojmenovaná v tabulce 3 článku [3] jako *vNN=2*) jsou zobrazeny v pravé polovině obrázku 3. Všechny tři klasifikátory rozhodují konzervativně. Autorka zdůrazňuje, že z diagnostického hlediska je důležité minimalizovat především *FNR*, tj. maximalizovat *TPR*. Jako nejlepší by se z tohoto hlediska jevila (nejliberálnější) metoda *FLDA* ($\text{TPR}_{FLDA} = 0.81$, $\text{TPR}_{SVM} = 0.722$, $\text{TPR}_{NN} = 0.467$). Z hlediska *celkové přesnosti* je nejlepší metoda *SVM* ($\text{Acc}_{SVM} = 0.987$, $\text{Acc}_{NN} = 0.965$, $\text{Acc}_{FLDA} = 0.94$). Je to způsobeno „promořeností“ dané populace ($\pi_0 = 0.956$), které odpovídá vysoká hodnota sklonu *iso-Acc* křivek $b = 21.9$.

Rozhodování podle *rizika* umožňuje navíc kvantifikovat vzájemný poměr závažnosti rozhodovacích chyb, čímž lze přesněji vymezit podmínky optimality zkoumaných metod. Hraniční hodnota směrnice *iso-R* přímků je rovna hodnotě směrnice spojnice obrazů *SVM* a *FLDA* v ROC grafu ($b_{SF} = 1.66$). Častá volba $L(0|0) = L(1|1) = 0$ vede dle vztahu (11) ke zjištění, že nejnižšího rizika dosahuje metoda *FLDA*, pokud $L(0|1) > 13.19 \cdot L(1|0)$. Při opačné nerovnosti bude nejlepší *SVN*. Metoda *NN* bude z hlediska rizika (resp. celkové přesnosti) vždy suboptimální, neboť leží pod *konvexním obalem* obrazů klasifikací a bodů $[0,0]$ a $[1,1]$ (v obrázku 3 je vyznačen světlou čarou).

4.5 Porovnávání klasifikátorů podle globálních měr

Velmi často se při porovnávání klasifikátorů lze setkat s přístupy, které nehledají optimální klasifikaci, nýbrž hodnotí příslušné ROC křivky podle zvolené míry „blízkosti“ k ideální ROC křivce (tj. procházející bodem $[0, 1]$).

V nejjednodušším případě, kdy se ROC křivky neprotínají, odpovídá nejlepšímu klasifikátoru nejvýše položená ROC křivka, viz obrázek 2.

Obecnější vyjádření této úvahy představuje jiná často užívaná míra – *plocha pod ROC křivkou*, značí se *AUC* (z angl. *Area Under Curve*), definovaná vztahem $AUC = \int_0^1 ROC(\xi) d\xi$, viz např. [5], resp. [7]. Pro ideální klasifiká-

tor je $AUC = 1$, pro náhodný pak $AUC = 0.5$. Pro klasifikátory z obrázku 2 je $AUC_A = 0.983$, $AUC_B = 0.797$, $AUC_C = 0.645$.

Protínají-li se křivky i mimo body $[0, 0]$ a $[1, 1]$ (viz obrázek 3), nelze o žádném z klasifikátoru tvrdit, že je globálně (tj. pro všechny volby $\theta \in \mathbb{R}$) lepší. Nezbyvá než se soustředit na tu část ROC grafu, která je předmětem zájmu, resp. je přípustná (např. nízké hodnoty FPR), jak bylo ukázáno v části 4.3, případně využít „lokální“ verze AUC , viz např. [8].

5 Závěr

V článku jsme představili ROC křivky jako nástroj pro hodnocení chování klasifikátorů při klasifikaci do dvou tříd. Ukázali jsme, že ROC křivka nabízí nejen vizualizaci vztahu mezi specificitou a senzitivitou klasifikátoru, ale navíc umožňuje vzít v úvahu také závažnost klasifikačních chyb prostřednictvím vhodného hodnotícího kritéria, na jehož základě lze nalézt optimální klasifikaci. Dále jsme předvedli, že ROC grafu je možno s úspěchem využít i k hodnocení takových klasifikačních metod, pro něž nelze klasickým způsobem sestavit ROC křivky.

Reference

- [1] Anděl J. (1985). *Matematická statistika*. SNTL/ALFA, Praha.
- [2] Berka P. (2003). *Dobývání znalostí z databází*. Academia, Praha.
- [3] Cimermanová K. (2006). *Aplikácia klasifikačných metód na analýzu vydechovaných plynov pre detekciu pľúcnych chorôb*. ROBUST'2006. Sborník prací 14. zimní školy JČMF, J. Antoch & G. Dohnal (eds.), Praha, JČMF.
- [4] Fürnkranz J., Flach P. (2003). *An analysis of rule evaluation metrics*. Proceedings of the Twentieth International Conference on Machine Learning, ICML-2003, Washington DC.
- [5] Hand D.J., Till R.J. (2001). *A simple generalisation of the area under ROC curve for multiple class classification problems*. Machine Learning **45**, 171–186.
- [6] Peňa D. (2002). *Análisis de datos multivariantes*. McGraw-Hill, Madrid.
- [7] Pepe M.S. (2003). *The statistical evaluation of medical tests for classification and prediction*. Oxford University Press, New York.
- [8] Zhou X.H., Obuchovski N.A., McClish D.K. (2002) *Statistical Methods in Diagnostic Medicine*. John Wiley & Sons, New York

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GAČR 201/06/0186 a výzkumným záměrem MŠMT MSM 0021620841.

Adresa: M. Betinec, FF UK, Katedra sociologie, Celetná 20, 116 42 Praha 1

E-mail: betinec@matfyz.cz

LOGNORMAL MIXTURES AND SIZE DISTRIBUTION OF ATMOSPHERIC PARTICLES

Marek Brabec

Klíčová slova: Lognormal mixture, mixed effects model, particle size spectra.

Abstrakt: This paper deals with the problem of modeling “size spectra” (or size distributions) for atmospheric aerosols and their development in time. Traditional lognormal model is often not flexible enough to capture substantial features of practical interest. Hence, it is useful to generalize to lognormal mixture with several lognormal parts. The result can serve as a building block to produce a larger model describing not only size distribution at one particular time instance, but also its evolution in time. Simultaneous model describing evolution of size spectra in time is then formulated as a non-linear mixed effects model. Such a model is rather easy to fit despite its apparent complexity. From applied side, the presented model accounts for relatively complicated data features like heteroscedasticity, nontrivial correlation structure and complicated time trajectories but it allows to compute derived features of practical interest easily (e.g. particle distribution modes, their development in time, including description of their standard errors).

1 Introduction

In this paper, we will develop a model for a situation quite commonly encountered in atmospheric aerosol research, that is for the problem of formalized description of aerosol particle size distribution (also called “size spectrum”). Of particular interest is the distribution of particles with sizes from several nanometers to several hundreds nanometers of aerodynamic diameter, namely their concentration in the air masses close to the earth. This is due to the importance of this size range from atmospheric particle chemistry, physics and human health points of view.

Practically speaking, one has to deal with integrated form of the data (counts of particles whose diameter is not larger than a specified diameter value) and hence to fit an analogue of diameter distribution function. Unlike in classical statistical problems involving distribution function and density estimation, here the particle size “spectra” are not normalized (the density does not integrate to one). In this sense, the situation reminds nonlinear (monotonic) regression problems encountered for instance in growth curve modelling, [1]. In addition to constructing point estimates, one should account for their variability in order to produce inferences of practical interest.

Additional facets are added due to the fact that typical questions posed by atmospheric scientists concern time evolution of the size density. To this

end, empirical data can be obtained from a series of measurements in which snapshots characterizing the size distributions are obtained. In fact, it takes some time till the current size distribution can be “red” completely by the measurement device (“reading” here amounts to applying filters of various sizes to the flowing air), but this time is substantially shorter than the time between the measurements. Many things can change from one measurement time to another (e.g. due to wind gusts bringing air masses of somehow different composition). Formally, we are dealing with a series of random vectors, whose dimension is given by the number of sieves applied by the measuring device. Their readings are reported through different “channels” to learn about the particle size distribution. While the dependence among readings obtained at different times is weak (if any), there are strong dependencies among different channel readings obtained at one occasion.

Since it is well known from both empirical observations and from various theoretical considerations that particle size distributions are markedly skewed to the right, [7], lognormal-based models have been traditionally used for their description. The (appropriately scaled) lognormal (let us call it LN1) itself does not fit well, mostly because particles encountered at a particular location and time originate from several different sources and contribution of each of the sources has its own size distribution. This motivates generalization of LN1 to (appropriately scaled) lognormal mixture of several components (say LN k for k -component lognormal mixture). Scaling is given by the total number of particles - which itself is a parameter to estimate (and of substantial practical interest). Very often, LN2 is fitted for each measurement time separately. Although such a saturated model might constitute a starting point for investigating dynamics of the distributions, a more parsimonious approach is desirable.

2 Statistical model

2.1 Model for one time point

Measurement device provides observations Y_{ti} in the form of particle counts for particles falling into size interval $[x_{\min}, x_i]$ (obtained by reading the i -th “channel” in the measuring device). L such channels are read in one measurement. x_{\min} , L , and x_i ’s are specified upfront by a study protocol. Typically, x_i ’s come as a geometric sequence covering a given size interval $I = [x_{\min}, x_{\max}]$ of interest. Therefore, when using the data to recover size density, we have to deal simultaneously with analogues of truncation and censoring problems. Both because of air sampling involved and measurement error variability, the observed particle counts are only noisy versions of the true counts. Properties of the measurement errors are not known exactly (due to complex signal pre-processing involving e.g. deconvolutions). Nevertheless, their variances should depend quite simply on means. Therefore, it is useful to cast the problem as a (nonlinear) regression. For a particular time t and chan-

nel i , we have a noisy observation of signal $F(x_i; \theta_t)$ which is described parametrically below in (1), i.e. $Y_{ti} = F(x_i; \theta_t) + \eta_{ti}$. With $\eta_{ti} \sim (0, V(F(x_i; \theta_t)))$, having some distribution with appropriate means and variances (to base inference on first two moments only). If we go with the approximate (over-dispersed) Poissonness of the counts, yielding $V(F(x_i; \theta_t)) \cong \text{const.} F(x_i; \theta_t)$, we are motivated to use square root variance-stabilizing transform to achieve (approximate) normality. Naturally, both data and model are transformed in the spirit of the ‘‘TBS’’, approach, [2] to get the following model (1), fitable to observed data:

$$\begin{aligned} \sqrt{Y_{ti}} &= \sqrt{F(x_i; \theta_t)} + \epsilon_{ti} & (1) \\ F(x_i; \theta_t) &= \sum_{k=1}^K A_t \pi_{tk} G(x_i; \mu_{tk}, \sigma_{tk}) \\ G(x_i; \mu_{tk}, \sigma_{tk}) &= \frac{\Phi\left(\frac{\log(x_i) - \mu_{tk}}{\sigma_{tk}}\right)}{\Phi\left(\frac{\log(x_{\max}) - \mu_{tk}}{\sigma_{tk}}\right) - \Phi\left(\frac{\log(x_{\min}) - \mu_{tk}}{\sigma_{tk}}\right)} \\ \epsilon_{ti} &\sim N(0, \sigma^2) \\ \theta'_t &= (A_t, \pi_{t1}, \mu_{t1}, \sigma_{t1}, \dots, \pi_{t,K-1}, \mu_{t,K-1}, \sigma_{t,K-1}, \mu_{tK}, \sigma_{tK}) \end{aligned}$$

Note that this is a (transformed) K -component lognormal mixture model (LN k) written in the (non-normalized) cumulative distribution function form. This is well defined when (obvious) restrictions $0 < \pi_{tj} < 1$; $\sum_{j=1}^K \pi_{tj} = 1$; $A_t > 0$; $\sigma_{tk} > 0$; $\sigma > 0$; $K > 1$ are satisfied. To guarantee that during likelihood optimization, we reparametrize, i.e. switch from θ_t to its 1-1 transformation ψ_t . In particular, we use log transformation for parameters required to be positive, $(\log(A_t), \log(\sigma_{tk}))$, logistic transformation for proportions and $\pi_{tK} = 1 - \sum_{j=1}^{K-1} \pi_{tj}$. With LN2 mixture we have six structural parameters: $\psi_{t1} = \log(A_t)$, $\psi_{t2} = \log\left(\frac{\pi_{t1}}{1 - \pi_{t1}}\right)$, $\psi_{t3} = \mu_{t1}$, $\psi_{t4} = \log(\sigma_{t1})$, $\psi_{t5} = \mu_{t2}$, $\psi_{t6} = \log(\sigma_{t2})$ plus residual standard deviation σ .

2.2 Simultaneous model accounting for time changes

In reality, not only one, but n measurements from times $t = 1, 2, \dots, n$ equidistantly (with a time-step Δ) spanning a time interval of interest are available. Traditionally, each time point has been fitted separately for each time slice on a more or less routine basis, see e.g. [4]. Although looking reasonably on surface, this approach has substantial flaws. In fact, the model is fully saturated in time and no reduction is achieved along the time dimension. Completely free time behavior of estimates leads to inefficient estimates of trajectories suffering from insufficient smoothness.

We will try to overcome this problem by formulating a random-parameter (mixed) model built from (1), using ψ -reparametrization from 2.1 which will deal with time slices simultaneously. Working with the ψ -parametrization, we introduce time dynamics for j -th parameter at time t (out of $3K$):

$$\begin{aligned}\psi_{tj} &= \sum_{p=0}^P \beta_{jp} t^p + b_{tj} \\ b_{tj} &\sim N(0, \sigma_{bj}^2)\end{aligned}\tag{2}$$

where b_{tj} 's are independent across both t and j , and independent from ϵ_{ti} 's. (1)+(2) constitute a nonlinear mixed model (having both fixed and random effects coefficients) in the classical sense of e.g. [3]. As such, it can be fitted relatively easily in a variety of software packages (like Splus or R, [5]). Notice that by imposing a structure on the time relationship between values of the same parameter, the parameter dimensionality reduces substantially (only $3K(P+1)+1$ for fixed effects, instead of $(3K+1)n$ for the saturated model).

While the number of fixed effects in our mixed model is not directly tied to n , the number of random effects is. But this does not cause problems, as they come from the same distribution. To notice similarity of “roughness penalization” implicit to the mixed model and that known from splines, the model loglikelihood: $L(\underline{\psi}|\underline{y}) = \text{const.} - \frac{1}{2}(\sqrt{\underline{y}} - \sqrt{\underline{F}}(\underline{\psi}))'V^{-1}(\sqrt{\underline{y}} - \sqrt{\underline{F}}(\underline{\psi})) - \sum_{j=1}^{3K} \sum_{t=1}^n \frac{b_{tj}^2}{2\sigma_{bj}^2}$. $\sqrt{\underline{y}}$, $\sqrt{\underline{F}}$ are appropriately stacked (transformed) data and signal parts of the model. Covariance matrix of observations is V . Shrinking of $\hat{\psi}_{tj}$'s as estimates of random parameters to their means (given by the fixed effects) is discussed and motivated e.g. in [6]. In our case, the random (or time-specific) parameters are shrunk toward the means specified for each parameter by a separate polynomial trend. This implies smoothing across time. Resulting estimates are smoother than those from saturated model, but (much) more flexible than fixed polynomial trends in parameters alone. Also, compared to a simpler model having only constant fixed part for all parameters ($P=0$), flexibility is increased substantially. For higher order trend shrinkage is more “local” (it shrinks toward a more delicately specified mean structure). As it is usual, bias-variance trade-off determines actual P choice. In our experience with aerosol data, when we searched for P by semi-formal means (e.g. by AIC comparisons), we were usually led to a fairly low polynomial degree (say 3). Such an arrangement allowed us to use both flexibility of the random parameters feature (leading to robustness with respect to short term outliers which are quite common and expectable in the aerosol measurements) and some stiffness related preventing time trajectories from being too rough.

From the viewpoint of observations Y_{tj} , the model (1)+(2) implies variability decomposition into 3 parts: i) ϵ -part (roughly interpretable as measurement error), ii) short-time structural variability (connected with random parts of structural parameters ψ), iii) long-time structural variability (connected with fixed parts of parameter dynamics).

Random coefficient structure implies quite complex variance and covariance pattern, namely the observations are correlated and heteroscedastic

under model (1)+(2) and the covariance structure arises in quite natural and interpretationally straightforward way connected with coefficient changes among observation times. The structure is nonstationary along size dimension. It implies increase of Y_{ti} variability with x_i , as well as increasing covariance among, say Y_{ti} and $Y_{ti'}$ with the same $|x_i - x_{i'}|$ but increasing x_i . This can be seen from the monotonically increasing pattern of the lognormal mixture cumulative distribution function and e.g. from linear approximation $\text{Var}(\underline{Y}) \cong \sigma^2 I + Q \text{diag}(\sigma_{b1}^2, \dots, \sigma_{b,3K}^2) Q'$, with $Q = \frac{\partial}{\partial \underline{b}_t} \underline{F}(x, \theta)$. Our model is semiparametric in nature. While the shape of the size distribution is described by relatively few parameters, the parameter evolution in time is specified quite freely. Not only estimates are easily obtainable from the model, but also their approximate standard errors are accessible from local linear approximation based on $\sigma^2 I + Q \text{diag}(\sigma_{b1}^2, \dots, \sigma_{b,3K}^2) Q' + S \hat{\text{Var}}(\beta) S'$ with $S = \frac{\partial}{\partial \underline{\beta}'} \underline{F}(x, \theta)$. Although we started with the need to improve time-saturated fixed effects model, we certainly acknowledge merit of preliminary estimates obtained from it. Both as precursors extremely useful to construct initial estimates, and for the purpose of goodness-of-fit checking (no matter how inefficient and otherwise problematic the saturated estimates are, they are free from any presupposed time-model, so that they are useful to check for possible systematic biases of a more structured specification).

3 Illustration on real data

The data we will use for illustration of our model came from a measurement campaign conducted on Crete, Greece by international team headed by Ing. Smolik and Ing. Zdimal from the Institute of Chemical Process Fundamentals in Praha. Similar studies has been performed in various geographic locations to elucidate diurnal particle distribution dynamics and its possible changes on larger time scales, [4], [8]. We had $n = 953$ measurements which were taken equidistantly in time (1.5 minutes apart), spanning about a day of real time. Number of channels (L) was 103, $[x_{\min}, x_{\max}] = [7.23, 294.25]$ nm. Therefore, we are dealing with non-negligible amount of data (103×953 matrix of observations). After preliminary exploration and discussion with measurement experts, we have decided for a particular instance of model (1)+(2) with $K = 2$ and polynomial degree $P = 3$.

Figure 1 illustrates fit of the comprehensive model for one particular time (particle diameter is plotted on logarithmic scale to show the fit for smaller diameters which are more important from practical point of view). It is quite simple matter to fit the parametric model in the integrated form (F) but then to use fitted parameters and random effects to reconstruct particle (un-normalized) density ($f = \frac{\partial}{\partial x} F$). Figure 2 illustrates some of density shapes that the model captured at different times (ranging from unimodal, almost LN1 shapes to typical bimodal cases). Aerosol scientists are often interested in searching for density local maxima (“peaks”). Now, one be should careful in

distinguishing between peaks for individual LN components and peaks for the complete-mixture. Component-wise peaks can be found explicitly and (except for degeneracies), there are K component-wise peaks for LNk. Complete-mixture peaks are less easy to handle. Their number is only bounded from above by K (actual number of visible peaks in complete mixture is often smaller). Nevertheless, they can be obtained numerically by solving (in x):

$$f(x, \hat{\theta}) = 0 \quad (3)$$

in x (and taking the local maximum/maxima only), with $f(x, \theta) = \frac{\partial}{\partial x} F(x, \theta)$. Trajectory of the peaks obtained as solution to (3), (using coefficients $\hat{\psi}_{tj}$ composed from both fixed and random parts, backtransformed to $\hat{\theta}$) is shown on Figure 3. It is important to note that while the component-wise peak behavior is smooth, trajectories of the complete-mixture peaks can appear and disappear quite suddenly in time (since their presence depends in quite complicated way on all components of θ). Further, approximations to standard errors and covariances of estimates for rather complicated quantities can be obtained not only for component-wise, but also for complete-mixture peak locations (by applying local linearization and implicit function theorem to (3)). See Figure 4 for a concrete example.

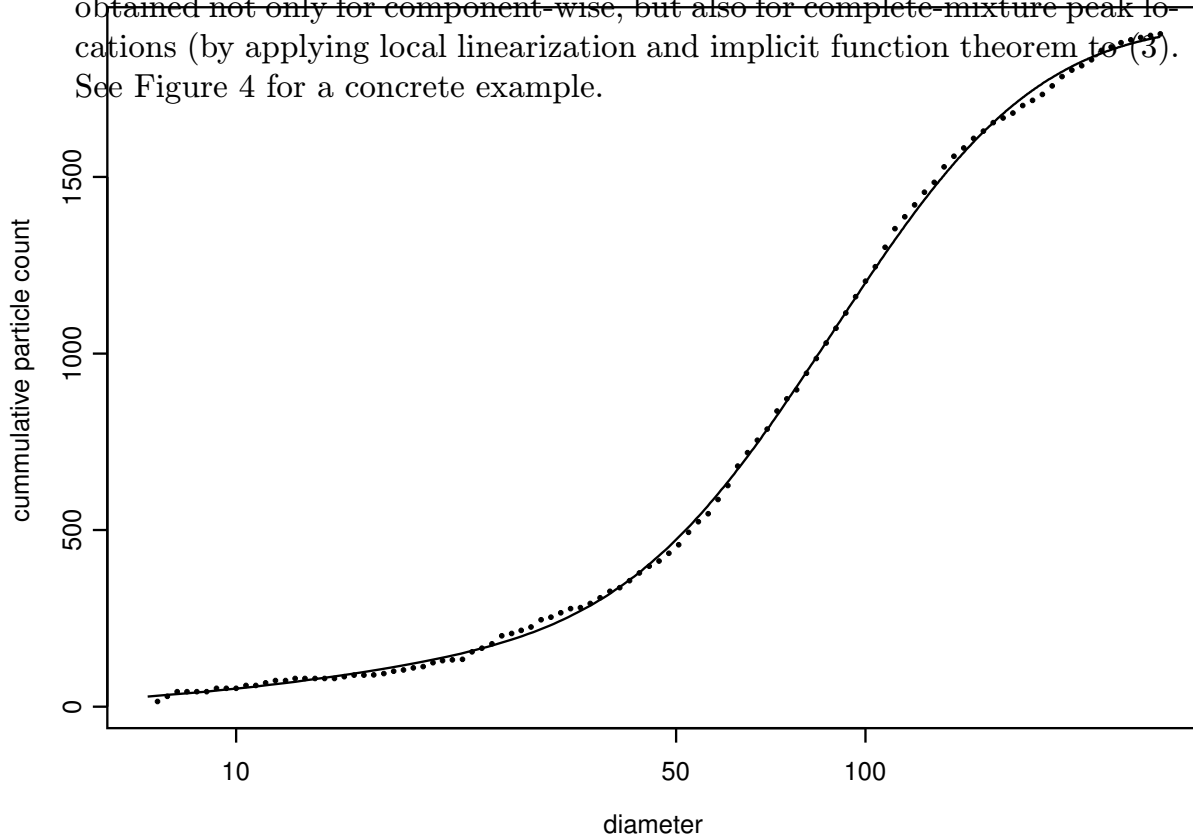


Figure 1: Fit at a particular time slice (02:28:36).

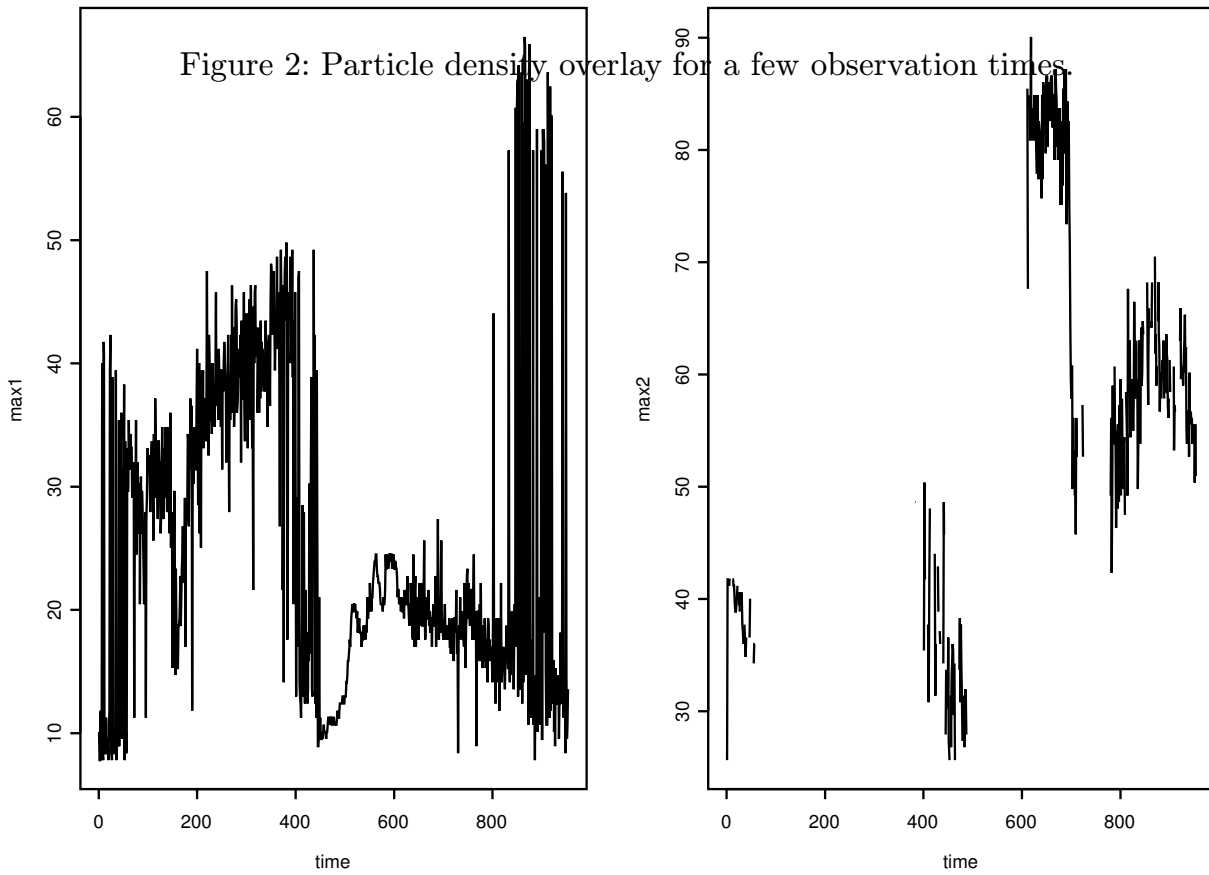
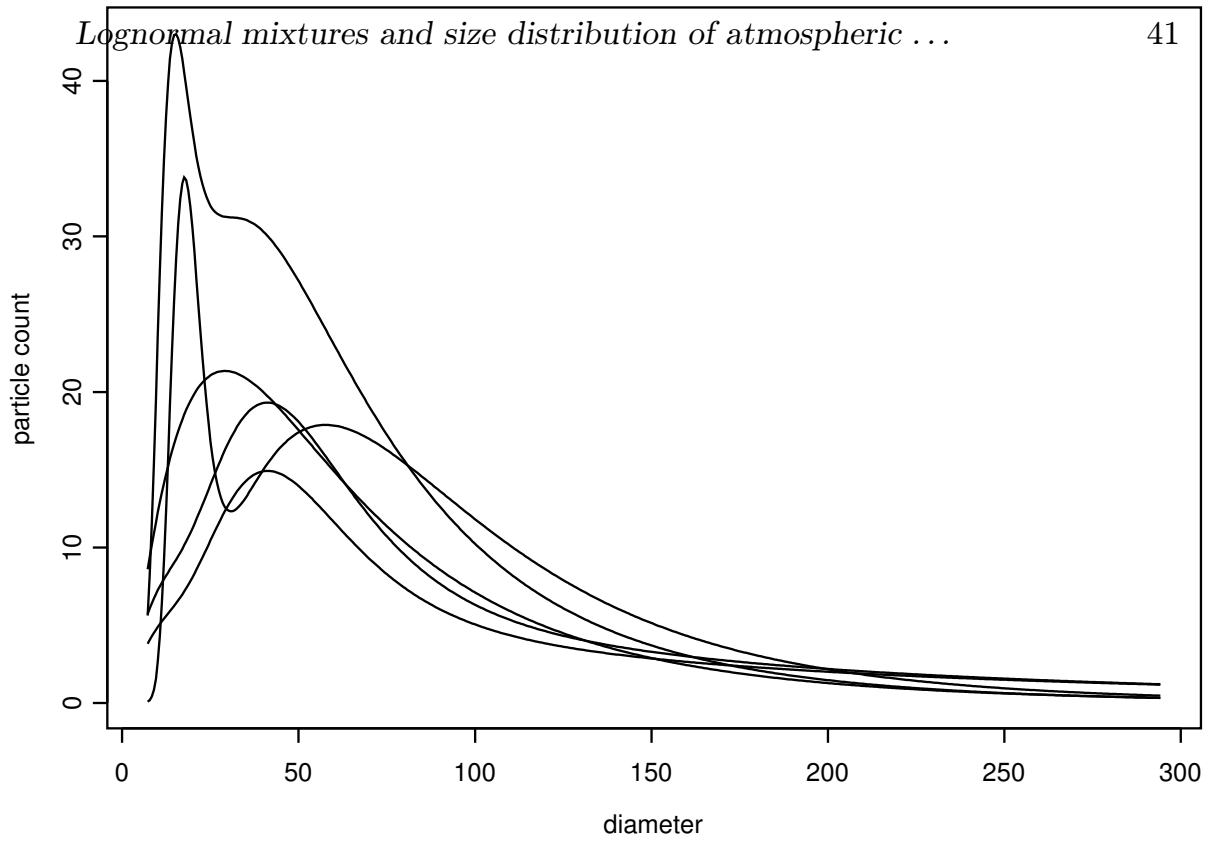


Figure 3: Local maxima.

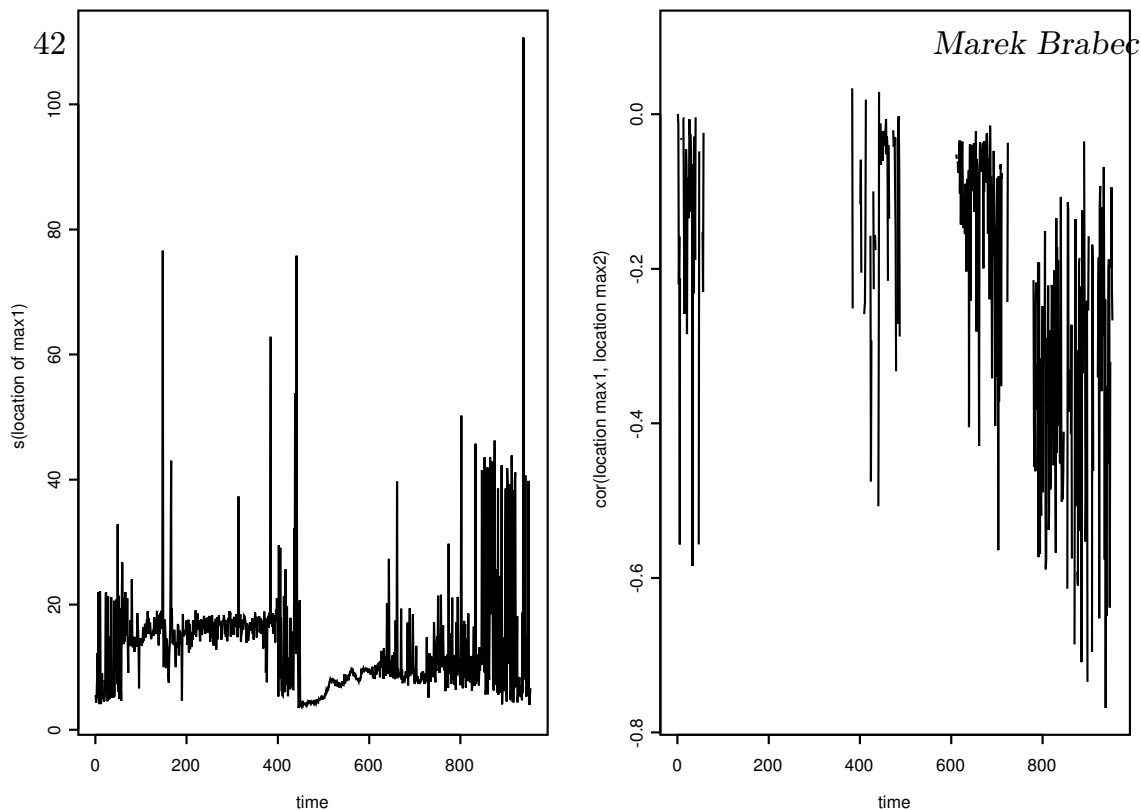


Figure 4: Local maxima, second moments.

Reference

- [1] Brabec M. (2001). *Modelování růstových křivek*. Sborník Robust'2000, JČMF, Praha.
- [2] Carroll R.J., Ruppert D. (1988). *Transformation and weighting in regression*. Chapman and Hall, London.
- [3] Davidian M., Giltinan D.M. (1995). *Nonlinear models for repeated measurement data*. Chapman and Hall, London.
- [4] Makela J.M., Koponen I.K., Aalto P., Kulmala M. (2000). *One-year data of submicron size modes of tropospheric background aerosol in southern Finland*. *J. Aerosol Sci.* **31**, 595–611.
- [5] Pinheiro J., Bates D. (2000). *Mixed-effects models in S and S-PLUS*. Springer, New York.
- [6] Ruppert D., Wand M.P., Carroll, R.J. (2003). *Semiparametric regression*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [7] Seinfeld J.H., Pandis, S.N. (1997). *Atmospherical chemistry and physics*. John Wiley, New York.
- [8] Voutilainen A., Kaipio J.P. (2002). *Estimation of time-varying aerosol size distributions – exploitation of modal aerosol dynamical models*. *J. Aerosol Sci.* **33**, 1181–1200.

Adresa: M. Brabec, Department of Biostatistics and Informatics, National Institute of Public Health, Praha

E-mail: mbrabec@szu.cz

STATISTICKÉ ŘÍZENÍ FINANČNÍCH TOKŮ

Eliška Cézová

Klíčová slova: Finanční analýza, Altmanův model, Shewhartův regulační diagram, rozvaha, výsledovka.

Abstrakt: „Finanční zdraví“ podniku lze sledovat mimo jiné prostřednictvím finančních toků, neboť porušení finanční stability může podniku způsobit vážné problémy. Ukazuje se, že ke sledování statistické stability lze používat nástroje SPC, například Shewhartovy diagramy. Cílem příspěvku bude ukázat možnosti použití klasických regulačních diagramů pro včasnou detekci „problémů“ finančních toků.

1 Úvod

Statistické řízení finančních toků znamená řízení peněžních prostředků v podniku. Sledováním finančních toků se snažíme zabránit případným ztrátám, které by mohly být způsobeny například nedodáním zboží do podniku, špatně zvolenou finanční investicí, neuhrazením pohledávky od dlužníka a nezaplacením závazku tzn. vznik penále apod. Zjištění finanční stránky v podniku se provádí finanční analýzou. Abychom ji mohli udělat, musíme mít rozvahu, výkaz zisků a ztrát a cash flow. Rozvaha uvádí položky aktiv a pasiv, zachycuje stav majetku v podniku a zdrojů jeho krytí k určitému datu. Výkaz zisků a ztrát konkretizuje, které náklady a výnosy za jednotlivé činnosti se podílely na tvorbě výsledku hospodaření. Finanční analýzou zjišťujeme, jaké je finanční zdraví v podniku, nejen v minulosti, ale pomocí vývojového trendu se určuje, jak na tom bude firma v nejbližším období. To vše za předpokladu, že ve firmě nenastanou velké zvraty jako např. fúze (splynutí společností), konkurz, rozšíření výroby, nasycení trhu, aj. Formou finanční analýzy se odhalí případná porucha finančního toku a nalezne vhodný způsob pro případnou opravu. Např. má-li firma velké pohledávky, měla by urgovat své odběratele, aby jí platili včas. Jinak by firma nemusela mít dostatečné finanční prostředky, které by využívala pro svůj vlastní rozvoj nebo by je mohla účelně využívat na reklamu, aby se firma dostala do podvědomí zákazníků a při výběru nákupu si zvolili právě tuto firmu. Pro finanční analýzu bylo zkonstruováno nespočetně modelů, které se rozdělují na jednorozměrné a vícerozměrné. U jednorozměrných modelů je počítáno z podílu dvou hodnot, které byly zjištěny z rozvahy či výsledovky i případně z cash flow. Tyto modely bývají však málo dostačující pro určení finančního zdraví v podniku, proto jich musí být spočítáno více, aby se dalo rozhodnout, jak je firma silná či slabá. Mezi tyto modely patří např. rentabilita, likvidita, finanční stabilita, aktivita (obrat), zadluženost aj. V některých případech můžeme použít vícerozměrný model, jak už název sám napovídá, jedná o složení několika jednorozměrných

modelů. Ve svém příspěvku jsem vybrala Altmanův model (vícerozměrný model), který můžeme najít v literatuře jako Z-score model. Aplikace tohoto modelu nám poskytuje tzv. *Altmanův index*, který lze považovat za měřítko „finančního zdraví firmy“. Sledování tohoto indexu pomocí regulačního diagramu, nám může včas indikovat případné finanční potíže, do kterých by se firma mohla v nejbližší budoucnosti dostat. Ve svém příspěvku uvádím dva příklady, ve kterých se předpokládá měsíční vyhodnocení Altmanova indexu. V případě jediné firmy (příklad č. 1.) nebo v případě velké akciové společnosti (AS) skládající se z 5 závodů (příklad č. 2.).

2 Základní pojmy

- *Finanční tok* je pohyb peněžních prostředků. Je sledován prostřednictvím rozvahy, výsledovky a cash flow.
- Za *poruchu* finančního toku lze považovat jeho změnu, která způsobí porušení provozuschopného stavu firmy.
- *Spolehlivost* finančního toku je jeho schopnost plnit požadované funkce.
- *Bezporuchovost* finančního toku je pravděpodobnost, že nedojde k poruše. Lze ji zajistit „stabilitou“ finančního toku na určité úrovni.
- Možnost zásahu, který vrátí finanční tok do stabilního stavu po poruše, můžeme nazvat *opravitelností*. Opravou může být například včasné vy-mahání pohledávek, půjčení od banky.
- *Udržitelnost* finančního toku je vlastnost spočívající ve způsobilosti k předcházení a zjišťování příčin vzniku poruch a k odstraňování jejich následků.

3 Vícerozměrný model finanční analýzy

Vícerozměrné modely byly vytvořeny na základě dlouholetého studia v závislosti mezi finančním stavem a prosperitou firmy. Tato závislost je ovlivněna řadou faktorů (velikostí firmy, průmyslovým odvětvím, konkurečním prostředím aj.). Dalšími modely, které se používají, jsou např. Index důvěryhodnosti „IN“, Tafflerův model, Model profesora Argentiho, Kralickův Quicktest aj. Pro tento příspěvek jsem vybrala Altmanův index finančního zdraví.

Altmanův model:

- Pro podniky, jehož akcie jsou veřejně obchodovatelné na burze, platí:

$$A = 1,2X_1 + 1,4X_2 + 3,3X_3 + 0,6X_4 + 1,0X_5$$
- Pro ostatní firmy platí:

$$A = 0,717X_1 + 0,847X_2 + 3,107X_3 + 0,420X_4 + 0,998X_5$$

Výrazy v těchto vztazích mají následující význam:

A=Altmanův index finančního zdraví;

X_1 =poměr pracovního kapitálu k celkovým aktivům;

X_2 =poměr nerozděleného zisku k celkovým aktivům;

- X_3 =poměr zisku před zdaněním a úroků k celkovým aktivům;
 X_4 =poměr tržní hodnoty akciové společnosti (AS) k účetní hodnotě cizího kapitálu (pro firmy s akciemi veřejně obchodovatelnými na burze) nebo poměr účetní hodnoty základního kapitálu k účetní hodnotě cizího kapitálu (pro ostatní společnosti (OS));
 X_5 =poměr tržeb k celkovým aktivům.

Hodnota Altmanova indexu finančního zdraví by se měla pohybovat v intervalu od -4 do 8. V případě akciových společností s akciemi veřejně obchodovatelnými na burze platí, že pokud dosahuje Altmanův index hodnoty alespoň 2,99 a vyšší, jde o finančně silnou společnost. Pokud se hodnota tohoto indexu nachází v intervalu od 1,81 do 2,99, jde o firmu s určitými finančními potížemi. Hodnota Altmanova indexu nižší než 1,81 pak indikuje vážné finanční problémy firmy a klesne-li tato pod -4, je bankrot téměř jistý. V případě, že Altmanův index dosahuje příliš vysokých hodnot (8 a výše) indikuje to, že firma má přebytek nevyužitých finančních zdrojů. Pro střední a menší společnosti, které nejsou akciovými společnostmi se posouvá interval indikující určité finanční problémy mezi hodnoty 1,20 až 2,90. Obecně platí, že pokud firma dosáhne v Altmanově indexu záporných hodnot, hrozí jí vážné problémy a je třeba učinit rozhodná opatření.

Koeficienty v Altmanově modelu, stejně tak jako uvedené mezní hodnoty byly navrženy na základě dlouhodobého pozorování (viz [3], [5] a [6]).

4 Statistická regulace

Pro zajištění dlouhodobé stability finančního toku, lze mimo jiné využít i metody statistické regulace procesů - SPC. Předmětem statistické regulace je udržet finanční tok na přípustné a stabilní úrovni, a tak zajistit jeho bezporuchovost. SPC k tomu používá regulační diagramy. V regulačním diagramu budeme zaznamenávat údaje získané z Altmanova modelu v pravidelných časových intervalech. Vyhodnocením trajektorie tohoto procesu můžeme indikovat porušení stability, a tím blížící se poruchy finančního toku.

Shewhartův regulační diagram má dvě statisticky stanovené regulační meze, jedna z nich se nazývá horní regulační mez (**UCL**) a druhá z nich se nazývá dolní regulační mez (**LCL**). Mezi regulačními mezemi leží centrální přímká (**CL**). Dojde-li k vybočení pozorované hodnoty mimo tyto meze, je třeba zasáhnout. Kromě regulačních mezí se používají i *varovné meze* (pro normální rozdělení ve vzdálenosti 2σ), které slouží jako varování hrozící situace, že sledovaný proces bude statisticky nezvládnutelný.

Pro Altmanův index lze empiricky stanovit následující meze:

- horní předepsaná mez **UTL** = 8. V uvedených příkladech je dána předpisem dle Altmanova modelu - pokud vyšla hodnota nad 8, firma má přebytek finančních zdrojů

- dolní předepsaná mez **LTL = 2,99**. V uvedených příkladech je dána předpisem dle Altmanova modelu - pokud hodnota spadá pod hodnotu 2,99, má podnik finanční problémy

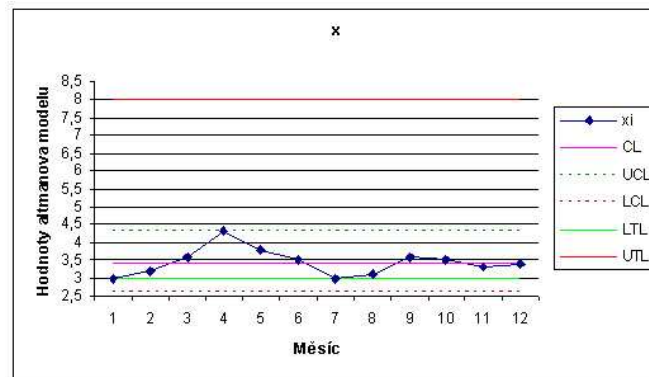
\bar{R} označuje průměrné klouzavé rozpětí pro $n=2$ a $n=5$ pozorování. Výpočet hodnot regulačních mezí (UCL, LCL) a centrální přímky je stanoven normou (viz literatura [4]), pomocí součinitelů d_2 , D_1 , D_3 , D_4 a nepřímo $E_2 (= 3/d_2)$, které jsou v normě specifikovány. Pro různé hodnoty počtu pozorování n . Jako charakteristika stability procesu se používá ukazatel *způsobivosti procesu* c_p :

$$c_p = \frac{\text{předepsané toleranční pole}}{\text{finanční rozmezí}} = \frac{UTL - LTL}{6\hat{\sigma}}$$

kde $\hat{\sigma}$ je dáno vztahem

$$\hat{\sigma} = \frac{\bar{R}}{d_2}$$

Je-li koeficient c_p menší než 1, potom finanční tok není takzvaně „způsobilý“ (firma má vážné finanční problémy). Cílem je provést taková opatření, abychom snížili variabilitu procesu a koeficient způsobivosti se dostal alespoň na hodnotu 1,25 či výše.



Obrázek 1: Shewhartův regulační diagram.

Příklad 4.1: Regulace finančního toku pro jeden podnik

V tabulce 2 jsou uvedeny výsledky 12 měsíčních pozorování Altmanova indexu v průběhu jednoho roku. Při předpokládané stabilitě firmy budeme předpokládat normální rozdělení této veličiny. K výpočtu jsme použili vztahy pro výpočet regulačních mezí Shewhartova regulačního diagramu měřením podle ČSN ISO 8258. Vzhledem k charakteru měření, musíme použít speciální typ diagramu pro individuální hodnoty X_i . Zadané toleranční meze jsou stanoveny: $UTL = 8$, $LTL = 2,99$. Klouzavé rozpětí spočteme jako rozdíl dvou po sobě následujících hodnot. Pro $n=2$ lze v [4] nalézt koeficienty $d_2 = 1,128$, $D_4 = 3,267$, $D_3 = 0$.

měs.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
X_i	3,0	3,2	3,6	4,3	3,8	3,5	3,0	3,1	3,6	3,5	3,3	3,4
R_i		0,2	0,4	0,7	0,5	0,3	0,5	0,1	0,5	0,1	0,2	0,1

Tabulka 1: Hodnoty pro jeden podnik.

$$\bar{X} = \frac{41,3}{12} = 3,442 \quad \bar{R} = \frac{3,6}{11} = 0,323$$

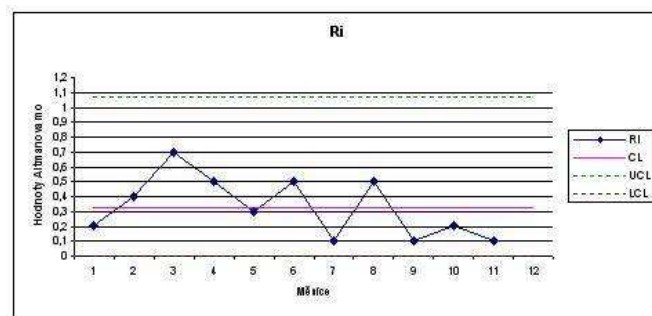
Přímky regulačního diagramu pro klouzavé rozpětí R:

$$\begin{aligned} CL(R) &= \bar{R} = 0,323 \\ UCL &= D_4 * \bar{R} = 3,267 * 0,323 = 1,069 \\ LCL &= D_3 * \bar{R} = 0 * 0,323 = 0 \end{aligned}$$

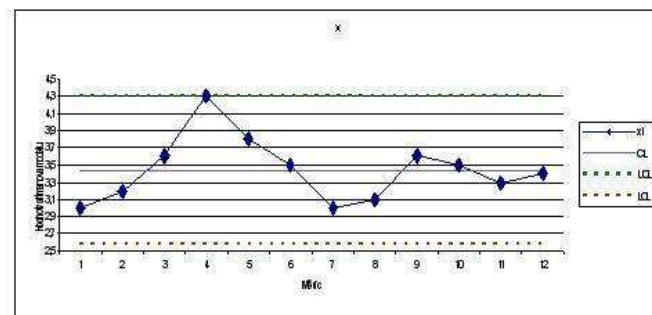
Protože regulační diagram pro rozpětí ukazuje statisticky zvládnutý stav, můžeme spočítat charakteristiky regulačního diagramu pro individuální hodnoty X_i .

$$\begin{aligned} CL(X) &= \bar{\bar{X}} = 3,442 \\ UCL &= \bar{X} + E_2 \bar{R} = 3,442 + (2,658 * 0,323) = 4,312 \\ LCL &= \bar{X} - E_2 \bar{R} = 3,442 - (2,658 * 0,323) = 2,572 \end{aligned}$$

Regulační diagramy pro \bar{X} a R jsou znázorněny na obrázku 2 a 3.



Obrázek 2: Hodnoty R_i pro jeden podnik.



Obrázek 3: Hodnoty X_i pro jeden podnik.

Nakonec vypočteme hodnoty ukazatele c_p :

$$\hat{\sigma} = \frac{\bar{R}}{d_2} = 0,323/1,128 = 0,286$$

$$c_p = \frac{8 - 2,99}{6 * 0,286} = 2,919.$$

Závěr: Z diagramu je zřejmé, že proces se nachází ve stabilizovaném stavu a vysoká hodnota způsobilosti procesu c_p nedává důvod k zavádění regulačních opatření. Celý proces výpočtu regulačních diagramů se bude opakovat po zjištění další hodnoty Altmanova indexu.

Příklad 4.2: Výpočet SPC diagramu pro pět závodů

V tabulce č. 3 jsou uvedeny výsledky z Altmanova indexu. Každý měsíc byla provedena finanční analýza pro pět závodů za období jednoho roku. Průměry a rozpětí jsou rovněž uvedeny v tabulce č.3. Předepsané mezní hodnoty jsou 8 a 2,99. Cílem je zhodnotit chování finanční stránky podniku a regulovat ji z hlediska polohy a rozmezí. Zadaná tolerance je: UTL = 8 , LTL = 2,99. Pro $n=5$ jsou koeficienty $D_4=2,114$; $D_3=0$; $A_2=0,577$; $d_2=2,326$ (viz [4]).

Č.	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_i	R_{ik}
1	3,60	3,50	3,70	3,40	3,30	3,50	0,40
2	3,20	3,80	3,20	3,60	3,20	3,40	0,60
3	3,80	3,70	3,20	3,80	3,60	3,62	0,60
4	3,50	3,20	3,60	3,60	3,70	3,52	0,50
5	3,30	3,30	3,50	3,30	3,80	3,44	0,50
6	3,50	3,40	3,40	3,30	3,50	3,42	0,20
7	3,80	3,80	3,50	3,20	3,20	3,50	0,60
8	3,20	3,30	3,60	3,50	3,20	3,36	0,40
9	3,30	3,80	3,30	3,40	3,60	3,48	0,50
10	3,70	3,20	3,80	3,20	3,50	3,48	0,60
11	3,30	3,30	3,40	3,30	3,30	3,32	0,10
12	3,50	3,20	3,50	3,70	3,20	3,42	0,50

Tabulka 2: Hodnoty pro pět závodů.

$$\bar{\bar{X}} = \frac{1}{k} \sum \bar{X} = \frac{1}{12} 41,460 = 3,455$$

$$\bar{R} = \frac{1}{k} \sum R = \frac{1}{12} 5,500 = 0,458$$

Přímky regulačního diagramu pro R:

$$CL(R) = \bar{R} = 0,458$$

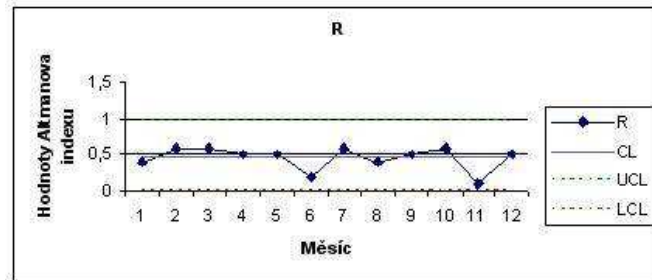
$$UCL = D_4 * \bar{R} = 2,114 * 0,458 = 0,969$$

$$LCL = D_3 * \bar{R} = 0 * 0,458 = 0$$

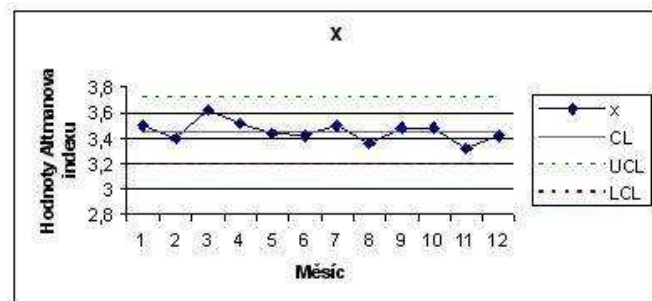
Přímky regulačního diagramu pro X :

$$\begin{aligned}
 CL(X) &= \bar{\bar{X}} = 3,455; \\
 UCL &= \bar{\bar{X}} + A_2\bar{R} = 3,455 + (0,577 * 0,458) = 3,719 \\
 LCL &= \bar{\bar{X}} - A_2\bar{R} = 3,455 - (0,577 * 0,458) = 3,191
 \end{aligned}$$

Regulační diagramy pro \bar{X} a R jsou znázorněny na obrázku 4 a 5.



Obrázek 4: Hodnoty R pro pět závodů.



Obrázek 5: Hodnoty X pro pět závodů.

$$\begin{aligned}
 \hat{\sigma} &= \frac{\bar{R}}{d_2} = 0,458/2,326 = 0,197 \\
 c_p &= \frac{8 - 2,99}{6 * 0,197} = 4,238
 \end{aligned}$$

Závěr: V tomto případě lze učinit obdobný závěr jako v příkladě 1.

5 Závěr

Použití Shewhartova diagramu se (podle normy ISO 8258) předpokládá, že sledovaný znak se řídí normálním rozdělením. Je-li firma finančně zdravá a stabilní, lze tento předpoklad přijmout. Nicméně toto tvrzení nemohu doložit, neboť jsem neměla k dispozici dostatek empirických pozorování. Můj

příspěvek má ukázat možnost použití regulačních digramů pro zajištění spolehlivosti finančních toků. Je-li finanční tok (měřený prostřednictvím Altmanova indexu) statisticky regulován, poskytuje regulační diagram metodu pro plynulé prověřování statistické nulové hypotézy, že se finanční stav firmy nezměnil a zůstává „statisticky zvládnutým.“ Při porušení stability procesu je třeba hledat příčinu, proč je daný ukazatel nízký, či vysoký a přijmout odpovídající opatření. Aplikací SPC metod lze indikovat změny ve finančním toku včas, dříve než se stanou nezvratnými.

Reference

- [1] Mykiska A. (1995). *Statistická regulace (řízení) procesů (SPC) s počítačovou podporou*. Praha.
- [2] Mykiska A. (2004). *Bezpečnost a spolehlivost technických systémů*. Praha: Vydavatelství ČVUT.
- [3] Cézová E. (2004). *Diplomová práce, ÚŘEP FS ČVUT, Praha*. Praha.
- [4] ČSN ISO 8258(01 271). *Shewhartovy regulační diagramy*
- [5] Mrkvička J. (1997). *Finanční analýza*, Praha, Bilance, vydal svaz účetních.
- [6] Kovanicová, Kovanic (1995). *Poklady skryté v účetnictví II.*, Polygon, Praha.

Poděkování: Tato práce byla podporována projektem MŠMT č. 1M06047.

Adresa: E. Cézová, ČVUT Praha, Centrum pro jakost a spolehlivost výroby, Karlovo nám. 13, 121 35 Praha 2

E-mail: eliska.cezova@cqr.cz

APLIKÁCIA KLASIFIKAČNÝCH METÓD NA ANALÝZU VYDYCHOVANÝCH PLYNOV PRE DETEKCIU PĽÚCNYCH CHORÔB

Katarína Cimermanová

Kľúčové slová: Klasifikácia dát, Fisherov lineárny klasifikátor, metóda oporných bodov, dopredné neurónové siete.

Abstrakt: Rakovina je jednou z najčastejších príčin úmrtí v Európe a v západnom svete. Príčinou je neskorá diagnóza tohto ochorenia, nakoľko dostupné diagnostické metódy nie sú dostatočne rýchle a presné. Horúcim tipom na detekciu niektorých typov rakoviny je analýza vydychovaných plynov [1]. Vo vydychovanom plyne sa dá detekovať 300 až 3000 rôznych chemických látok. Význam pri diagnóze rakoviny majú len niektoré molekulové hmotnosti. Namerané dáta predstavujú koncentráciu chemickej látky vo vydýchnutom plyne a jej vyjadrenie je v jednotke ppb (časť na milión). Údaje sa získavali od rôznych skupín obyvateľstva (chorí, zdraví fajčiari, zdraví, zdravotnícky personál).

Na základe dát z poskytnutej databázy je potrebné vybrať čo najlepšiu klasifikačnú (diagnostickú) metódu, ktorá bude s najväčšou presnosťou zaraďovať viacrozmerné dáta do tried 'chorí' a 'zdraví'. Príspevok sa zaoberá úpravou a klasifikáciou dát získaných analýzou vydychovaných plynov pomocou Fisherovho lineárneho klasifikátora (FLK), metódou oporných bodov (SVM) a doprednými neurónovými sieťami (ANN).

1 Úvod

V databáze je 458 pozorovaných objektov \mathbf{X}_i , $i = 1, \dots, 458$, z čoho 20 objektov patrí do triedy 'chorí' (ω_1) a zvyšných 438 objektov do triedy 'zdraví' (ω_2). Každý objekt je vyjadrený 11 rozmerným vektorom, kde jednotlivé prvky predstavujú číselné vyjadrenia hustoty chemických látok s rôznymi molekulovými hmotnosťami $\mathbf{X}_i = (x_1, \dots, x_{11}) = (m_{31}, m_{33}, m_{43}, m_{59}, m_{69}, m_{73}, m_{79}, m_{93}, m_{107}, m_{108}, m_{115})$.

Niektoré charakteristiky objektov sú v databáze nahradené výrazom NaN. Jedná sa o prípad, keď pomer (q) koncentrácie chemickej látky vo vdychovanom a vydýchnutom plyne sa nachádzal v intervale $0.7 < q < 1.3$. Tento výraz je nutné vhodne upraviť (712 NaN z 5038 prvkov databázy - Tab. 1). Jedným zo spôsobov náhrady NaN číslom, je vyjadriť aritmetický priemer pre jednotlivé hmotnostné charakteristiky z číselne vyjadrených objektov v databáze a NaN v danej charakteristike nahradiť týmto výrazom. Aritmetický priemer pre NaN sa dá vyjadriť viacerými viacerými spôsobmi (*vNaN* ozn.

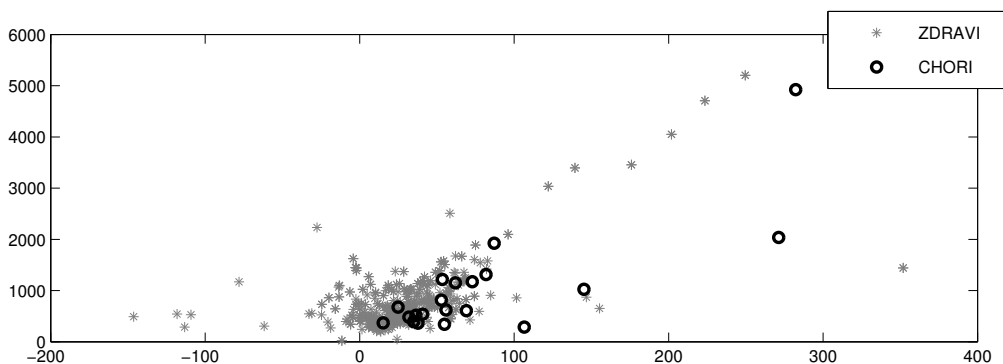
	m 031	m 033	m 043	m 059	m 069	m 073	m 079	m 093	m 107	m 108	m 115
sk.1 C	6	1	0	1	0	0	3	1	8	2	4
sk.2 Z	17	1	7	0	2	7	11	1	8	9	15
sk.3 Z	22	0	2	1	0	11	8	4	19	2	18
sk.4 Z	100	13	33	1	5	80	59	23	67	53	87
spolu	145	15	42	3	7	98	81	29	102	66	124

Tabuľka 1: Výskyt výrazu NaN v jednotlivých skupinách pre jednotlivé charakteristiky objektov (C - trieda 'chorí', Z - trieda 'zdraví').

typu úpravy), a to jednou hodnotou zo všetkých číselne vyjadrených objektov ($vNaN = 1$), pre každú skupinu (4 skupiny) osobitne ($vNaN = 2$) a pre jednotlivé triedy ($vNaN = 3$). V ďalšom prípade sa výraz NaN nahradí výpočtom z vedľajších nameraných dát ($vNaN = 4$). Vedľajšie namerané dáta predstavujú koncentráciu chemickej látky vo vdychovanom plyne a pomer q . (Počet objektov $N = 458$.)

Ďalším spôsobom úpravy dát je znásobenie dát chorých ($n = 20$) náhodným výberom jednotlivých objektov z pôvodnej triedy 'chorí' na rovnaký počet ako je počet zdravých ($n = 438$). V jednom prípade sa výrazy NaN nahradia aritmetickým priemerom všetkých dát v danej hmotnostnej charakteristike ($vNaN = 5$). V druhom prípade sa výrazy NaN nahradia hodnotami z vedľajších nameraných dát ($vNaN = 6$). (Počet objektov $N = 876$.)

Pre upravené dáta sa hľadajú na trénovacej množine (trén.: test. = 60 : 40) také pravidlá s čo najlepšimi parametrami, ktoré by tieto dve triedy (ω_1, ω_2) oddelili s čo najväčšou presnosťou. Na obrázku 1 je grafické znázornenie objektov pomocou dvoch hlavných komponentov (podiel celkovej variability pripadajúcej na ne je 0.95).



Obrázok 1: Grafické znázornenie všetkých objektov triedy 'zdraví' a 'chorí' pomocou dvoch hlavných komponentov pre upravené dáta $vNaN = 4$.

2 Metódy

2.1 Fisherov lineárny klasifikátor

Ako najčastejší príklad lineárneho klasifikátora je uvádzaný Fisherov lineárny klasifikátor [2] rozdeľujúci dáta do dvoch tried (ω_1, ω_2) . Úlohou klasifikátora je nájsť funkciu $g(\mathbf{X}) = \mathbf{b}^T \mathbf{X} + d$ s čo najlepšimi parametrami (\mathbf{b}, d) , tak aby Fisherov lineárny diskriminant

$$F = \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}$$

nadobúdala maximum, kde $\mu_i = E[g(\mathbf{X})/\omega_i]$, $\sigma_i^2 = E[(g(\mathbf{X}) - \mu_i)^2/\omega_i]$ pre $i = 1, 2$.

To znamená, že stredy výstupov klasifikátora jednotlivých tried (μ) musia byť od seba čo najlepšie oddeliteľné, čo najviac vzdialené, prihliadajúc na varianciu výstupov tried (σ^2).

Stredy a variancie výstupov klasifikátora sa vyjadria ako

$$\mu_i = \mathbf{b}^T m_i + d \quad \text{a} \quad \sigma_i^2 = \mathbf{b}^T \Sigma_i \mathbf{b},$$

kde $m_i = E[X/\omega_i]$, $\Sigma_i = E[(X - m_i)^2/\omega_i]$ pre $i = 1, 2$, ktoré sa odhadnú výberovým priemerom a výberovou kovariančnou maticou pre jednotlivé triedy z dát tréningovej množiny.

Z toho je vidieť, že Fisherov lineárny diskriminant závisí od parametrov klasifikátora. Maximum sa hľadá položením gradientu rovného nule.

Z toho vyplýva, že $b = \frac{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}{\mu_1 - \mu_2} [\Sigma_1 + \Sigma_2]^{-1} (m_1 - m_2)$. Nakoľko prvý člen pravej strany je závislý od parametrov klasifikátora, zakomponuje sa v klasifikátore do parametra T , ktorý predstavuje hranicu medzi triedami a položí sa $b = [1/2(\Sigma_1 + \Sigma_2)]^{-1} (m_1 - m_2)$.

Klasifikačné pravidlo potom je

$$X \in \omega_1 \text{ ak } (m_1 - m_2)^T [1/2(\Sigma_1 + \Sigma_2)]^{-1} x < T$$

$$X \in \omega_2 \text{ ak } (m_1 - m_2)^T [1/2(\Sigma_1 + \Sigma_2)]^{-1} x > T.$$

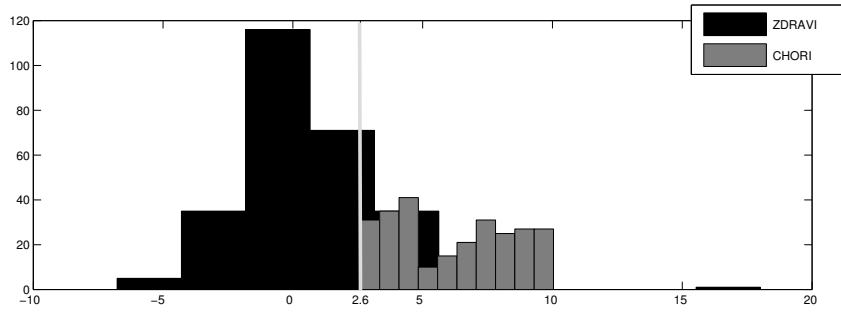
Hranica T sa v našom prípade zvolila ako 5-percentný kvantil výstupov klasifikácie pre skupinu chorých. Na obrázku 2 je vidieť, že výstupy klasifikácie jednotlivých tried sa prekrývajú, čiže nie sú lineárne dobre klasifikovateľné.

2.2 Metóda oporných bodov

V metóde oporných bodov [3] sa vstupné charakteristiky objektov \mathbf{X}_i , kde $i = 1, \dots, N$, nelineárne transformujú funkciou $\Phi(\mathbf{X}_i)$ do priestoru s vyššou dimenziou, v ktorom sa hľadá oddeľovacia nadrovina $\langle \mathbf{a}; \Phi(\mathbf{X}) \rangle + b$.

Na získanie parametrov klasifikátora (\mathbf{a}, b) sa rieši úloha

$$\min_{\mathbf{a}, b, \xi_i} \left(\|\mathbf{a}\|^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i \right)$$



Obrázok 2: Výstupy FLK pre objekty z trénovacej množiny v prípade $vNaN = 6$.

s podmienkou $y_i * (\langle \mathbf{a}, \Phi(\mathbf{X}_i) \rangle + b) \geq 1 - \xi_i$, kde $\mathbf{X}_i \in \omega_1 \Rightarrow y_i = -1$, $\mathbf{X}_i \in \omega_2 \Rightarrow y_i = 1$, $\xi_i \geq 0$ pre $i = 1, \dots, N$ a C je regularizačná konštanta, ktorou sa kontroluje množstvo chýb.

Transformáciu $\Phi(\mathbf{X})$ nemusíme priamo poznať, stačí poznať skalárny súčin $\langle \Phi(\mathbf{X}_i), \Phi(\mathbf{X}_j) \rangle \equiv K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j)$, kde $K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j)$ je jadrová funkcia, ktorú si volíme. Z viacerých možností je numericky najvýhodnejšie použiť štandardné gaussovské jadro, ktoré nelineárne transformuje charakteristiky objektov. Špeciálnym prípadom tejto funkcie je lineárne jadro a pre určité parametre sa ako gaussovské jadro chová aj sigmoidné jadro. Ďalšou výhodou použitia gaussovského jadra je, že má menej parametrov ako polynomicke jadro a pri výpočtoch predstavuje málo numerických problémov ($0 < K_{ij} < 1$). Gaussovské jadro je vyjadrené funkciou

$$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j\|^2}{\sigma^2}\right)$$

s parametrom σ .

Pre zjednodušenie výpočtov sa namiesto pôvodnej úlohy rieši k nej duálna úloha

$$\max_{\alpha} \left(\mathbf{1}^T \alpha - \frac{1}{2} \alpha^T \mathbf{Q} \alpha \right),$$

s podmienkami $0 \leq \alpha_i \leq C$, $\mathbf{y}^T \alpha = \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0$, kde $Q_{ij} = y_i y_j K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j)$ pre $i, j = 1, \dots, N$.

Trénovacie vzorky \mathbf{X}_i pre ktoré $\alpha \neq 0$ sa nazývajú oporné body. Predstavujú informáciu o objektoch v triedach a nachádzajú sa blízko rozhodovacej hranice medzi triedami. Ostatné objekty z trénovacej množiny sa môžu vynechať bez straty informácie.

Pre rozhodovaciu funkciu platí vzťah

$$f = \text{sign} \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) + b \right).$$

Parameter prahu b sa volí tak, aby norma $\|\mathbf{y} - f_b(\mathbf{X})\|$ bola minimálna pre dané b , potom

$$b = \frac{1}{|I|} \sum_{i \in I} \left(y_i - \sum_{j=1}^N \alpha_j y_j K(\mathbf{X}_j, \mathbf{X}_i) \right) \quad I = \{i; 0 < \alpha_i < C\}$$

Pre model sa zvolí konštanta C a parametre zvoleného jadra metódou krosvalidácie. Z parametrov $C = 2^{(-7+2k)}$ a $\sigma = 2^{(-17+2k)}$ pre $k = 1, \dots, 10$ sa vytvorí mriežka a pre každý bod sa zistí chyba klasifikácie pri náhodnom rozdelení pôvodnej tréningovej množiny na novú tréningovú a testovaciu množinu. Parametre sa vyberú také, ktoré najlepšie minimalizujú chybu zatriedenia po 10-tich opakovaní (Tab. 2).

σ, C	2^{-5}	2^{-3}	2^{-1}	2^1	2^3	2^5	2^7	2^9	2^{11}	2^{13}
2^{-15}	5/52	5/52	5/52	5/52	5/52	5/52	5/43	5/36	5/23	5/28
2^{-13}	5/52	5/52	5/52	5/52	5/52	5/52	5/35	5/35	5/22	5/17
2^{-11}	5/52	5/52	5/52	5/52	5/52	5/34	5/34	5/17	5/10	5/5
2^{-9}	5/52	5/52	5/52	5/52	5/34	5/34	5/17	4/8	5/0	5/3
2^{-7}	5/52	5/52	5/52	5/34	5/34	5/17	4/11	2/0	3/0	5/3
2^{-5}	5/52	5/52	5/34	5/34	5/17	5/11	2/5	1/0	3/0	5/3
2^{-3}	5/52	5/34	5/34	5/17	5/11	4/6	2/0	1/0	3/0	5/3
2^{-1}	5/34	5/34	5/17	5/11	4/5	2/3	2/0	1/0	3/0	5/3
2^1	5/34	5/17	5/11	4/5	2/5	2/0	2/0	1/0	3/0	5/3
2^3	5/17	5/11	4/5	2/5	2/4	2/0	2/0	1/0	3/0	5/3

Tabuľka 2: Výsledky krosvalidácie pre parametre C a σ pri 10-tich opakovaní na jednej tréningovej množine pre dáta $vNaN=4/vNaN=6$ (počet objektov v test. množine 1100/2100 z toho chorých 50/1050, zdravých 1050/1050).

2.3 Dopredné neurónové siete

Dopredné neurónové siete predstavujú jeden z mnohých klasifikačných príkladov v umelých neurónových sieťach [4].

Nami použitá neurónová sieť sa skladá z troch vrstiev neurónov ($l = 0, 1, 2$). Senzorická vrstva $l = 0$ pozostáva z 11-tich vstupných neurónov. Posledná vrstva $l = 2$ (ozn. L) pozostáva z 1-ného neurónu - výstupu. V skrytej vrstve $l = 1$ sa nachádzajú tri skryté neuróny, ktoré sa zvolili tak, aby sa sieť nepretrénovala na tréningovej množine a čo najlepšie zatriedila nové objekty.

Proces učenia pozostáva z viacerých bodov. Prvotne sa nastaví parametre siete, váhové koeficienty (W), tak aby čo najlepšie popisovali objekty v databáze. Zvolí sa typ aktivačnej funkcie $f(a)$, pre jednotlivé vrstvy, tak aby $f'_a > 0$. Pre vrstvu $l = 1$ sme zvolili sigmoidálny hyperbolický tangens $f(a) = \tanh(ca) = \frac{e^{ca} - e^{-ca}}{e^{ca} + e^{-ca}}$, pre výstupnú vrstvu $l = 2$ sigmoidálnu logistickú funkciu $f(a) = \frac{1}{1+e^{ca}}$, kde c je kladná konštanta a a suma vstupov do neurónu.

Trénovacími dátami sa nastavujú parametre siete (W) tak, aby sa minimalizovala chyba $E(W)$

$$E(W) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^K [z_{Lj}(\mathbf{X}) - y_j(\mathbf{X})]^2,$$

kde K je počet výstupných neurónov ($K = 1$), z_L je výstupná hodnota výstupného neurónu a $y(\mathbf{X})$ je skutočná hodnota výstupu.

V závislosti od vektora gradientu chybovej funkcie $\nabla E = \left\{ \frac{\partial E(W)}{\partial W} \right\}$ sa menia váhové koeficienty (parametre siete) podľa vzorca

$$W(t+1) = W(t) - \mu \nabla E,$$

kde t je počet krokov ($t = 1000$), μ je konštanta učenia, ktorá nadobúda hodnoty (0,1) a určuje rýchlosť a kvalitu učiaceho sa procesu.

Problémom ostáva ∇E . $\nabla_{z_L} E$ poznáme a pre ostatné vrstvy sa vypočíta chybový gradient podľa vzorca

$$(\nabla E)_l = [\nabla_{z_L} E \odot f'(a_l)] z_{l-1}^T,$$

kde l je počet vrstiev $l = 1, 2$, z_l je vektor výstupov vrstvy l , a_l je vektor vstupov do vrstvy l ($a_l = W_l z_{l-1}$), \odot je Hadamardov produkt matic.

3 Výsledky

Na natrénovaných modeloch pre jednotlivé metódy sa otestovali objekty z testovacej množiny tak, že výstupy klasifikácie testovacej množiny sa porovnali so skutočným zaradením objektu. Operácia tréningu a testovania sa zopakovala 1000-krát. Presnosť klasifikátora sa vyjadrila tromi odhadmi pravdepodobností, a to

$$P1 = \frac{\text{počet zaradených objektov do triedy 'zdraví' z triedy 'chorí'}}{\text{počet testovaných objektov v triede 'chorí'}}$$

$$P2 = \frac{\text{počet zaradených objektov do triedy 'chorí' z triedy 'zdraví'}}{\text{počet testovaných objektov v triede 'zdraví'}}$$

$$P3 = \frac{\text{počet zle zaradených objektov}}{\text{počet testovaných objektov}},$$

kde $P1$ predstavuje empirický odhad pravdepodobnosti, že objekt z testovacej množiny patriaci do triedy 'chorí' bol zatriedený do triedy 'zdraví' (z diagnostického hľadiska je dôležité minimalizovať hlavne túto chybu), $P2$, že objekt patriaci do triedy 'zdraví' bol zaradený do triedy 'chorí' (ekonomické hľadisko, z dôvodov nákladnej liečby) a $P3$, ktorá nám predstavuje empirický odhad pravdepodobnosti chyby klasifikátora.

V tabuľkách 3 a 4 sú výsledky odhadu pravdepodobností $P1$, $P2$ a $P3$ podľa jednotlivých klasifikačných metód (FLK, SVM, ANN) pre rôzne upravené dáta (vNaN). Na obrázku 3 je grafické znázornenie výsledkov.

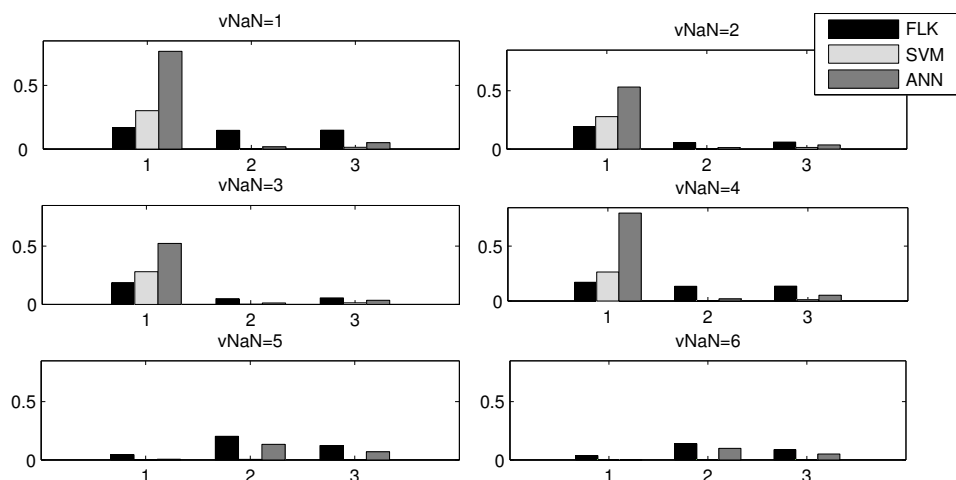
V prípade klasifikácie dát, kde počet zdravých ($n = 438$) bol mnohonásobne vyšší než počet chorých ($n = 20$) je vidieť (Tab. 3), že odhad pravdepodobnosti zlého zatriedenia chorých je vo všetkých štyroch prípadoch pre všetky

	vNaN=1			vNaN=2		
	P1	P2	P3	P1	P2	P3
FLK	.169	.147	.148	.190	.054	.060
SVM	.301	.001	.014	.278	.001	.013
ANN	.767	.017	.050	.533	.012	.035
	vNaN=3			vNaN=4		
	P1	P2	P3	P1	P2	P3
FLK	.187	.049	.055	.170	.133	.135
SVM	.281	.001	.014	.264	.001	.012
ANN	.523	.012	.035	.800	.018	.052

Tabuľka 3: Výsledky klasifikácie v prípade nepomeru objektov v triedach.

	vNaN=5			vNaN=6		
	P1	P2	P3	P1	P2	P3
FLK	.044	.202	.123	.036	.138	.087
SVM	.000	.004	.002	.000	.002	.001
ANN	.006	.134	.070	.001	.099	.050

Tabuľka 4: Výsledky klasifikácie v prípade rovnakého počtu objektov v triedach.



Obrázok 3: Grafické znázornenie výsledkov.

metódy väčšia ako odhad pravdepodobnosti zlého zatriedenia zdravých. Extrémne hodnoty odhadov pravdepodobnosti P1 v metódach SVM a ANN sa dajú oddôvodniť tým, že metódy sa snažia o najmenšiu celkovú chybu a zlé zatriedenie objektov z triedy 'chorí' k nej prispieva veľmi málo. Najlepšie výsledky celkovej chyby dosiahla metóda SVM. Najlepšie výsledky diagnózy choroby boli dosiahnuté v prípade metódy FLK, ktorá však výsledky celko-

vého zatriedenia objektov do tried dosiahla najhoršie. Najlepšie výsledky v metóde ANN boli dosiahnuté v prípade náhrady výrazov NaN dátami, ktoré mali rozdielne hodnoty pre triedu 'chorí' a 'zdraví' ($vNaN = 2, 3$).

V prípade klasifikácie dát, keď počet objektov v triede 'chorí' je rovný počtu zdravých objektov ($n = 438$) (Tab. 4), sú výsledky odlišné od predchádzajúcich prípadov. Vo výsledkoch FLK je odhad pravdepodobnosti zlého zatriedenia chorých približne rovná nastavenej hodnote kvantilu výstupov klasifikátora pre chorých. Odhad pravdepodobnosti zlého zatriedenia zdravých je vysoká. Ako vidieť aj na obrázku 2, triedy sa nedajú od seba lineárne dobre oddeliť, preto je metóda na klasifikáciu týchto dát nevyhovujúca. V prípade SVM ide o takmer bezchybné zatriedenie objektov. Výsledky ANN sú vyhovujúce, aj keď odhad pravdepodobnosti P2 dosahuje vyššie hodnoty.

4 Záver

V štúdií sme porovnali tri rôzne klasifikačné metódy. Z výsledkov sa dá konštatovať, že v prípade nepomeru objektov v jednotlivých triedach sú výsledky klasifikácie nevyhovujúce hlavne pre zatriedenie menej početnej triedy. V prípade rovnosti počtu objektov je klasifikácia dát omnoho lepšia.

Reference

- [1] Amann A. (2005). *Breath analysis for clinical diagnosis and therapeutic monitoring*. World Scientific, Singapore.
- [2] Arendacká B. (2005). *Classification of objects in segmented EPO images*. In Proc. of: MEASUREMENT 2005, 5th International Conference on Measurement, 194–198.
- [3] Hornišová K. (2005). *Klasifikácia erythropoetínových obrazcov metódou oporných bodov (support vector machines)*, Forum Statisticum Slovaca **3**, 174–183.
- [4] Hristev R.M. (1998). *The ANN Book*. GNU Public Licence, 9–26, 129–151.

Podakovanie: Práca bola podporená grantami VEGA 1/3016/06 a VEGA 2/4026/04.

Adresa: K. Cimermanová, Ústav merania, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava, Slovensko

E-mail: katarina.cimermanova@gmail.com

KVANTILOVÁ REGRESE A ODHAD PARETOVA INDEXU

Jan Dienstbier

Klíčová slova: Kvantilová regrese, Paretův index, analýza extrémních událostí, Hillův odhad.

Abstrakt: Odhad Paretova indexu byl v regresním případě, kdy jsou náhodné veličiny stochasticky závislé na vektoru nezávislých proměnných, v minulosti studován mnohem méně, než pro případ stejně rozdělených nezávislých veličin. V příspěvku je načrtnut jeden nový a zajímavý přístup využívající modifikace stávajících odhadů na základě kvantilové regrese. Zahrnut je stručný úvod do teorie jak extrémních hodnot, tak i kvantilové regrese. Dále je krátce prezentována problematika asymptotických vlastností takto získaných odhadů. Použitelnost navrhnutého přístupu je demonstrována na simulacích.

1 Úvod

Teorie analýzy extrémních událostí se už dávno rozvinula v samostatný směr statistického uvažování. To je podloženo jejím významem pro praxi – za základní teoretickou motivací, která se dá zjednodušeně shrnout pod heslo *odhad četnosti a velikosti extrémních událostí*, si lze představit celou řadu jevů z reálného života. Ptáme se tak například, jak často se opakují povodně dané úrovně, jak často dojde k silným otřesům zemské kůry nebo kolikrát musí pojišťovna vyplatit opravdu velkou pojistnou událost. Už z našeho krátkého výčtu vidíme důležitost statistického modelování náhodných událostí tohoto druhu. Svět kolem nás přináší podobných otázek samozřejmě mnohem více.

Matematicky můžeme problém popsat následujícím způsobem: Mějme posloupnost nezávislých stejně rozdělených náhodných veličin X_1, \dots, X_n , $n \in \mathbb{N}$ a naším úkolem bude nějakým způsobem charakterizovat rozdělení nejvyšší pořádkové statistiky $X_{n,n} = \max\{X_1, \dots, X_n\}$ tj. *charakterizovat rozdělení pravých chvostů* X_i (bez újmy na obecnosti se dále omezíme pouze na veličiny splňující $X_i \geq 0$ a budeme-li mluvit o „*chvostech*“ budeme tím myslet pouze pravé chvosty). Takovou charakterizaci nám pro širokou třídu rozdělení (viz Beirlant a kol. [1]), umožňuje fundamentální výsledek extrémní analýzy tzv. Fisher-Tippet-Gnědenkova věta.

Věta 1.1. *Pokud existují takové posloupnosti $\{a_n; n \geq 1\}$ a $\{b_n; n \geq 1\}$, že posloupnost $a_n^{-1}(X_{n,n} - b_n)$ konverguje v distribuci k rozdělení G , pak G musí být typu G_γ , $\gamma \in \mathbb{R}$, kde*

$$G_\gamma(x) = \begin{cases} \exp\left(-(1 + \gamma x)^{-1/\gamma}\right) & \text{pro } 1 + \gamma x > 0, \gamma \neq 0 \\ \exp\left(-e^{-x}\right) & \text{pro } x \in \mathbb{R}, \gamma = 0. \end{cases}$$

Věta nám vlastně říká, že z asymptotického hlediska, lze chvosty rozdělení X_i popsat pomocí jediného parametru γ . Mluvíme proto o *sférách přitažlivosti* neboli o třídách rozdělení

- **Fréchet-Paretova typu** pro $\gamma > 0$, tj. o rozděleních s těžkými chvosty,
- **Gumbelova typu** pro $\gamma = 0$, tj. o rozděleních s exponenciálními chvosty,
- **Weibullova typu** pro $\gamma < 0$, tj. o rozděleních s omezenými chvosty (omezených rozděleních).

Pro dostatečně velké n tak lze úkol charakterizovat chvosty rozdělení na základě náhodného výběru X_1, \dots, X_n převést na problém odhadu parametru γ . Takových odhadů je v literatuře popsána celá řada – viz Beirlant a kol. [1]. Předpokládejme však nyní poněkud složitější situaci lineárního regresního modelu s absolutním členem

$$Y_i = \beta^\top \mathbf{x}_i + u_i, \quad \beta \in \mathcal{R}^{p+1}, \quad \mathbf{x}_{i0} = 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

kde u_i jsou nezávislé náhodné veličiny. Naším úkolem bude popsat chvosty náhodných veličin Y_i resp. u_i . I tento teoretický problém je motivován požadavky každodenní praxe – např. v případě povodní víme, že se průtoky řek během let mění, průměrné roční teploty podléhají klimatickým změnám atp.

Zatímco pro případ nezávislých stejně rozdělených veličin existuje rozsáhlá literatura, regresní případ byl studován mnohem méně – pro dosud používané metody odkazují opět na Beirlant a kol. [1]. Cílem tohoto příspěvku je představit jeden dosud málo používaný přístup k odhadu Paretova indexu za výše popsaných předpokladů, který je založen na principech kvantilové regrese. Hlavním přínosem článku by měla být demonstrace možností metody na simulovaných datech a zároveň naznačení otevřených problémů k řešení.

2 Motivace

Vraťme se nyní ještě jednou k případu stejně rozdělených nezávislých veličin a uvažujme jednoduchý *Pickandsův odhad*

$$\hat{\gamma}_{P,k} := \frac{1}{\log 2} \log \left(\frac{X_{n-\lfloor k/4 \rfloor + 1, n} - X_{n-\lfloor k/2 \rfloor + 1, n}}{X_{n-\lfloor k/2 \rfloor + 1, n} - X_{n-k+1, n}} \right), \quad (2)$$

přičemž $4 \leq k \leq n-1$ je volitelný parametr. Odhad je motivován faktem, že

$$\frac{1}{\log 2} \log \left\{ \frac{Q(1-1/4y) - Q(1-1/2y)}{Q(1-1/2y) - Q(1-1/y)} \right\} \xrightarrow{y \rightarrow \infty} \gamma,$$

kde $Q(y) = F^\leftarrow(y) = \inf \{x : F(x) \geq y\}$ je *kvantilová funkce*. Pro X_1, \dots, X_n nezávislé stejně rozdělené veličiny lze nahradit $Q(1-1/y)$ empirickou verzí $\hat{Q}_n(1-1/y) = X_{n-\lfloor n/y \rfloor + 1, n}$ a odtud už dostáváme (2). Pokud však náhodné

veličiny nezávislé a stejně rozdělené nejsou, nelze pro odhad $\hat{Q}_n(1 - 1/y)$ pořádkových statistik použít.

To samé platí i pro řadu dalších odhadů založených na pořádkových statistikách, jako je např. *Hillův odhad* $H_{k,n} := \frac{1}{k} \sum_{i=0}^{k-1} \log X_{n-i,n} - \log X_{n-k,n}$, použitelný za předpokladu $\gamma \in (0, \infty)$, nebo jeho zobecnění pro $\gamma \in \mathbb{R}$ *Momentový odhad*

$$M_{k,n} = H_{k,n} + 1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{H_{k,n}^2}{H_{k,n}^{(2)}} \right),$$

kde $H_{k,n}^{(2)} = \frac{1}{k} \sum_{i=0}^{k-1} (\log X_{n-i,n} - \log X_{n-k,n})^2$. Podobně jako u Pickandsova odhadu závisí volba k , kde $1 < k < n - 1$, na našem rozhodnutí.

K problematice této volby viz Beirlant a kol. [1] str. 104 a násl.

3 Základy kvantilové regrese

Uvažujme lineární model (1) s absolutním členem β_0 . Princip lineární kvantilové regrese spočívá v nalezení řešení minimalizační úlohy

$$\hat{b}(\tau | \mathbf{Y}, \mathbf{x}) := \arg \min_{b \in \mathcal{R}^{p+1}} \sum_{i=1}^n \rho_\tau(Y_i - \mathbf{x}_i^\top b),$$

kde $\mathbf{x}_{n \times p+1}$ je matice s lineárně nezávislými sloupci, jejímž prvním sloupcem je vždy vektor $(1, \dots, 1)^\top$, a kde ρ_τ označuje *ztrátovou funkci*

$$\rho_\tau(u) := u \cdot (\tau - I(u < 0)).$$

Zavedení *regresního kvantilu* $\hat{Q}_Y(\tau | \mathbf{x}_i) := \mathbf{x}_i^\top \hat{b}(\tau | Y, \mathbf{x})$ je zcela přirozené – ztrátová funkce ρ_τ nám dává ztrátu $1 - \tau$ v případě, že se bod nalézá nad regresní rovinou $\mathbf{x}_i^\top b$, naopak pokud se bod nalézá pod touto rovinou, je ztráta τ . Pokud budeme dále mluvit o odhadu $\hat{b}(\tau | Y, \mathbf{x}) = (\hat{b}_0, \dots, \hat{b}_p)$, bude \hat{b}_0 vždy označovat odhad absolutního členu regresního kvantilu, tedy odhad $\beta_0 + F^{\leftarrow}(\tau)$, kde F^{\leftarrow} je kvantilová funkce rozdělení chyb a β_0 je absolutní člen modelu (1). Podrobnou motivaci kvantilové regrese i širší diskuzi jejich vlastností najde čtenář v Koenker [6].

4 Použití kvantilové regrese v odhadech γ

Po krátkém exkursu do teorie kvantilové regrese se opět vraťme k lineárnímu modelu (1), v němž chceme odhadnout Paretův index. Mějme stále na paměti jednoduchou definici Pickandsova odhadu a uvažujme následující případy

1. *Případ* $u_i \sim F(\theta; z)$, kdy rozdělení chyb závisících na parametru θ neznáme, ale lze předpokládat že chyby jsou nezávislé a mají stejné

rozdělení. V odhadech γ navrhujeme nahradit kvantilovou funkcí chvostů *odhadem absolutního členu regresního kvantilu* \hat{b}_0 . Dostáváme tak např. tuto modifikaci Pickandsova odhadu jako funkci $0 < \tau < \frac{1}{4}$

$$\hat{\gamma}_P^Q(\tau) := \frac{1}{\log 2} \log \left(\frac{\hat{b}_0(1 - 4\tau|\mathbf{Y}, \mathbf{x}) - \hat{b}_0(1 - 2\tau|\mathbf{Y}, \mathbf{x})}{\hat{b}_0(1 - 2\tau|\mathbf{Y}, \mathbf{x}) - \hat{b}_0(1 - \tau|\mathbf{Y}, \mathbf{x})} \right). \quad (3)$$

Obdobně navrhujeme přistupovat i k dalším odhadům, které jsou zkonstruovány na základě pořádkových statistik $Y_{n-k:n}$. Tyto statistiky nahradíme $\hat{b}_0(1 - k/n|\mathbf{Y}, \mathbf{x})$ tj. $\hat{b}_0(\tau|\mathbf{Y}, \mathbf{x})$ pro $\tau = 1 - k/n$. V tomto smyslu budeme také vzniklé odhady chápat jako funkce k .

2. *Případ* $u_i \sim F(\theta(\mathbf{x}_i); z)$, kdy je situace zkomplikována tím, že neznámý parametr θ je funkcí nezávislé proměnné. Znamená to, že chyby nejsou stejně rozdělené a pro každé \mathbf{x}_i dostáváme jiný odhad Paretova indexu. Za odhad kvantilové funkce chvostů proto navrhujeme použít přímo celý *regresní kvantil*. Dostáváme tak např. pro $0 < \tau < \frac{1}{4}$ tuto modifikaci Pickandsova odhadu

$$\hat{\gamma}_P^Q(\tau) := \frac{1}{\log 2} \log \left(\frac{\hat{Q}_Y(1 - 4\tau|\mathbf{x}_i) - \hat{Q}_Y(1 - 2\tau|\mathbf{x}_i)}{\hat{Q}_Y(1 - 2\tau|\mathbf{x}_i) - \hat{Q}_Y(1 - \tau|\mathbf{x}_i)} \right).$$

Podobně jako v předchozím případě se nabízí rozšířit použití regresních kvantilů i na další statistiky. Navrhujeme v nich nahradit pořádkovou statistiku $Y_{n-k:n}$ regresním kvantilem $\hat{Q}_Y(1 - k/n|\mathbf{x}_i)$ tj. stejně jako v předchozím případě dostáváme odhady jako funkce $\tau = 1 - k/n$ resp. k . Samozřejmě uvedený postup má smysl pouze, pokud v pozorovaných datech odpovídá jedné nezávislé proměnné \mathbf{x}_i více hodnot Y_i .

Ověření funkčnosti právě navržených odhadů na simulační studii bude náplní následující kapitoly.

5 Simulace

Uvažujme model s lineárním trendem $Y_i = \frac{1}{500}X_i + u_i$, $X_i = 1, \dots, 1000$, kde $u_i \sim |t_2|$ jsou nezávislé náhodné veličiny s absolutní hodnotou Studentova t -rozdělení o dvou stupních volnosti. O tomto rozdělení víme, že má Paretoův index $\gamma = \frac{1}{2}$. Nasimulovali jsme data z tohoto modelu a zkusili na ně aplikovat tuto kvantilově regresní modifikaci Hillova odhadu

$$H_n^{\tilde{Q}}(k) := \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k-1} \log \hat{b}_0 \left(\frac{n-i}{n} \middle| Y, \mathbf{x} \right) - \log \hat{b}_0 \left(\frac{n-k}{n} \middle| Y, \mathbf{x} \right). \quad (4)$$

Grafy dvou takových odhadů v závislosti na k uvádíme na Obrázku 1 – plnou čarou je vyznačena modifikace Hillova odhadu, která využívá kvantilové regrese s lineárním trendem, odhad založený na kvantilové regresi s kvadratickým trendem (zbytečně široký regresní model) je vyznačen čárkovaně. Tyto odhady jsou srovnány s klasickým Hillovým odhadem $H_{k,n}$ (šedě čárkovaně) a Hillovým odhadem pro data, ze kterých byl zpětně odečten před simulací známý lineární trend (šedě plně). Skutečná hodnota $\gamma = \frac{1}{2}$ je vyznačena čarou. Vidíme, že kvantilová modifikace Hillova odhadu dává smysluplné výsledky podobné těm, které dostáváme z klasického Hillova odhadu pro nezávislá stejně rozdělená data.

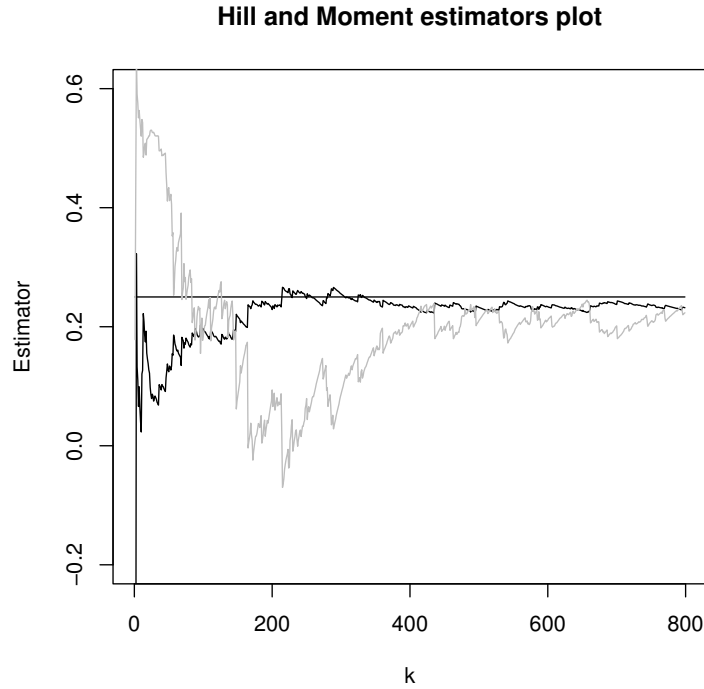


Obrázek 1:

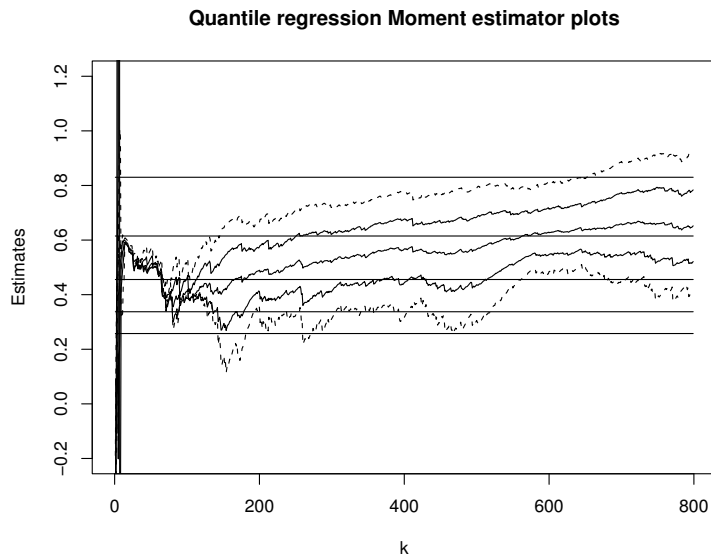
Zkoumali jsme i modifikaci Pickandsova odhadu (3). Ukázalo se však, že není v praxi použitelná pro svůj přílišný rozptyl. To ale platí i pro klasickou variantu Pickandsova odhadu a stejně rozdělená data. Tyto grafy neuvádíme pro větší přehlednost obrázků.

Pro další simulaci (viz Obrázek 2) jsme použili lineární model s kvadratickým trendem $Y_i = \frac{1}{20}X_i^2 + 2X_i + u_i$, kde $X_i = \{1, \dots, 40, 1, \dots, 40, \dots, 1, \dots, 40\}$, $i = 1, \dots, 1200$ a u_i mají *Paretovo rozdělení* s distribuční funkcí $F(x) = 1 - x^{-4}$, které odpovídá $\gamma = 0.25$. Na obrázku jsou grafy modifikací odhadů Hillova (černě) a Momentového (šedě). I tyto výsledky jsou vzhledem k použitému rozdělení chyb a tím i předpokládanému malému asymptotickému vychýlení odhadu i pro větší k uspokojivé.

Poslední simulace zkoumala funkčnost odhadů, které jsou založeny přímo na regresních kvantilech, nikoli pouze na odhadu absolutního členu. Data jsme generovali z modelu $Y_i = GP(\sigma, \gamma(X_i))$, kde $GP(\cdot)$ značí *zobecněné*



Obrázek 2:



Obrázek 3:

*Pareto*vo rozdělení s distribuční funkcí $1 - \left(1 + \frac{\gamma x}{\sigma}\right)^{-\frac{1}{\gamma}}$. V simulaci jsme použili $\gamma(x) = \frac{1}{4} \exp\left(\frac{3}{1000}x\right)$ pro $x = \{1, \dots, 40\}$ a $\sigma = 1$. Celý experiment jsme 30-krát zopakovali, čímž jsme nakonec získali 1200 dat. Na Obrázku 3 tak vidíme grafy modifikací momentového odhadu pro $x = 1, 10, 20, 30, 40$ v závislosti na k , které odhadují rostoucí parametr γ v tom pořádku, jaký bychom očekávali (skutečné hodnoty γ jsou opět naznačeny čarami). Čárkovaně jsou značeny grafy pro $x = 1, 40$, které mohou být problematické z hlediska porušení monotonie regresních kvantilů (bude ještě diskutováno níže).

Můžeme tedy tento oddíl uzavřít s tím, že odhady modifikované kvantilovou regresí mají smysl v obou navržených variantách. Simulační studie však představují spíše ilustraci popsané metody, než její důkladné prověření. Uvedené výsledky byly sice typické pro vzorek několikrát opakovaných pokusů, ale do budoucna bude nutné připravit mnohem rozsáhlejší studii, která by naše domněnky lépe prozkoušela.

6 Otevřené problémy - konstrukce odhadů

Po demonstraci odhadů na simulační studii se nyní obraťme k jejich konstrukci a teoretickým vlastnostem.

Především je nutno říct, že nahrazení pořádkových statistik regresními kvantily není zcela bezesporné. V simulacích jsme tak např. s pomocí kvantilové regrese modifikoval Hillův odhad, což je krok velice problematický. Tento odhad totiž není jakožto statistika založená na logaritmovaných datech invariantní na posunutí. V simulacích jsme tento nedostatek záměrně obešli tím, že jsme pracovali pouze s modely s nulovým absolutním členem. V takovém případě vlastně \hat{b}_0 přímo odhaduje kvantily chyb modelu. Pro dostatečně velký absolutní člen neboli pro dostatečně velké posunutí o konstantu však metoda díky této nepříjemné vlastnosti Hillova odhadu selže (tento fakt byl potvrzen i simulacemi, které v článku neuvádíme). Nabízí se nám dvě cesty – buďto data vhodným způsobem znormovat anebo Hillův odhad úplně opustit.

Do budoucna bychom proto měli zaměřit pozornost na ty odhady Paretova indexu, které jsou na posunutí invariantní. Možností je více. Odhad s touto vlastností, který ideově vychází z Hillova odhadu uvádí Fraga Alves [4]. Simulace však naznačují, že jeho rozptyl je za některých předpokladů mnohem větší než u odhadu Hillova. Východiskem by mohly být např. odhady založené na vážených momentech (*probability weighted moments*), ty jsou však pro $\gamma \geq 1$ problematické díky neexistenci momentů rozdělení. Jinou zajímavou třídu na posunutí invariantních odhadů popisuje Drees [3].

Aby naše odhady měly smysl, je také nutné zaručit u regresních kvantilů monotonii. I zde může být problém – regresní kvantily obecně být monotónní nemusí. Naštěstí se ukazuje, že se tento jev týká pouze bodů vzdálených od těžiště $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i$. Naopak v jeho blízkosti je monotonie zaručena. S možným zkreslováním odhadů regresních kvantilů je však v případě nestejně rozdělených chyb u „odlehlejších“ nezávisle proměnných nutné počítat.

Z konstrukčního hlediska je zajímavá otázka volby τ , pro které používáme regresní kvantily. V simulacích jsme pro jednoduchost použili $\tau = 1 - \frac{i}{n}$, $i = 1, \dots, k$. Regresní kvantily jsou samozřejmě vzhledem k τ diskrétní a navíc se pro $\tau = \frac{k}{n}$ a $\tau = \frac{k+1}{n}$ nemusí vůbec lišit (o tom více viz Koenker [6], str. 33 a násl.). Nabízí se proto otázka, zda by nebylo lepší použít jako základ pro odhad regresní kvantily pouze v bodech změny tj. ne přímo v $\frac{k}{n}$. Vzhledem k tomu, že z teoretického hlediska by měly být oba přístupy asymptoticky identické, bude asi záležet na větším souboru dalších simulacích, aby naznačil, které řešení je vhodnější.

Nejdůležitějšími otázkami kolem těchto odhadů jsou však důkaz jejich konzistence a nalezení asymptotického rozdělení. Tento problém byl zatím vyřešen pouze pro Pickandsův odhad – konzistenci a asymptotickou normalitu kvantilově regresní modifikace tohoto odhadu ukázal za poměrně obecných předpokladů Chernozhukov [2]. Jeho důkaz však bohužel nelze rozšířit i na jiné odhady. Konstrukce důkazu konzistence pro některou širší třídu odhadů tak zůstává hlavním cílem budoucího výzkumu v této oblasti. Uveďme však několik zajímavých faktů, o které se můžeme opřít. Především víme, že regresní kvantily jsou za poměrně širokých předpokladů týkajících se rozdělení chyb a regresního modelu konzistentní – viz Jurečková a Sen [5]. Autoři zde ukazují nejen jejich stejnoměrnou konvergenci v τ , ale i asymptotickou normalitu. Tím získáváme základní předpoklad pro důkaz vlastní konvergence jednotlivých odhadů Paretova indexu. Nejde však o triviální problémy, např. konzistenci velice dlouho používaného Hillova odhadu podrobně dokázal pro stejně rozdělená data až Mason [7].

7 Závěr

V článku jsme představili novou a podle prvních výsledků snad i slibnou skupinu odhadů Paretova indexu v lineárním modelu. Viděli jsme, že odhady těží z přirozeného principu kvantilové regrese. Tím se do budoucna otvírá možnost rozšíření působnosti i na nelineární modely. Předtím však před námi leží nejdůležitější úkol: popsat asymptotiku odhadů tohoto typu. Pokud se tento problém podaří vyřešit, měli bychom získat významnou alternativu ke stávajícím přístupům odhadu Paretova indexu v regresním případě.

Reference

- [1] Beirlant J. a kol. (2004). *Statistics of extremes*, John Wiley, Chichester.
- [2] Chernozhukov V. (2000). *Conditional extremes and near-extremes: concepts, estimation, and economic applications*, Stanford Ph.D. Dissertation, <http://www.mit.edu/~vchern/ced.ps>
- [3] Drees H. (1998). *On smooth statistical tail functionals*, Scandinavian Journal of Statistics **25**, 187–210.
- [4] Fraga Alves M.I. (2001). *A location invariant Hill-type estimator*, Extremes **4**, 199–217.
- [5] Jurečková J., Pranab K. Sen (1996). *Robust statistical procedures: asymptotics and interrelations*, John Wiley, New York.
- [6] Koenker R. (2005). *Quantile regression*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [7] Mason D.M. (1982). *Laws of large numbers for sums of extreme values*, Annals of Probability **10**, 754–764.

Adresa: J. Dienstbier, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: dienstbi@karlin.mff.cuni.cz

MODIFIKOVANÁ RAOVA VZDÁLENOST

Zdeněk Fabián

Klíčová slova: Core funkce, skórová funkce, Johnsonova transformace, testování hypotéz.

Abstrakt: V příspěvku je pod názvem Johnsonova skórová funkce představena vlivová funkce pravděpodobnostního rozdělení. V případě parametrického rozdělení ji lze chápat jako inferenční funkci, kterou lze použít ke konstrukci charakteristik rozdělení i datových souborů a k modifikaci Raovy vzdálenosti pro testování hypotéz.

1 Úvod

V roce 1949 Johnson [1] uveřejnil nápad, že vlastnosti rozdělení definovaných na polopřímce nebo intervalu lze studovat pomocí vlastností jejich 'prototypů' definovaných na \mathbb{R} . Toho nápadu lze využít pro konstrukci nových charakteristik pravděpodobnostních rozdělení a dat z nich pocházejících. V kap. 4 je definována Johnsonova skórová funkce, kterou lze chápat jako vlivovou funkci rozdělení nebo i jako inferenční funkci pro uvažovanou parametrickou rodinu rozdělení. V kap. 3 jsou shrnuty základní údaje o core funkci, kterou jsem se snažil uvést do života na letních i zimních školách ROBUST v posledních deseti letech a která je podstatnou součástí Johnsonovy skórové funkce. Johnsonova funkce se hodí pro řešení některých statistických úloh, jak bude patrné z posledních tří kapitol.

2 Skórová funkce

Mějme náhodnou veličinu X s rozdělením F_θ , jehož tvar je znám až na hodnotu parametru $\theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^m$. Hustotu rozdělení F_θ označme $f_\theta(x)$. Jsou-li $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ pozorované hodnoty veličiny X , je veškerá informace, která je k dispozici, obsažena ve věrohodnostní funkci $L(\theta) = f_\theta(\mathbf{x})$. Tuto informaci lze často lépe využít, je-li $L(\theta)$ transformována na vektor věrohodnostních skóru $\mathbf{U}(\theta) = (U_{\theta_1}(\theta), \dots, U_{\theta_m}(\theta))$, kde

$$U_{\theta_k}(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta_k} \log L(\theta).$$

Pro odhad parametru θ metodou maximální věrohodnosti, spočívající v řešení rovnic

$$\sum_{j=1}^n U_{\theta_k}(x_j; \theta) = 0, \quad k = 1, \dots, m, \quad (1)$$

je m věrohodnostních skóru nezbytných. Z hlediska jiných statistických úloh není rozpad věrohodnostní funkce na m skóru právě příjemný. Uvažujme

Raovu vzdálenost pro testování hypotézy $H_0 : \hat{\theta} = \theta_0$ oproti alternativě $H_1 : \hat{\theta} \neq \theta_0$, kde $\hat{\theta}$ je maximálně věrohodný odhad θ a θ_0 hypotetická hodnota. Jednoduchý vzorec platný v případě skalárního θ ,

$$D_{Rao}(\hat{\theta}, \theta_0) = \frac{1}{\mathbb{E}_\theta U_\theta^2} \left| \sum_j U_\theta(x_j; \theta_0) \right|^2, \quad (2)$$

se v případě vektorového θ změni v obtížně manipulovatelný maticový výraz, do něhož musíme m -krát dosazovat tytéž pozorované hodnoty. Přitom – s výjimkou euklidovské vzdálenosti Waldovy – ostatní používané vzdálenosti (vzdálenost založená na věrohodnostním poměru, Kullbackova vzdálenost, všechny ϕ -divergence a ϕ -disparity [2]) mají podobně jednoduchou strukturu jako (2) i v případě vektorového θ .

Buď $a < b \in \mathbb{R}$. Řekneme, že rozdělení $F_\theta(x)$ má nosič (a, b) , jestliže pro jeho hustotu f_θ platí

$$f_\theta(x) \begin{cases} > 0 & \text{pro } x \in (a, b) \\ = 0 & \text{pro } x \in \mathbb{R} \setminus (a, b). \end{cases}$$

Rozdělení s nosičem \mathbb{R} budeme značit písmenem G a jeho hustotu g . Skalární funkcí signifikantní pro G by mohl být věrohodnostní skór pro nejdůležitější parametr. Pro rozdělení s parametrem polohy μ je to určitě právě μ . Pišme $\theta = (\mu, \tilde{\theta})$ kde $\tilde{\theta} = (\theta_2, \dots, \theta_m)$; máme $g(x; \theta) = g(x - \mu; \tilde{\theta})$ a

$$U_\mu(x - \mu; \tilde{\theta}) = -\frac{1}{g(x - \mu; \tilde{\theta})} \frac{d}{dx} g(x - \mu; \tilde{\theta}). \quad (3)$$

Pro $\mu = 0$ a $\theta_j = 1, j = 2, \dots, m$ je na pravé straně rovnice (3) skórová funkce

$$Q(x) = -g'(x)/g(x), \quad (4)$$

která má podle [3] smysl vlivové funkce rozdělení F .

Potíž je ale s rozděleními s nosičem $(a, b) \neq \mathbb{R}$. Nelze je doplnit parametrem polohy a vzorec (4) pro ně nedává nic rozumného (viz [4]).

3 Core funkce

Podle [4]-[7], každé rozdělení F s nosičem $(a, b) \neq \mathbb{R}$ můžeme považovat za transformovaný 'prototyp', kterým je nějaké rozdělení G s nosičem \mathbb{R} . Je-li dáno vhodné zobrazení $\eta^{-1} : \mathbb{R} \rightarrow (a, b)$, je hustota rozdělení $F = G \circ \eta$

$$f(x) = g(\eta(x))\eta'(x). \quad (5)$$

f tak sestává ze součinu obrazu hustoty prototypu a jakobiánu inverzního zobrazení, který je všem rozděleními na daném nosiči společný. Za funkci,

která by mohla hrát roli vlivové funkce rozdělení F , jsem od své první přednášky na ROBUSTu [4] považoval transformovanou skórovou funkci prototypu

$$T(x) = Q(\eta(x)) \quad (6)$$

nazvanou v [5] core funkcí. Dále bylo třeba zvolit vhodné zobrazení; po počátečním pokusu v [4] a [5] byla v [6] zvolena Johnsonova transformace $\eta : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, upravená pro nosiče ve formě libovolného otevřeného intervalu do tvaru

$$\eta(x) = \begin{cases} x & \text{pro } (a, b) = \mathbb{R} \\ \log(x - a) & \text{pro } -\infty < a < b = \infty \\ \log \frac{(x - a)}{(b - x)} & \text{pro } -\infty < a < b < \infty \\ \log(b - x) & \text{pro } -\infty = a < b < \infty. \end{cases} \quad (7)$$

Z (6) vyplývá s použitím (4) a (5) vztah (viz [4])

$$T(x) = \frac{1}{f(x)} \frac{d}{dx} \left(-\frac{1}{\eta'(x)} f(x) \right), \quad (8)$$

podle něhož lze core funkci rozdělení F najít i bez explicitního určení prototypu pouze na základě znalosti hustoty f a zobrazení η . Závislost funkce T na η a zprostředkovaně na definičním oboru (a, b) je na první pohled překvapivá, ale nic naplat: je důsledkem názoru, že (a, b) je celý prostor a ne pouhá součást \mathbb{R} . To je jistě možný úhel pohledu; uvidíme v dalším, co přinese nového.

Námítky oponentů směřují obvykle k jednoznačnému výběru η . Nemyslím si, že oprávněně. Pro většinu rozdělení používaných ke statistickému modelování je Johnsonovo η nejvhodnější: logaritmičká transformace je přímo stvořená pro rozdělení s exponenciálními hustotami. Při použití (7) dále:

- a/ prototypem lognormálního rozdělení je normální rozdělení,
- b/ core funkce rovnoměrného rozdělení je lineární.

Při použití jiného zobrazení bychom možná pro několik rozdělení dostali jednodušší vzorce, ale většinu ostatních by to neprospělo. Zde předem poznamenávám, že ať už bychom vybrali η (spojité a rostoucí) jakkoli, nedošlo by nikdy k podobné katastrofě, jakou je neexistence střední hodnoty.

V dalším bylo nutné rozšířit pojem core funkce na parametrická rozdělení. Klíčovou roli pro rozdělení F s nosičem $(a, b) \neq \mathbb{R}$ hrál transformovaný parametr polohy prototypu,

$$t = \eta^{-1}(\mu), \quad (9)$$

chápaný jako 'těžiště' rozdělení F (stejně jako μ je 'těžištěm' prototypu G : v geometrii zavedené v \mathbb{R} pomocí skórové funkce je skutečným těžištěm). Parametru t budeme říkat Johnsonův.

Hustota transformovaného rozdělení $F_{t,s} = G_{\mu,s} \circ \eta$ s prototypem $G_{\mu,s}$ s hustotou s parametry polohy $\mu \in \mathbb{R}$ a měřítka $s \in (0, \infty)$ ve tvaru

$$g_{\mu,s}(x) = \frac{1}{s} g\left(\frac{x - \mu}{s}\right) \quad (10)$$

je

$$f_{t,s}(x) = \frac{1}{s} g\left(\frac{\eta(x) - \eta(t)}{s}\right) \eta'(x). \quad (11)$$

Core funkci rozdělení $F_{t,s}$ odvodíme z (8). Položme

$$u = \frac{\eta(x) - \eta(t)}{s}. \quad (12)$$

Pomocí (5) a věty o derivaci složené funkce

$$\begin{aligned} T_{t,s}(x) &= \frac{1}{f_{t,s}(x)} \frac{d}{dx} \left(-\frac{1}{\eta'(x)} f_{t,s}(x) \right) \\ &= \frac{s}{g(u)\eta'(x)} \frac{d}{dx} \left(-\frac{1}{\eta'(x)} \frac{1}{s} g(u)\eta'(x) \right) \\ &= \frac{1}{g(u)\eta'(x)} \frac{d(-g(u))}{du} \frac{du}{dx}, \end{aligned}$$

takže vzhledem k (4)

$$T_{t,s}(x) = \frac{1}{s} Q\left(\frac{\eta(x) - \eta(t)}{s}\right). \quad (13)$$

Pro rozdělení s Johnsonovým parametrem t jsme pak dokázali vztah

$$U_t(x; t, s) = \frac{\eta'(t)}{s} T_{t,s}(x). \quad (14)$$

([4], Věta 3, [5], Věta 2, [6], Věta 1, [7], vzorec 8: člen $1/s$ máme nyní obsažen v $T_{t,s}$). Věrohodnostní skór rozdělení s Johnsonovým parametrem (např. exponenciálního, lognormálního, Weibullova, log-logistického atd.) lze tedy rozložit na součin Johnsonova obrazu skórové funkce prototypu a Jakobiánu transformace v bodě t .

4 Johnsonova skórová funkce

Předešlá kapitola je stručným obsahem úvodních partií příspěvků ve Sbornících ROBUSTu [4]-[6], které, obávám se, nebyly zcela srozumitelně formulované. Nyní postoupíme dále.

Všimneme si, že z (4) plyne $Q(0) = 0$. Z (13) pak vyplývá

$$T_{t,s}(t) = 0. \quad (15)$$

Uvědomíme si, že pro dané rozdělení t není parametr, jak jsem si dlouho myslel, ale bod: těžiště, a definujeme konečně obecně vlivovou funkci těžiště rozdělení nezávisle na tom, zda rozdělení má či nemá Johnsonův parametr.

Definice 1. Buď F spojitě rozdělení se spojitě diferencovatelnou hustotou na nosiči $(a, b) \subseteq \mathbb{R}$ a η buď zobrazení dané předpisem (7). Buď T funkce definovaná vzorcem (8) a x^* řešením rovnice

$$T(x) = 0. \quad (16)$$

Johnsonovou skórovou funkcí rozdělení F nazveme funkci

$$S(x) = \eta'(x^*)T(x). \quad (17)$$

Pro některá F je S něčím, co už z matematické statistiky známe:

(I) Má-li F nosič \mathbb{R} je $\eta'(x) = 1$ a $S(x) = Q(x)$.

(II) Pro F s nosičem $(a, b) \neq \mathbb{R}$ a prototypem s parametrem polohy platí

Věta 1. Buď $G_{\mu,s}$ prototyp s hustotou $g_{\mu,s}$ podle vzorce (10) a $F_{t,s} = G_{\mu,s} \circ \eta$ transformované rozdělení se spojitě diferencovatelnou hustotou ve tvaru (11). Johnsonova skórová funkce rozdělení $F_{t,s}$ je věrohodnostním skórem Johnsonova parametru t .

Důkaz. Užijeme označení (12) a Johnsonovu skórovou funkci rozdělení $F_{t,s}$ označíme $S_{t,s}$. Podle (15) je $x^* = t$ a podle (17), (13) a (4)

$$S_{t,s}(x) = \eta'(t)T_{t,s}(x) = -\frac{\eta'(t)}{s} \frac{g'(u)}{g(u)}.$$

Dále platí

$$\begin{aligned} U_t(x; t, s) &= \frac{\partial}{\partial t} \log f_{t,s}(x) = \frac{1}{f_{t,s}(x)} \frac{\partial}{\partial t} f_{t,s}(x) \\ &= \frac{1}{g(u)} \frac{dg(u)}{du} \frac{du}{dt} = -\frac{\eta'(t)}{s} \frac{g'(u)}{g(u)} \end{aligned}$$

(užili jsme (11) a (12)), takže konečně

$$S_{t,s}(x) = U_t(x; t, s). \quad (18)$$

(18) nám spolu s (17) a (8) říká, že pro určitou skupinu rozdělení se dostaneme k věrohodnostnímu skóru pro nejdůležitější parametr pouhým – trochu sofistikovaným – derivováním podle proměnné. Pro ostatní F je však S něčím, co ještě neznáme.

(III) Vezměme tedy nějaké obecné rozdělení, třeba rozdělení s nosičem $(0, \infty)$ a hustotou

$$f_B(x) = \frac{1}{B(p, q)} \frac{x^{p-1}}{(x+1)^{p+q}}, \quad (19)$$

kde $p > 0$ a $q > 0$ jsou prostě nějaké parametry. (19) je standardním tvarem hustoty rozdělení Pearsonova typu VI, zvaného též beta rozdělení druhého druhu nebo beta-prime ([8]), je to vlastně jen trochu jiný tvar Fisher-Snedecorova rozdělení (viz [9], str. 163). Najdeme pro ilustraci jeho prototyp; je to zcela obecný prototyp bez parametrů polohy a měřítka s hustotou

$$f_{R_{p,q}}(x) = \frac{1}{B(p,q)} \frac{e^{px}}{(e^x + 1)^{p+q}}. \quad (20)$$

Johnsonovu skórovou funkci rozdělení najdeme pomocí algoritmu popsaného Definicí 1. Z (8) určíme core funkci $T_B(x) = (qx - p)/(x + 1)$, vyřešíme rovnici (16) čímž určíme těžiště $x_B^* = p/q$ a protože $\eta'(x) = (\log x)' = 1/x$, je

$$S_B(x) = \frac{q}{p} \frac{qx - p}{x + 1}. \quad (21)$$

Stejný postup jako v předešlém případě nás dovedl k nové funkci charakterizující rozdělení, která není věrohodnostním skórem žádného z parametrů. Lze ji chápat jako vlivovou funkci těžiště a ekvivalent skórových funkcí prototypů.

5 Charakteristiky rozdělení

Definujeme těžiště a Johnsonovu disperzi rozdělení podobně jako v [7]:

a/ Těžiště x_F^* rozdělení F jako bod, ve kterém

$$S(x_F^*) = 0. \quad (22)$$

Protože $\eta'(x) > 0$, má rovnice (22) řešení identické s řešením (16).

b/ Číslo

$$ES^2 = \int_a^b S^2(x)f(x)dx \quad (23)$$

je analogií Fisherovy informace rozdělení F . Její převrácenou hodnotu

$$\omega_F^2 = (ES^2)^{-1}$$

nazveme Johnsonovou disperzí a budeme ji považovat za míru rozptýlenosti hodnot rozdělení kolem x_F^* .

Příklad. Rozdělení beta-prime s hustotou (19) má střední hodnotou

$$\tau_B = \frac{p}{q-1}, \quad q > 1 \quad (24)$$

a rozptyl

$$\sigma_B^2 = \frac{p(p+q+1)}{(q-1)^2(q-2)}, \quad q > 2. \quad (25)$$

Obě charakteristiky jsou konečné pouze v omezeném rozsahu parametru q a prakticky k ničemu: můžeme je odhadovat jen když je předem přibližně

známe. Johnsonovo těžiště rozdělení beta-prime jsme už našli, je to $x_B^* = p/q$. Vypočteme (23) a dostaneme Johnsonovu disperzi

$$\omega_B^2 = \frac{p(p+q+1)}{q^3}. \quad (26)$$

Jak je patrné, Johnsonovy charakteristiky rozdělení beta-prime mají shodné čitatele s klasickými charakteristikami (24) a (25) a 'ukázněně' jmenovatele.

6 Charakteristiky datových souborů

Těžiště a Johnsonova disperze jsou charakteristiky rozdělení, které existují a mají i jiné vlastnosti, které stojí za studium (např. jsou robustní pro rozdělení s těžkými konci, viz kap. 6 v [7]). Jejich odhadů lze využít pro 'bezpracné' určení těžiště a Johnsonovy disperze datových souborů konstrukcí z maximálně věrohodných odhadů. Spočteme-li třeba maximálně věrohodné odhady \hat{p} a \hat{q} parametrů p a q datového souboru z beta-prime rozdělení, určíme těžiště a Johnsonovu disperzi souboru jako $\hat{x}^* = \hat{p}/\hat{q}$ a $\hat{\omega}^2 = \hat{p}(\hat{p} + \hat{q} + 1)/\hat{q}^3$.

7 Modifikovaná Raova vzdálenost

Mějme nezávislé náhodné veličiny X_1, \dots, X_n s rozdělením F_t s hustotou $f_t(x)$, kde t je Johnsonův parametr. Raovu vzdálenost (2) lze zapsat ve tvaru

$$D_R(\hat{t}, t_0) = (\omega_0)^2 \left| \sum_j [S_t(x_j; t_0) - S_t(x_j; \hat{t})] \right|^2 \quad (27)$$

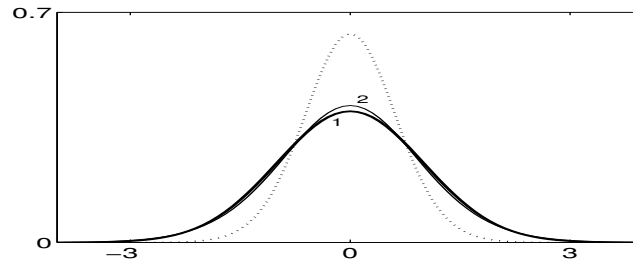
[$S_t = U_t$ podle (18), $1/\omega_0^2$ je Fisherova informace rozdělení F_{t_0} a druhý člen, který jsme do (27) přidali, je roven nule podle (1)].

Lehman [10] na str. 532 uvádí, že pro Cauchyho rozdělení silofunkce testu založeného na Raově vzdálenosti pro $\mu \rightarrow \infty$ klesá k nule. Z (27) je zřejmé proč: skórová funkce Cauchyho rozdělení není monotónní a některé členy $[S_\mu(x_j - \mu_0) - S_\mu(x_j - \hat{\mu})]$ jsou záporné. Podle [11] lze namísto (27) použít středněkvadratickou modifikovanou Raovu vzdálenost

$$\tilde{D}_R(\hat{t}, t_0) = (\omega_0)^2 \sum_j [S_t(x_j; t_0) - S_t(x_j; \hat{t})]^2, \quad (28)$$

která tento defekt nemá. Hůře se však počítá a vyžaduje znalost \hat{t} . V případě rozdělení s vektorovým θ se ovšem situace výrazně změní ve prospěch modifikované verze, protože zatímco (27) je vyjádřena maticí zmíněnou v úvodu, zůstává (28) táž, pouze místo t_0 a \hat{t} obsahuje vektory θ_0 a $\hat{\theta}$.

Příklad. Najdeme symetrické rozdělení (20), které má jednotkovou Johnsonovu disperzi. Řešením rovnice (26) pro $\omega_B = 1$ a $p = q$ dostaneme $p = 1 + \sqrt{(2)} \doteq 2.414$. Hustota $f_B(x) = f_{R_{1+\sqrt{2}, 1+\sqrt{2}}}(x)$ je velmi podobná hustotě f_N standardního normálního rozdělení (obr. 1), pro které $\omega_N = \sigma = 1$.



Obrázek 1: Hustoty standardního normálního rozdělení (1: $\sigma_N = 1$) a prototypů rozdělení beta-prime (2: $\omega_B = 1$, tečkovaně: $\sigma_B = 1$).

'Integrální modifikovaná Raova vzdálenost' rozdělení $f_B(p = q)$ a f_N ,

$$\frac{\tilde{D}_R(f_B, f_N)}{\omega_0^2} = \int_0^\infty [S_B(x) - S_N(x)]^2 f_N(x) dx = \int_0^\infty \left[p \frac{x-1}{x+1} - x \right]^2 f_N(x) dx,$$

je minimální pro $p = 2.382$, což je velice pěkná shoda. Pro srovnání je na obr.1 tečkovaně vyznačena hustota rozdělení beta-prime pro $p = q$, pro které je $\sigma_B = 1$. Podobné výsledky lze odvodit i pro jiná rozdělení; domnívám se, že je to právě ω_F^2 , která by mohla charakterizovat rozptýlenost pravděpodobnostních rozdělení podobně jako klasický rozptyl rozptýlenost normálního rozdělení.

Reference

- [1] Johnson N.L. (1949). *Systems of frequency curves generated by methods of translations*. Biometrika **36**, 149–176.
- [2] Pardo L. (2005). *Statistical inference based on divergence measures*. Chapman and Hall.
- [3] Hampel F.R., Rousseeuw P.J., Ronchetti E.M., Stahel W.A. (1986). *Robust statistic. The approach based on influence functions*. Wiley.
- [4] Fabián Z. (1997). *Geometrické momenty*. Robust'96, 49–62.
- [5] Fabián Z. (2001). *MM-odhady*. Robust'2000, 33–41.
- [6] Fabián Z. (2002). *Informace ve výběru z rozdělení*. Robust'2002, 95–106.
- [7] Fabián Z. (2004). *Nové charakteristiky rozdělení a výběrů z rozdělení*. Robust'2004, 459–466.
- [8] Johnson N.L., Kotz S., Balakrishnan N. (1994, 95). *Continuous univariate distributions 1, 2*. Wiley.
- [9] Kendall M., Stuart A. (1977). *The advanced theory of statistics 1*. Griffin.
- [10] Lehman E.L. (1998). *Elements of large sample theory*. Springer.
- [11] Fabián Z., Vajda I. (2003). *Core functions and core divergences of regular distributions*. Kybernetika **39**, 29–42.

Poděkování: Práce byla podporována grantem AV ČR IAA1075403.

Adresa: Z. Fabián, Ústav informatiky AV ČR, Pod Vodárenskou věží 2, 182 07 Praha 8

E-mail: zdenek@cs.cas.cz

TESTY HYPOTÉZ O PARAMETRU OBECNÉHO EXPONENCIÁLNÍHO MODELU

Lucie Fajfrová

Klíčová slova: Stochastické procesy, Rényiho vzdálenosti, exponenciální model.

Abstrakt: Příspěvek se věnuje problému testování hypotéz o parametru v rodinách stochastických procesů, které lze popsat hustotou exponenciálního typu vzhledem k nějaké referenční míře. Zaměříme se na testové statistiky odvozené z informačních vzdáleností nazývaných Rényiho. Cílem příspěvku je především ilustrovat problematiku na příkladech známých procesů.

1 Definice a motivace

Klasické výsledky o exponenciálních rodinách pravděpodobnostních rozdělení můžeme nalézt v řadě monografií, jmenujme například [1], [2]. Tyto knihy se věnují standardnímu statistickému parametrickému modelu s nezávislými pozorováními pocházejícími z rozdělení tzv. exponenciálního typu. Poznamenejme, že mezi tato rozdělení patří například normální, lognormální, gamma, beta, Weibullovo či Maxwelllovo, z diskrétních pak jmenujme Poissonovo, negativně binomické či multinomické. Podle definice: rodina $\{P_\theta : \theta \in \Theta\}$ pravděpodobnostních rozdělení na $\{\mathfrak{X}, \mathcal{A}\}$ lišících se v parametru θ z nějaké otevřené $\Theta \subseteq \mathbb{R}^k$ se nazývá *exponenciální rodina*, jestliže existuje σ -konečná míra μ , vůči níž je každá P_θ absolutně spojitá s hustotou $f_\theta = \frac{dP_\theta}{d\mu}$ mající tvar

$$f_{\theta,t}(x) = \exp\{\theta^T T(x) - C(\theta)\} \quad \forall x \in \mathfrak{X}.$$

Přirozeným rozšířením takového modelu jsou exponenciální rodiny stochastických procesů majících nezávislé stacionární přírůstky. Stochastický proces $(X_t : t \in \mathbb{R}^+)$ s nezávislými a stacionárními přírůstky, jehož trajektorie jsou zprava spojitě a mají konečné limity zleva (dále jen *càdlàg* trajektorie), nazýváme *Lévyho proces*. Lévyho procesy jsou ze statistického pohledu důkladně studovány v knize [4]. Sami autoři v souvislosti s Lévyho procesy hovoří o *přirozených exponenciálních rodinách procesů*, nazývejme je v dalším tedy také tak.

Definition 1.1. *Buď $\Theta \subseteq \mathbb{R}^k$ otevřená. Rodina pravděpodobnostních měr na kanonickém filtrovaném prostoru $(\mathfrak{X}, \mathcal{A}, (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0})$ (tzn. \mathfrak{X} je množina *càdlàg* funkcí $\varphi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$) se nazývá přirozená exponenciální rodina procesů, jestliže existuje σ -konečná míra μ na $\{\mathfrak{X}, \mathcal{A}\}$ taková, že pro každé $\theta \in \Theta$*

$$P_\theta \upharpoonright_{\mathcal{F}_t} \ll \mu \upharpoonright_{\mathcal{F}_t} \quad \forall t \geq 0$$

a hustota $f_\theta = \frac{dP_{\theta,t}}{d\mu_t}$ má při označení $P_{\theta,t} = P_\theta \upharpoonright_{\mathcal{F}_t}$, $\mu_t = \mu \upharpoonright_{\mathcal{F}_t}$ tvar

$$f_{\theta,t}(\mathbb{X}_t) = \exp\{\theta^T T(X_t) - t\kappa(\theta)\} \quad \forall t > 0, \quad (1)$$

kde $\mathbb{X}_t \in \mathfrak{X}_t = \mathfrak{X} \upharpoonright_{\mathcal{F}_t}$ značí trajektorii do času t , na rozdíl od X_t označujícího hodnotu trajektorie přímo v čase t . $T = (T_1, \dots, T_k)$ jsou zobrazení z \mathbb{R} do \mathbb{R} .

Z následujících příkladů uvidíme, že typ exponenciální rodiny procesů určuje především funkce κ z (1). Vzhledem k tomu, že

$$\kappa(\theta) = \frac{1}{t} \ln \mathbb{E}_\theta \exp\{\theta^T T(X_t)\}, \quad (2)$$

kde \mathbb{E}_θ symbolizuje střední hodnotu vzhledem k míře P_θ , budeme tuto funkci κ nazývat *kumulantová funkce*.

Typickým příkladem přirozené exponenciální rodiny je jednak rodina Wienerových procesů s driftem $\theta \in \mathbb{R}$, zastupující procesy se spojitými trajektoriemi, a jednak rodina Poissonových procesů s intenzitou $\lambda > 0$, která zastupuje skokové procesy. První jmenovanou rodinu zkonstruujeme následovně. Uvažujme jako referenční míru μ rozdělení obyčejného Wienerova procesu $(W_t)_{t \geq 0}$ a definujme rodinu $\{P_\theta : \theta \in \mathbb{R}\}$ pomocí hustot (1), kde za kumulantovou funkci uvažujeme $\kappa(\theta) = \frac{\theta^2}{2}$ a $T(X_t) = X_t$. Pomocí Laplaceovy transformace lze ukázat, že potom pro každé $\theta \in \mathbb{R}$ je P_θ rozdělní procesu $X_t = \theta t + W_t, t \geq 0$. Referenční míra je tedy přímo P_0 .

Podobně můžeme postupovat u rodiny Poissonových procesů. Uvažujme nejprve změnu parametru λ , odpovídajícího intenzitě, na parametr $\theta = \ln \lambda$ probíhající všechna reálná čísla. Jako referenční zvolíme rozdělení Poissonova procesu s intenzitou $\lambda = 1$. Opět definujme rodinu $\{P_\theta : \theta \in \mathbb{R}\}$ pomocí hustot (1), kde tentokrát za kumulantovou funkci zvolíme $\kappa(\theta) = e^\theta - 1$, $T(X_t) = X_t$. Lze ukázat, že potom pro každé $\theta \in \mathbb{R}$ je P_θ rozdělní Poissonova procesu s intenzitou $\lambda = e^\theta$.

Majíce data pocházející z přirozené exponenciální rodiny procesů do nějakého času $t > 0$, můžeme testovat hypotézy o parametru θ . Klasickým nástrojem je maximálně věrohodný odhad parametru θ odvozený v [4]. Citujme zde stručně tento důležitý výsledek:

Mějme přirozenou exponenciální rodinu dle definice 1.1. Je-li $\text{dom } \kappa \subseteq \mathbb{R}$ otevřená, pak maximálně věrohodný odhad (MLE) $\hat{\theta}_t$ parametru θ založený na pozorování do času t existuje a je dán předpisem $\hat{\theta}_t = \hat{\kappa}^{-1} \left(\frac{T(X_t)}{t} \right)$ právě tehdy, když $\frac{T(X_t)}{t} \in \text{int}(\bar{c}(\text{supp } T(X_t)))$. Zde $\hat{\kappa}^{-1}$ značí inverzi k derivaci kumulantové funkce. Navíc pak při P_θ

$$\hat{\theta} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \theta \quad \text{s.j.} \quad \& \quad \sqrt{t}(\hat{\theta} - \theta) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} N(0, (\ddot{\kappa}(\theta))^{-1}) \quad \text{v distribuci} \quad (3)$$

a testová statistika podílem věrohodností $Q_t = \frac{L_t(\theta_0)}{\sup_{\theta \in \Theta} L_t(\theta)}$ pro test jednoduché hypotézy $H : \theta = \theta_0$ má následující asymptotické rozdělení při P_{θ_0}

$$-2 \ln Q_t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \chi_k^2 \quad \text{v distribuci,} \quad (4)$$

kde χ_k^2 značí náhodnou veličinu s χ^2 rozdělením s k stupni volnosti a $L_t(\theta) = \exp\{\theta^T T(X_t) - t\kappa(\theta)\}$ je věrohodnostní funkce.

Pro statistiku zobecněným podílem věrohodností $Q_t^* = \frac{L_t(\theta_t^*)}{\sup_{\theta \in \Theta} L_t(\theta)}$ pro test složené hypotézy $H : h(\theta) = 0$ platí $-2 \ln Q_t^* \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \chi_{k-m}^2$ v distribuci, při P_θ , pro všechna $\theta : h(\theta) = 0$. Zde θ_t^* je zúžený maximálně věrohodný odhad, maximalizující $L_t(\theta)$ přes množinu $\{\theta : h(\theta) = 0\}$ a funkce $h : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^m$, pro nějaké $1 \leq m < k$, je dvakrát diferencovatelná a h má plnou hodnot.

Obecnější přístup k problému testování hypotéz zvolili autoři článků [5], [6]. K testování použili statistiky odvozené z různých informačních vzdáleností. Jako nejzajímavější se ukázaly tzv. Rényiho vzdálenosti. Pro rodinu $\{P_\theta : \theta \in \Theta\}$ pravděpodobnostních rozdělení procesů s dominující mírou μ a pro konstantu $a \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\}$ je Rényiho vzdálenost $D_{a,t}$ mezi rozděleními $P_{\theta_1,t}$ a $P_{\theta_0,t}$ do času t daná vztahem

$$D_{a,t}(\theta_1, \theta_0) = \frac{1}{a(a-1)} \ln \int_{\mathcal{X}_t} \left(\frac{dP_{\theta_1,t}}{d\mu_t} \right)^a \left(\frac{dP_{\theta_0,t}}{d\mu_t} \right)^{1-a} d\mu. \quad (5)$$

Rényiho vzdálenost pro $a = 1$ je speciální případ nazývaný *Kullbackova vzdálenost*:

$$K_t(\theta_1, \theta_0) = D_{1,t}(\theta_1, \theta_0) = \int_{\mathcal{X}_t} \frac{dP_{\theta_1,t}}{d\mu_t} \ln \frac{dP_{\theta_1,t}/d\mu_t}{dP_{\theta_0,t}/d\mu_t} d\mu$$

a pro $a = 0$ jde o inverzní Kullbackovu vzdálenost $D_{0,t}(\theta_1, \theta_0) = K_t(\theta_0, \theta_1)$.

Článek [6] se věnuje užití Rényiho vzdáleností pro statistiku právě přirozených exponenciálních rodin procesů, viz definice 1.1. Ukázalo se totiž, že Rényiho vzdálenosti D_a mají v těchto modelech jednoduchý tvar, platí

$$\begin{aligned} D_{1,t}(\theta_1, \theta_0) &= t \left(\dot{\kappa}(\theta_1) (\theta_1 - \theta_0) + \kappa(\theta_0) - \kappa(\theta_1) \right) \\ D_{a,t}(\theta_1, \theta_0) &= \frac{t}{a(a-1)} \left(\kappa(\theta_a) - a\kappa(\theta_1) - (1-a)\kappa(\theta_0) \right), \end{aligned}$$

kde $\theta_a = a\theta_1 + (1-a)\theta_0$. Vztahy snadno ověříme dosazením (1) do předpisů pro $D_{a,t}$. Pro testování jednoduché hypotézy $H : \theta = \theta_0$ lze užít testovou statistiku $2D_{a,t}(\hat{\theta}_t, \theta_0)$ odvozenou z Rényiho vzdálenosti mezi rozděleními s hypotetickým parametrem θ_0 a maximálně věrohodným odhadem $\hat{\theta}_t$ parametru z pozorování do času t . Věta 2 v [6] pak říká, že v přirozených exponenciálních modelech má pro každé $a \in \mathbb{R}$ tato testová statistika asymptoticky χ^2 rozdělení s k stupni volnosti, tedy při P_{θ_0}

$$2D_{a,t}(\hat{\theta}_t, \theta_0) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \chi_k^2 \quad \text{v distribuci.} \quad (6)$$

Poznamenejme, že testová statistika $2D_{1,t}(\hat{\theta}_t, \theta_0)$ odvozená od Kullbackovy vzdálenosti odpovídá statistice $-2 \ln Q_t$ odvozené z podílu věrohodností, viz (4). Zmiňme také, že výsledek (6) lze opět zobecnit – užitím zúženého maximálně věrohodného odhadu – také pro složenou hypotézu $H : h(\theta) = 0$. Pak

$$T_{a,t} = 2D_{a,t}(\hat{\theta}_t, \theta_t^*) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \chi_{k-m}^2 \quad \text{v distribuci, při } P_\theta, \forall \theta : h(\theta) = 0, \quad (7)$$

kde h a θ_t^* jsou jak v předchozím. Lze nalézt v [7].

Význam použití Rényiho statistik je mimo jiné v tom, že můžeme na základě nějaké optimalizace vycházející z výpočtu přesné síly a hladiny testů pro jednotlivé řády a vybrat statistiku pro daný model nejhodnější.

Účelem tohoto příspěvku je jednak přiblížit použití Rényiho statistik na konkrétním příkladě přirozené exponenciální rodiny procesů (sekce 2) a jednak pokusit se rozšířit tuto metodu testování na širší třídu exponenciálních rodin procesů, zahrnující mnohem více než jen Lévyho procesy (sekce 3).

2 Přirozené exponenciální modely

V této části se soustředíme na konkrétní příklad přirozené exponenciální rodiny. Uvažujme dvourozměrný náhodný proces (X_t, Y_t) se spojitým časem, kde $X_t = \exp(\zeta t + W_t)$ je geometrický Brownův pohyb a Y_t na něm nezávislý Poissonův proces s intenzitou $\lambda = e^\eta$. Jak vypadá hustota rodiny Poissonových procesů jsme již zmínili dříve a tvar hustoty rodiny geometrického Brownova pohybu vyplývá z faktu, že proces X_t je Itôův difúzní proces, konkrétně řešení rovnice $dX_t = (\zeta + \frac{1}{2})X_t dt + X_t dW_t$, $X_0 = 1$, a pro takové je tvar hustoty znám, viz [3]. Tedy

$$f_{(\zeta, \eta), t} = \exp\left(\zeta \ln(X_t) + \eta Y_t - t\left(\frac{\zeta^2}{2} + e^\eta - 1\right)\right)$$

je hustota rozdělení procesu (X_t^ζ, Y_t^η) vzhledem k referenční míře $P_{0,t} \times Q_{0,t}$, což je rozdělení procesu (X_t^0, Y_t^0) . Testovat bychom chtěli hypotézu, že drift ζ je roven intenzitě λ , tj. $H : \zeta - e^\eta = 0$.

Ze zmíněných výsledků pro přirozené rodiny vyplývá, že odhad metodou maximální věrohodnosti má být ve tvaru

$$(\hat{\zeta}, \hat{\eta}) = \left(\frac{\ln(X_t)}{t}, \ln\left(\frac{Y_t}{t}\right)\right).$$

Jde ovšem pouze o tzv. asymptoticky maximálně věrohodný odhad, neboť podle klasické teorie o exponenciálních rodinách MLE parametru v Poissonově procesu neexistuje z důvodu, že $Q_{\eta,t}(Y_t = 0) > 0$. Nicméně tato pravděpodobnost jde do 0, když $t \rightarrow \infty$.

Rényiho statistika řádu a má tvar

$$T_{a,t} = t(e^{\eta_t^*} - \hat{\zeta}_t)^2 + \frac{2t}{a(a-1)} \left[\exp(\eta_t^* + a(\hat{\eta}_t - \eta_t^*)) - ae^{\hat{\eta}_t} - (1-a)e^{\eta_t^*} \right]$$

pro $a \neq 1, 0$, kde $\eta_t^* = \operatorname{argmax}\{\zeta \ln(X_t) + \eta Y_t - t(\frac{\zeta^2}{2} + e^\eta - 1) : \zeta = e^\eta\}$, a

$$T_{1,t} = t(e^{\eta_t^*} - \hat{\zeta}_t)^2 + 2t[e^{\hat{\eta}_t}(\hat{\eta}_t - \eta_t^* - 1) + e^{\eta_t^*}].$$

Z výsledků článku [7] shrnutých v (7) plyne, že asymptotické rozdělení těchto statistik je χ_1^2 .

Majíce data do nějakého času t z této rodiny, uvažujme test hypotézy H s asymptotickou hladinou α_0 . Pro rozhodnutí o platnosti hypotézy pak použijeme tu testovou statistiku $T_{a,t}$, pro níž srovnání přesných hladin testu $\alpha = \alpha(\alpha_0, \theta_0, a) = P_{\theta_0,t}(T_{a,t} > \chi_1^2(1-\alpha_0))$ a přesných sil testu $\beta = \beta(\alpha_0, \theta_1, a)$

$= P_{\theta_1, t}(T_{a, t} > \chi_1^2(1 - \alpha_0))$ vyjde lépe v následujícím smyslu. Nejprve zvolíme konečnou množinu A všech řadů, pro něž chci toto srovnání provést. Vhodným způsobem také zvolíme konečnou množinu parametrů θ_0 zastupujících hypotézu a množinu parametrů θ_1 zastupujících alternativu. Pokud nelze přímo vypočítat α a β pro tyto hodnoty, lze použít simulaci. V tomto případě bylo použito 5 hodnot parametru z hypotézy, v okolí každé 8 hodnot z alternativy, a pro každé $\theta = (\zeta, \eta)$ z této množiny bylo nasimulováno 10^4 realizací n.v. $Z_{50} \sim N(0, 50)$ a n.v. $Y_{50} \sim Po(50e^\eta)$, z nichž se určila hladina α , respektive síla β , pro $t = 50$. Metodou 'relative inefficiency', která je popsána v [5], vyšla porovnáním těchto hodnot jako nejlepší Rényiho statistika řádu $a = 0.5$.

3 Zakřivené exponenciální modely

Definition 3.1. *Bud' $\Theta \subseteq \mathbb{R}^k$ otevřená. Rodina pravděpodobnostích měr na kanonickém filtrovaném prostoru $(\mathfrak{X}, \mathcal{A}, (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0})$ se nazývá obecná exponenciální rodina procesů, jestliže hustota $f_\theta = \frac{dP_{\theta, t}}{dP_{0, t}}$ má (při stejném značení jako v definici 1.1) tvar:*

$$f_{\theta, t} = \exp\{\theta^T A_t - \kappa(\theta) S_t\} \quad \forall t > 0, \quad (8)$$

kde $\kappa : \Theta \rightarrow \mathbb{R}$ je nějaká funkce pouze parametru, $A_t = (A_t^{(1)}, \dots, A_t^{(k)})$ jsou \mathcal{F}_t -adaptované stochastické procesy s càdlàg trajektoriemi a S_t je neklesající stochastický proces takový, že $S_0 = 0$ a $\lim_{t \rightarrow \infty} S_t = +\infty$ s.j. $(P_\theta) \forall \theta \in \Theta$.

Rodiny procesů z definice 3.1 jsou speciálním případem tzv. *zakřivených exponenciálních rodin*. Je-li však S_t nenáhodné, dostáváme se zpět k přirozeným rodinám procesů. Proto budeme-li chtít zdůraznit, že jde o rodinu takto nedegenerovanou, tedy že S_t je náhodné, budeme hovořit o rodině *zakřivené*.

Ač na první pohled by se mohl zdát rozdíl mezi definicemi 1.1 a 3.1 malý, o opaku svědčí jednak množství procesů, které nám druhou definicí přibyly, a jednak řada nových problémů, které je nyní potřeba řešit.

Mezi obecné exponenciální rodiny procesů patří například všechny Itôovy difusní procesy, jestliže příslušná stochastická diferenciální rovnice

$$dX_t^\theta = a_t(X_t^\theta)dt + \theta b_t(X_t^\theta)dt + c_t(X_t^\theta)dW_t$$

má pro danou počáteční podmínku jediné (silné) řešení $(X_t^\theta : t \geq 0)$ pro každé $\theta \in \Theta$. Odvození přesného tvaru exponenciální hustoty pro Itôovy difusní procesy může čtenář nalézt v [3].

Příklad 3.1. *Ornstein-Uhlenbeckův proces je řešením rovnice*

$$dX_t = \theta X_t dt + dW_t.$$

Uvažujme-li počáteční podmínku $X_0 = 0$, potom explicitní vyjádření procesu je $X_t = \int_0^t e^{\theta(t-s)} dW_s$. Jde o exponenciální rodinu danou souborem hustot:

$$\frac{dP_{\theta, t}}{dP_{0, t}} = \exp\left\{\frac{\theta}{2}(X_t^2 - t) - \frac{\theta^2}{2} \int_0^t X_s^2 ds\right\}$$

pro každé $t > 0$, kde P_0 je rozdělení Wienerova procesu.

Další velikou skupinou procesů, které jsou pokryty definicí 3.1, jsou čítací (skokové) procesy. Tím míníme zprava spojitý proces N_t , který nabývá celých čísel a jehož na čase závislá intenzita λ_t má tvar $\lambda_t = \lambda H_t$, kde H_t je do času t adaptovaný pozitivní proces s konečnou střední hodnotou pro každé $t > 0$. Intenzitou myslíme intenzitu ve smyslu Markovského procesu se stavy v \mathbb{Z} , který se v jednom kroku může změnit pouze o jedničku. Označíme-li $\theta = \ln \lambda$, rodina procesů N_t je zadaná hustotou

$$\frac{dP_{\theta,t}}{dP_{0,t}} = \exp\{\theta(N_t - N_0) - (e^\theta - 1) \int_0^t H_s ds\},$$

kde P_0 je rozdělení daného čítacího procesu s parametrem 0, tj. s intenzitou $\lambda = 1$. Speciálním degenerovaným případem je jistě Poissonův proces s $H_t \equiv 1$. Dalším speciálním případem, tentokrát již zakřivené exponenciální rodiny, je *jednoduchý proces zrodu*, kde $H_t = N_{t-}$. Budeme se tímto procesem zabývat detailně později.

Vraťme se nyní k tomu, o které vlastnosti z přirozených exponenciálních rodin jsme přišli a které nám zůstaly zachovány. Uvědomme si nejprve, že mnoho vlastností v přirozených rodinách plynulo z faktu, že kumulantovou funkci bylo možné vyjádřit vztahem (2), což v zakřivených rodinách možné není. Jedním ze způsobů, jak s těmito rodinami dále pracovat, je nahlédnout, že vhodnou náhodnou časovou transformací lze obecnou exponenciální rodinu převést na přirozenou. Jen stručně uveďme, že jde o transformaci definovanou časem zastavení $\tau_u = \inf\{t : S_t > u\}$ a pokud definujeme filtraci $(\mathcal{F}_{\tau_u})_{u \geq 0}$ σ -algeber do času zastavení τ_u , pak lze ukázat, že

$$\frac{dP_{\theta,\tau_u}}{dP_{0,\tau_u}} = \exp\{\theta^T A_{\tau_u} - \kappa(\theta)u\},$$

kde $P_{\theta,\tau_u} = P_\theta \lfloor_{\mathcal{F}_{\tau_u}}$. Pro více detailů odkážme čtenáře do [4], kde je také jako důsledek této transformace odvozen následující výsledek pro maximálně věrohodný odhad parametru θ v obecném exponenciálním modelu. Citujme:

Věta 3.1. (Theorem 5.2.1-2 v [4]) *Buď κ v (8) taková, že $\text{dom } \kappa$ je otevřená podmnožina \mathbb{R}^k , a nechť $S_t > 0 \forall t > 0$ P_θ -s.j. $\forall \theta \in \Theta$, kde Θ je otevřená. Pak*

• *MLE $\hat{\theta}_t$ založený na pozorování do času t existuje a je dán jednoznačně vztahem $\hat{\theta}_t = \dot{\kappa}^{-1} \left(\frac{A_t}{S_t} \right)$ právě tehdy, když $\frac{A_t}{S_t} \in \text{int}(\text{co}(\text{supp } A_{\tau_1}))$,*

• *$\hat{\theta} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \theta$ s.j. (P_θ) pro všechny $\theta \in \Theta$,*

• *jestli existuje pro každé $\theta \in \Theta$ rostoucí, kladná nenáhodná funkce $\varphi_\theta(t)$, že*

$$\frac{S_t}{\varphi_\theta(t)} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} Y_\theta \quad \text{v pravděpodobnosti, při } P_\theta,$$

a že $P_\theta(Y_\theta > 0) > 0$, kde Y_θ je nějaká n.v. s rozdělením F_θ , potom při P_θ

$$\left(\sqrt{S_t}(\hat{\theta} - \theta), \frac{S_t}{\varphi_\theta(t)} \right) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} N(0, (\dot{\kappa}(\theta))^{-1}) \times F_\theta \quad \& \quad -2 \ln Q_t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \chi_k^2$$

v distribuci, za podmínky $\{Y_\theta > 0\}$, kde Q_t je jako v (4).

Nějaký analogický výsledek v obecných exponenciálních modelech výsledkům (6) a (7) v přirozených modelech pro testování pomocí Rényiho statistik

zatím k dispozici není. Problém je v nalezení vhodného tvaru Rényiho vzdáleností (5), které pro obecný exponenciální model (8) mají mít tvar:

$$D_{1,t}(\theta_1, \theta_0) = \int_{\mathfrak{X}_t} \left(A_t(\theta_1 - \theta_0) - S_t(\kappa(\theta_1) - \kappa(\theta_0)) \right) dP_{\theta_1,t} \quad (9)$$

$$\text{a pro } a \neq 1, 0: \quad D_{a,t}(\theta_1, \theta_0) = \quad (10)$$

$$\frac{1}{a(a-1)} \ln \int_{\mathfrak{X}_t} \exp \left\{ A_t \left(a\theta_1 + (1-a)\theta_0 \right) - S_t \left(a\kappa(\theta_1) + (1-a)\kappa(\theta_0) \right) \right\} dP_{0,t}.$$

Věnujme se ve zbytku tomuto problému v konkrétním příkladě zakřivené exponenciální rodiny, a to rodiny jednoduchých procesů zrodu.

Příklad 3.2. *Bud' $(X_t)_{t \geq 0}$ jednoduchý proces zrodu a necht' $X_0 = 1$. To znamená, že $X_t \in \{1, 2, \dots\}$ značí velikost populace v čase t , jestliže v čase 0 populace čítala jediného jedince, který má dát po exponenciálním čase se střední hodnotou $1/\lambda$ život novému jedinci. Přičemž každý jedinec této populace se bude chovat stejně a jejich chování bude navzájem nezávislé. Při parametrizaci $\theta = \ln \lambda \in \mathbb{R}$ je rodina jednoduchých procesů zrodu zakřivenou exponenciální rodinou s hustotami do času t :*

$$f_{\theta,t} = \exp \left\{ \theta(X_t - 1) - (e^\theta - 1) \int_0^t X_s ds \right\}$$

vzhledem k referenční míře $P_{0,t}$, rozdělení procesu zrodu s intenzitou $\lambda = 1$.

Odvoďme tvar Rényiho vzdáleností speciálně pro proces zrodu. Zafixujme $t > 0$. Začneme se snadnější Kullbackovou vzdáleností, která (dle (9)) má tvar $D_{1,t}(\theta, \theta_0) = (\mathbb{E}_\theta X_t - 1)(\theta - \theta_0) - \mathbb{E}_\theta \int_0^t X_s ds (e^\theta - e^{\theta_0})$. Vidíme, že stačí znát $\mathbb{E}_\theta X_t \forall t > 0$, tedy střední počet jedinců v čase t v populaci s intenzitou zrodu $\lambda = e^\theta$. Lze odvodit, že $\mathbb{E}_\theta X_t = \exp\{te^\theta\}$ a tedy

$$D_{1,t}(\theta, \theta_0) = (\exp\{te^\theta\} - 1)(e^{\theta_0 - \theta} + \theta - \theta_0 - 1). \quad (11)$$

Rényiho vzdálenost pro $a \neq 1, 0$ má podle (10) mít tvar $D_{a,t}(\theta, \theta_0) =$

$$\frac{1}{a(a-1)} \ln \mathbb{E}_{a\theta + (1-a)\theta_0} \exp \left\{ - \int_0^t X_s ds \left(ae^\theta + (1-a)e^{\theta_0} - e^{a\theta + (1-a)\theta_0} \right) \right\}.$$

Označíme-li si

$$\nu = \nu(a, \theta, \theta_0) = ae^\theta + (1-a)e^{\theta_0} - e^{a\theta + (1-a)\theta_0},$$

potom potřebujeme znát $\mathbb{E}_{\theta_a} \exp \left\{ -\nu \int_0^t X_s ds \right\}$, kde $\theta_a = a\theta + (1-a)\theta_0$. Lze odvodit, že tato střední hodnota je konečná pro všechna $t > 0$ právě tehdy, když $\nu \geq 0$, a potom

$$\mathbb{E}_{\theta_a} \exp \left\{ -\nu \int_0^t X_s ds \right\} = \frac{e^{\theta_a} + \nu}{e^{\theta_a} + \nu \exp\{t(e^{\theta_a} + \nu)\}}.$$

Vzhledem k tomu, že $\nu \geq 0$ právě tehdy, když $a \in [0, 1]$, má dále smysl zabývat se pouze Rényiho vzdálenostmi pro $a \in [0, 1]$. Pro $a \in (0, 1)$ pak:

$$D_{a,t}(\theta, \theta_0) = \frac{1}{a(1-a)} \ln \left(1 + \nu(a, \theta, \theta_0) \frac{\exp\{t(ae^\theta + (1-a)e^{\theta_0})\} - 1}{ae^\theta + (1-a)e^{\theta_0}} \right). \quad (12)$$

Lemma 3.1. Rényiho statistiky $T_{a,t} = 2D_{a,t}(\hat{\theta}_t, \theta_0)$ odvozené z (11) a (12) mají pro každé $a \in [0, 1]$ Fisher-Snedecorovo $F(1, 2)$ rozdělení, tj. vzhledem k rozdělení P_{θ_0} procesu zrodu

$$T_{a,t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} F(1, 2) \quad \text{v distribuci.}$$

Důkaz. Metodou Taylorova rozvoje pro funkci $f(\theta) := D_{a,t}(\theta, \theta_0)$ v bodě θ_0 zjistíme, že $D_{a,t}(\theta, \theta_0) = \frac{1}{2}\psi_{a,t}(\theta)(\theta - \theta_0)^2$, kde $\psi_{a,t}(\cdot)$ jsou spojitě funkce takové, že $\psi_{a,t}(\theta_0) = \exp\{te^{\theta_0}\} - 1$ pro každé $a \in [0, 1], t > 0$. A vzhledem k tomu, že proces $S_t = \int_0^t X_s ds$, kde X_s je proces zrodu s intenzitou $\lambda = e^\theta$, se při $t \rightarrow \infty$ chová následovně (lze zjistit z Laplaceovy transformace):

$$\lambda e^{-t\lambda} S_t = e^\theta \exp\{-te^\theta\} S_t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \chi_2^2 \quad \text{s.j.}(P_\theta), \text{ pro všechna } \theta,$$

použitím věty 3.1 obdržíme: $2D_{a,t}(\hat{\theta}_t, \theta_0) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} F(1, 2)$ v distribuci při P_{θ_0} . \square

Závěrem tedy můžeme říct, že Rényiho statistiky, pokud je umíme spočítat, půjdou alespoň pro hodnoty řádu a z intervalu $[0, 1]$ použít i v zakřivených exponenciálních modelech pro testy hypotéz, s toutéž výhodou jako v přirozených exponenciálních modelech.

Reference

- [1] Barndorff-Nielsen O.E. (1978). *Information and exponential families*. J.Wiley, Gluchester.
- [2] Brown L.D. (1986). *Fundamentals of statistical exponential families of stochastic processes*. Lectures Notes **9**. Inst. of Math. Statistics, Hayward, California.
- [3] Liptser R.Sh., Shiryaev A.N. (1989). *Statistika slučajnych procesov*. Springer, New York.
- [4] Küchler U., Sørensen M. (1997). *Exponential families of stochastic processes*. Springer, Berlin.
- [5] Morales D., Pardo L., Vajda I. (1997). *Some new statistics for testing hypothesis in parametric models*. Journal of Multivariate Analysis **62**, 137–168.
- [6] Morales D., Pardo L., Vajda I. (1999). *Rényi stistics in directed families of exponential experiments*. Statistics **34**, 151–174.
- [7] Morales D., Pardo L., Pardo M.C., Vajda I. (2004). *Rényi stistics for testing composite hypothesis in general exponential models*. Statistics **38**, No.2, 133–147.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GA ČR 201/06/1323 a výzkumným centrem MŠMT ČR 1M0572.

Adresa: L. Fajfrová, ÚTIA AV ČR, Pod Vodárenskou věží 4, 182 08 Praha 8
E-mail: fajfrova@utia.cas.cz

POROVNÁNÍ NEPARAMETRICKÝCH BAYESOVSKÝCH ODHADŮ PŘI CENZOROVÁNÍ

Michal Friesl

Klíčová slova: Náhodné cenzorování, Koziolův-Greenův model, neparametrické bayesovské odhady, gama proces, bayesovské riziko, Channing House Data.

Abstrakt: Příspěvek se zabývá odhadem funkce přežití v Koziolově-Greenově modelu náhodného cenzorování. Porovnán je neparametrický bayesovský odhad využívající předpoklady modelu s obecným odhadem pro cenzorovaná data. Jako apriorní rozdělení kumulativní rizikové funkce se předpokládá gama proces.

1 Úvod

Uvažujeme dobu do výskytu určité události (dobu do poruchy, dobu života, apod.) představovanou nezápornou náhodnou veličinou X s funkcí přežití

$$S(t) = P(X > t) = \exp(-\Lambda(t)), \quad t > 0,$$

$\Lambda(t) = -\ln S(t)$ je kumulativní riziková funkce. Veličina X může být cenzorována zprava, tj. pozorování je ukončeno nejpozději v okamžiku Y , kde Y je náhodná veličina nezávislá na X (náhodné cenzorování). Ve skutečnosti tak známe jen čas ukončení experimentu a identifikátor, zda byla pozorována hodnota X (nebo zda jde o pozorování cenzorované),

$$Z = \min(X, Y), \quad I = I_{[X \leq Y]}. \quad (1)$$

V Koziolově-Greenově modelu se navíc předpokládá, že mezi funkcemi přežití cenzoru Y a sledované veličiny X je vztah

$$S_Y(t) = (S(t))^\gamma, \quad t > 0, \quad \text{pro nějaké } \gamma > 0, \quad (2)$$

neboli, vyjádřeno pomocí kumulativních rizikových funkcí, platí $\Lambda_Y(t) = \gamma\Lambda(t)$, $t > 0$. Cenzorování se tak stává informativní a oproti obecnému modelu se nabízí možnost zlepšení odhadů.

Na minulém Robustu [5] jsme odvozovali neparametrický bayesovský odhad v Koziolově-Greenově modelu. V tomto příspěvku tvar odhadu zobecníme na případ shod v pozorováních, doplníme ilustrací na datech z literatury a zmíníme také bayesovská rizika. Zároveň budeme sledovat odhad v obecném modelu nepředpokládajícím (2).

2 Model

V rámci neparametrického bayesovského přístupu (viz např. [9]) považujeme neznámý (nekonečněrozměrný) parametr $S = (S(t), t > 0)$ za náhodnou veličinu (náhodný proces). Apriorní rozdělení pro S volíme z třídy zprava neutrálních procesů [2], nebo ekvivalentně kumulativní rizikovou funkci $\Lambda = (\Lambda(t), t > 0)$ jako neklesající proces s nezávislými přírůstky. Konkrétně volíme gama proces, jehož přírůstky mají gama rozdělení se společným parametrem měřítka

$$\Lambda(0) = 0, \quad \Lambda(s, t) = \Lambda(t) - \Lambda(s) \sim G(n_0, n_0\Lambda_0(s, t)), \quad 0 \leq s \leq t,$$

kde $n_0 > 0$ a Λ_0 je libovolná kumulativní riziková funkce. Připomeňme, že Λ_0 a n_0 charakterizují střed a koncentrovanost apriorního rozdělení,

$$E \Lambda(s, t) = \Lambda_0(s, t), \quad \text{var } \Lambda(s, t) = \Lambda_0(s, t)/n_0,$$

a že trajektorie Λ jsou s pravděpodobností 1 schodovité i v případě spojitě kumulativní rizikové funkce Λ_0 , na který se odteď omezme. Dále předpokládáme, že parametr γ má apriorní hustotu

$$\pi(\gamma), \quad \gamma > 0, \quad \text{vzhledem k nějaké míře } \mu \text{ na } (0, \infty)$$

a je nezávislý s gama procesem Λ .

Jako pozorování máme k dispozici náhodný výběr $(Z_1, I_1), \dots, (Z_n, I_n)$ z rozdělení (1). Nechť mezi časy Z_1, \dots, Z_n je $N \leq n$ navzájem různých hodnot (připouštíme možnost shod v pozorováních), jež značíme

$$T_1 < \dots < T_N \tag{3}$$

a dodefinujeme $T_0 = 0, T_{N+1} = \infty$. Posloupnost (3) dělí časovou polopřímku na intervaly, “ i ”-tým intervalem rozumějme interval $\langle T_{i-1}, T_i \rangle, i = 1, \dots, N + 1$. V souvislosti s j -tým časem T_j budeme dále značit

$$U_j = \sum_{k; Z_k = T_j} I_k, \quad \text{resp.} \quad C_j = \sum_{k; Z_k = T_j} (1 - I_k), \quad j = 1, \dots, N,$$

$$N_k = \#\{k; Z_k > T_j\}, \quad j = 0, \dots, N,$$

tj. počet necenzorovaných, resp. cenzorovaných pozorování s časy Z_k rovnými T_j a počet pozorování po čase T_j .

3 Odhady

Počítáme s kvadratickou ztrátovou funkcí, odhady tedy hledáme jako aposteriorní střední hodnoty. Jak známo z [4], v obecném případě cenzorování vychází pro t v i -tém intervalu $\langle T_{i-1}, T_i \rangle$ odhad

$$\widehat{S}_{\text{obec}}(t) = \prod_{j < i} \left[\left(\frac{M_{j-1}^0}{M_{j-1}^1} \right)^{n_0 \Lambda_0(T_{j-1}, T_j)} \frac{c_j^1}{c_j^0} \right] \cdot \left(\frac{M_{i-1}^0}{M_{i-1}^1} \right)^{n_0 \Lambda_0(T_{i-1}, t)},$$

kde

$$M_j^m = n_0 + N_j + m, \quad c_j^m = \sum_{k=1}^{U_j} (-1)^k \binom{U_j}{k} \ln \left(\frac{M_j^m}{M_j^m + k} \right), \quad m = 0, 1.$$

V hranaté závorce první výraz vytváří přírůstek přes interval (T_{j-1}, T_j) , druhý výraz skok v okamžiku T_j . Nebylo-li v čase T_j žádné necenzorované pozorování ($U_j = 0$), definujeme podíl $c_j^1/c_j^0 = 1$.

Odhad \hat{S}_{obec} však nepočítá se závislostí (2) mezi S a S_Y , v Koziolově-Greenově modelu lze tedy nalézt odhad lepší. Zavedme ještě potřebné označení, pro $m = 0, 1$ definujeme

$$\begin{aligned} M_j^m(\gamma) &= n_0 + N_j(1 + \gamma) + m, \quad j = 0, \dots, N, \quad \text{a} \\ c_j^m(\gamma) &= \sum_{k=0}^{U_j} \sum_{\ell=0}^{C_j} (-1)^{k+\ell} \binom{U_j}{k} \binom{C_j}{\ell} \ln \left(\frac{M_j^m(\gamma) + C_j}{M_j^m(\gamma) + C_j + k + \ell\gamma} \right), \quad (4) \\ q_j^m(\gamma) &= (M_{j-1}^m(\gamma))^{-n_0\Lambda_0(T_{j-1}, T_j)} c_j^m(\gamma), \quad j = 1, \dots, N, \end{aligned}$$

přičemž píšeme $M_j(\gamma) = M_j^0(\gamma)$, $c_j(\gamma) = c_j^0(\gamma)$ a $q_j(\gamma) = q_j^0(\gamma)$.

Tvrzení 3.1. *Apsteriorním rozdělením Λ je při daném γ proces s nezávislými přírůstky, přičemž v časech pozorování (3) má skoky. Přírůstky Λ mezi časy pozorování mají (při daném γ) gama rozdělení, pro $(s, t) \subset (T_{j-1}, T_j)$ je*

$$(\Lambda(s, t) \mid \text{data}, \gamma) \sim \text{G}(M_{j-1}(\gamma), n_0\Lambda_0(s, t)).$$

Velikost skoku v T_j má hustotu

$$x^{-1} e^{-(M_j(\gamma) + C_j)x} (1 - e^{-x})^{U_j} (1 - e^{-\gamma x})^{C_j} / c_j(\gamma), \quad x > 0, \quad (5)$$

Marginální apsteriorní rozdělení γ má hustotu

$$\pi(\gamma \mid \text{data}) \propto \left(\prod_{j=1}^N q_j(\gamma) \right) \pi(\gamma), \quad \gamma > 0, \quad \text{vzhledem k } \mu. \quad (6)$$

Důkaz. Apsteriorní rozdělení rozeznáme v momentové vytvořující funkci přírůstků Λ podobně jako v případě bez shod mezi pozorováními v [5]. \square

Poznámka. *Rozdělení skoků v časech pozorování nezávisí na konkrétních hodnotách časů, je dáno pouze počty a druhy pozorování. V porovnání s [5] se v případě, že je s daným časem svázáno více pozorování, mohou v hustotě skoku vyskytnout oba výrazy $1 - e^{-x}$ a $1 - e^{-\gamma x}$ najednou, navíc i v mocnině.*

Při počítání bayesovského odhadu funkce přežití S využijeme podmíněné nezávislosti přírůstků procesu Λ v apsteriorním rozdělení. Pro s z i -tého intervalu tak dostaneme podmíněnou střední hodnotu veličiny

$$S(s) = \exp(-\Lambda(s)) = \left(\prod_{j < i} e^{\Lambda(T_j -) - \Lambda(T_{j-1})} e^{\Lambda(T_j) - \Lambda(T_j -)} \right) e^{\Lambda(s) - \Lambda(T_{i-1})}$$

při daném γ jako součin středních hodnot jednotlivých činitelů. Po zvážení pravou stranou (6) vychází

$$A(s) = \int \left(\prod_{j < i} q_j^1 \right) \left(\prod_{j \geq i} q_j(\gamma) \right) \left(\frac{M_{i-1}(\gamma)}{M_{i-1}^1(\gamma)} \right)^{n_0 \Lambda_0(T_{i-1}, s)} \pi(\gamma) d\mu(\gamma).$$

Tvrzení 3.2. *Bayesovský odhad funkce přežití $S(t)$ při kvadratické ztrátové funkci je*

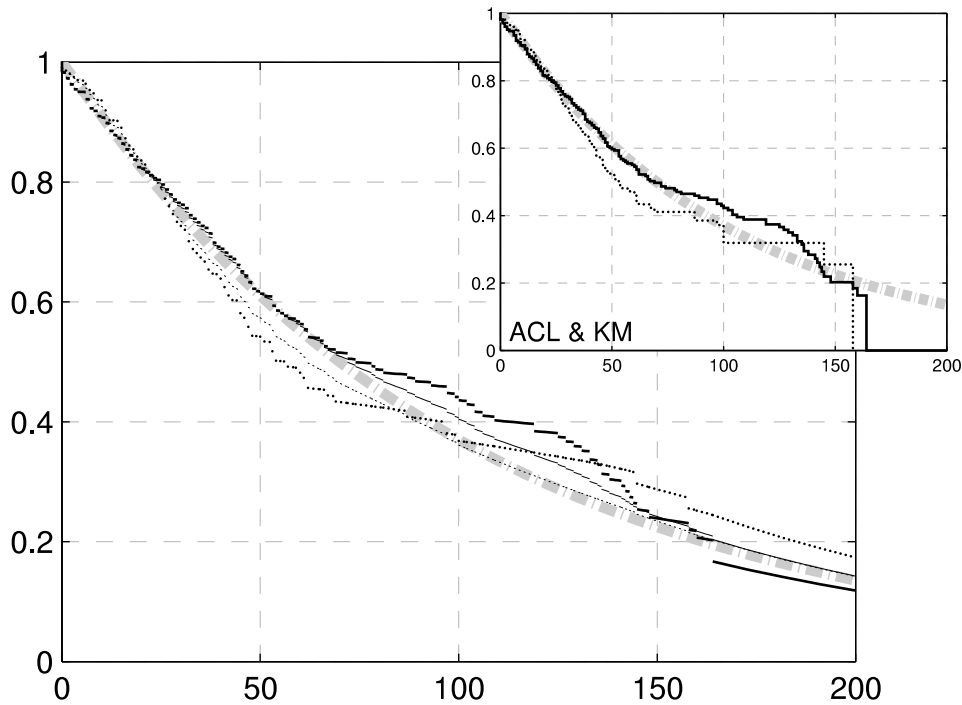
$$\widehat{S}_{\text{KG}}(t) = A(t)/A(0).$$

Důkaz. Aposteriorní střední hodnotu dostaneme, když $A(t)$ podělíme normalizující konstantou hustoty (6), kterou lze zapsat jako $A(0)$. \square

Až na integraci vzhledem ke γ máme explicitní vyjádření odhadu. V případě, že uvažujeme hodnoty γ pouze z konečné množiny, odpadá i tato integrace. Zatímco odhad $\widehat{S}_{\text{obec}}$ má skoky pouze v časech T_j s alespoň jedním necenzorovaným pozorováním a v ostatních časech T_j mění skokově jen derivaci, odhad \widehat{S}_{KG} má skoky ve všech.

Ilustrujme chování odhadů $\widehat{S}_{\text{obec}}$ a \widehat{S}_{KG} na dvou příkladech dat z literatury, pro porovnání doplněné o Abdushukurovův-Chengův-Linův (ACL) neparametrický odhad funkce přežití v Koziolově-Greenově modelu a standardní Kaplanův-Meierův (KM) odhad pro zprava cenzorovaná data. Jako apriorní rozdělení parametru γ vždy volíme rovnoměrné rozdělení na množině devíti hodnot γ odpovídajících pravděpodobnostem $(1 + \gamma)^{-1} = 0,1; 0,2; \dots; 0,9$. V případě spojitých rozdělení, což ovšem není náš případ, by šlo o pravděpodobnosti, že pozorování bude necenzorované, $P(I = 1)$. Vyzkoušeny byly i jiné volby, ale ukazuje se, že pokud rozdělení nesoustředíme na extrémně úzkou množinu hodnot, má jeho volba na výsledky jen malý vliv, parametr γ lze z dat spolehlivě odhadnout.

Příklad 3.1. *Doby života po ošetření u pacientů s rakovinou prostaty ve V.A.C.U.R.G., převzatá z [6]. Data obsahují 211 pozorování, z nich 90 je necenzorovaných, minimum je 0 a maximum 164 měsíců. Mezi časy pozorování je 97 různých hodnot, z nich 53 se opakuje, např. 8 z nich čtyřikrát a 8 dalších více než čtyřikrát. Jde o verzi dat, na nichž Koziol a Green [8] právě za předpokladu (2) demonstrovali shodu s exponenciálním rozdělením se střední hodnotou 100 měsíců (předpokládaným jako rozdělení doby života bez ošetření). Jiné testy však shodu zamítají; předpoklad proporcionality není zaručen.*



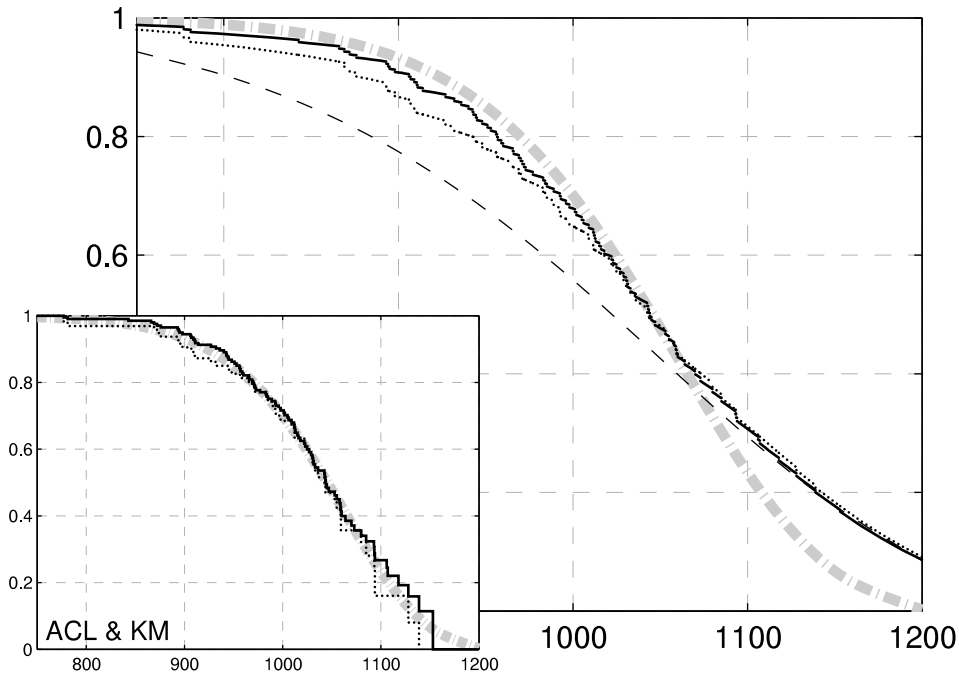
Obrázek 1: Odhady z příkladu 3.1 — V.A.C.U.R.G. Plnou čarou \hat{S}_{KG} , tečkovaně \hat{S}_{obec} při $n_0 = 10$ (silně) a $n_0 = 100$ (slabě). Čerchovaně $\exp(-\Lambda_0)$.

Jako apriorní střední kumulativní rizikovou funkci Λ_0 volíme zmíněné exponenciální rozdělení. Na obrázku 1 jsou odhady \hat{S}_{KG} a \hat{S}_{obec} , když apriorní informaci je dána váha $n_0 = 10$ (jsou blízké ACL a KM odhadům), resp. $n_0 = 100$. Funkce $\exp(-\Lambda_0)$ je zobrazena silnou šedou čerchovanou křivkou.

Příklad 3.2. Délky života mužů zaznamenané v důchodcovské komunitě Channing House, jak je uvádí [7]. Useknutí zleva ignorujeme, podle [1] tato data odpovídají Koziolovu-Greenovu modelu. Jde o 97 pozorování, z nich 46 je necenzorovaných. Minimum je 775 a maximum 1153 měsíců. Data obsahují 83 různých časů, z nich 10 se vyskytuje dvakrát a 2 třikrát.

Jako referenční uvažujeme rizikovou funkci Weibullova rozdělení $\Lambda_0(t) = (t/\theta)^b$, $t > 0$, s parametry $\theta = 1071$ a $b = 15,9$ získanými transformací kvantilových odhadů příslušného Weibullova rozdělení minim Z . V obrázcích jí odpovídá silná šedá čerchovaná křivka. Na obr. 2 jsou odhady funkce přežití S , když $n_0 = 50$ a jako parametr tvaru bylo místo b zvoleno $b/2$. Zatímco zpočátku odhady “kopírují data”, na konci sledují apriorní rozdělení. Na obr. 3 můžeme dále sledovat, jak odhady závisí na parametrech (když volíme θ a $2b$), resp. na n_0 (při parametrech $0,9\theta$ a $b/2$, když $n_0 = 50$ a $n_0 = 10$).

Poznámka. Konstanty $c_j(\gamma)$ mohou být v případě časů T_j s větším počtem pozorování řádově mnohem menší než sčítanci, jejichž součtem v (4) jsou. Např. pro $M_j(\gamma) = 150$, $\gamma = 1/9$, $C_j = 4$ a $U_j = 1$, resp. 2 je $c_j(\gamma)$ řádu 10^{-14} , resp. 10^{-15} , zatímco sčítanec s $k = U_j$ a $\ell = C_j$ má velikost 10^{-3} , resp. 10^{-2} . Je proto vhodné sledovat počet platných čísel, s nimiž počítáme.



Obrázek 2: Odhady z příkladu 3.2 — Channing House Data. Čárkovaně použítá $\exp(-\Lambda_0)$ s parametry $(\theta, b/2)$, plnou čarou odhad \hat{S}_{KG} , tečkovaně \hat{S}_{obec} .

4 Bayesovská rizika

Podívejme se nyní, oč je v Koziolově-Greenově modelu bayesovský odhad \hat{S}_{KG} lepší než jednodušší (ale za předpokladů modelu nikoli optimální) obecný odhad \hat{S}_{obec} . Kritériem pro porovnání je samozřejmě bayesovské riziko (BR), v našem případě s kvadratickou ztrátovou funkcí. Vzhledem k $\hat{S}_{\text{KG}}(t) = E(S(t) | \text{data})$ můžeme psát

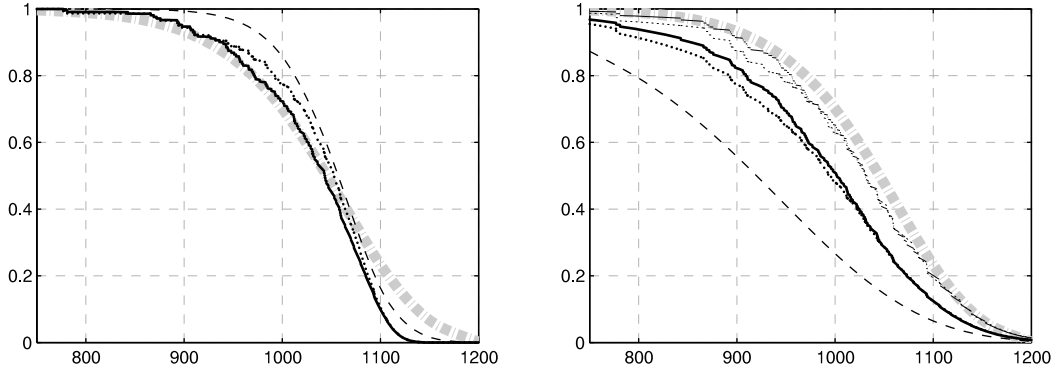
$$\text{BR } \hat{S}_{\text{KG}}(t) = E(\hat{S}_{\text{KG}}(t) - S(t))^2 = E \text{ var}(S(t) | \text{data}), \quad (7)$$

$$\text{BR } \hat{S}_{\text{obec}}(t) = E(\hat{S}_{\text{obec}}(t) - S(t))^2 = \text{BR } \hat{S}_{\text{KG}}(t) + E(\hat{S}_{\text{KG}}(t) - \hat{S}_{\text{obec}}(t))^2.$$

Protože rizika neumíme jednoduše vyjádřit, popišme, jak je získat simulacemi. Řekněme, že budeme simulovat výběr z rozdělení veličiny sledované a cenzorující $(X_i, Y_i)_{i=1}^n$, jehož funkcí odhady \hat{S}_{KG} a \hat{S}_{obec} jsou.

Přímým postupem je nejprve generovat γ a S dle apriorního rozdělení a pak X_i, Y_i jako náhodný výběr z nagenерованého S , resp. S^γ . Realizace procesu S jsou sice funkcemi přežití diskretních rozdělení (proces S neměl nenáhodnou složku), mají však nekonečně skoků v každém intervalu (což je dáno zvoleným rozdělením přírůstků). Museli bychom se tak spokojit s aproximacemi procesu S . Např. diskretizovat čas, nebo generovat největší skoky Λ (inverzní Lévyova míra), nebo jiné aproximace.

Pokud si však dobře všimneme tvaru prediktivních rozdělení, zjistíme, že potřebné veličiny lze simulovat přesně. Např. pro $* = (X_1, Y_1, \dots, X_i, Y_i)$ je



Obrázek 3: Odhady z příkladu 3.2 — Channing House Data. Čárkovaně použitá $\exp(-\Lambda_0)$, vlevo s parametry $(\theta, 2b)$, vpravo $(0,9\theta, b/2)$. Plnou čarou odhad \widehat{S}_{KG} , tečkovaně $\widehat{S}_{\text{obec}}$ (vpravo pro $n_0 = 50$ tlustě, $n_0 = 10$ tenče).

$$P(X_{i+1} > x \mid \gamma, *) = E[P(X_{i+1} > x \mid \gamma, *, \Lambda) \mid \gamma, *] = E[\exp(-\Lambda(x)) \mid \gamma, *],$$

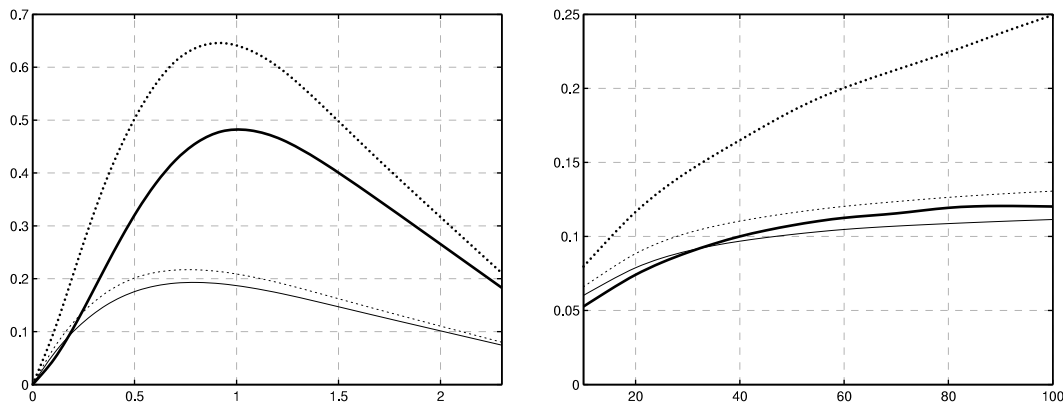
tj. rozdělení s funkcí přežití tvaru podobného \widehat{S}_{KG} . Nepotřebujeme-li tedy proces S samotný, můžeme místo náhodného výběru $(X_i, Y_i)_{i=1}^n$ z aproximovaného S generovat postupně a bez aproximací

$$\gamma, (X_1 \mid \gamma), (Y_1 \mid \gamma, X_1), (X_2 \mid \gamma, X_1, Y_1), (Y_2 \mid \gamma, X_1, Y_1, X_2), \dots$$

Případně lze dále dosimulovat i hodnoty $(S(t) \mid \gamma, X_1, Y_1, \dots, X_n, Y_n)$ ve vybraných časech t . Přírůstky Λ mezi časy pozorování totiž mají gama rozdělení a skok v čase T_j hustotu $f(x)$ tvaru jako (5), lze ho generovat zamítací metodou z $xf(x)/(1 - e^{-x})$.

Poznámka. Při simulaci v (7) asi využijeme možnosti vyjádřit aposteriorní rozptyl — tvar $E(S^2(t) \mid \text{data})$ odvodíme podobně jako první moment.

Příklad 4.1. Simulacemi jsme získali bayesovská rizika při $n_0 = 10$ a $\Lambda_0(t) = t$ (exponenciální rozdělení) a pro γ s diskrétním rozdělením na $1/p - 1$, $p = 0,1; 0,2; \dots; 0,9$. Generovali jsme rozsahy výběrů $n = 10, 20, \dots, 100$ a zkoumali odhady $S(t)$ v časech t rovných 10 %-90 % kvantilům rozdělení $\text{Exp}(1)$. V obr. 4 jsou vyneseny průběhy n -násobků bayesovských rizik, $n \text{BR } \widehat{S}_{\text{KG}}(t)$ a $n \text{BR } \widehat{S}_{\text{obec}}(t)$, jednak jako funkce t při $n = 100$, jednak jako funkce n při $t = 0,223$ (20 % kvantil), když γ bylo voleno rovnoměrně z prvních tří, resp. posledních tří hodnot $1/p - 1$. Odhad \widehat{S}_{KG} je oproti $\widehat{S}_{\text{obec}}$ výrazně lepší především v prvním případě, kdy necenzorovaných pozorování je málo.



Obrázek 4: n -násobky bayesovských rizik odhadů $\widehat{S}_{\text{KG}}(t)$ (plně) a $\widehat{S}_{\text{obec}}(t)$ (tečkovaně) z příkladu 4.1. Vlevo pro $n = 100$ jako funkce t , vpravo pro $t \doteq 0,223$ jako funkce n . Necenzorovaných pozorování v průměru 20 % (tlustě) a 80 % (tence).

Reference

- [1] Csörgő S. (1988). *Estimation in the proportional hazards model of random censorship*. Statistics **19**, No. 3, 437–463.
- [2] Doksum K. (1974). *Tailfree and neutral random probabilities and their posterior distributions*. Ann. Probability **2**, 183–201.
- [3] Ferguson T.S. (1973). *A Bayesian analysis of some nonparametric problems*. Ann. Statist. **1**, 209–230.
- [4] Ferguson T.S., Phadia E.G. (1979). *Bayesian nonparametric estimation based on censored data*. Ann. Statist. **7**, No. 1, 163–186.
- [5] Friesl M. (2005) *Neparametrické bayesovské odhady v Koziolově-Greenově modelu náhodného cenzorování*. In ROBUST 2004 (Antoch J., Dohnal G., eds.), JČMF, Praha, pp. 93–100.
- [6] Hollander M., Proschan F. (1979). *Testing to determine the underlying distribution using randomly censored data*. Biometrics **35**, No. 2, 393–401.
- [7] Hyde J. (1977). *Testing survival under right censoring and left truncation*. Biometrika **64**, No. 2, 225–230.
- [8] Koziol J.A., Green S.B. (1976). *A Cramér-von Mises statistic for randomly censored data*. Biometrika **63**, No. 3, 465–474.
- [9] Walker S.G., Damien P., Laud P.W., Smith A.F.M. (1999). *Bayesian nonparametric inference for random distributions and related functions*. J. R. Stat. Soc. Ser. B Stat. Methodol. **61**, No. 3, 485–527.

Poděkování: Autor byl podporován z výzkumného záměru MSM 4977751301.

Adresa: M. Friesl, FAV ZČU, KMA, Univerzitní 22, 306 14 Plzeň

E-mail: friesl@kma.zcu.cz

FUNKCIONÁLNÍ HLAVNÍ KOMPONENTY PRO ODHADY RNH

Zdeněk Hlávka

Klíčová slova: Rizikově neutrální hustota, funkcionální hlavní komponenty.

Abstrakt: Odhady rizikově neutrální hustoty, založené na pozorovaných cenách opcí evropského typu, lze jednoduše rozšířit i pro nepozorované doby do splatnosti. Dále tyto odhady upravíme tak, aby na ně bylo možné jednoduše aplikovat metodu funkcionálních hlavních komponent. Časové řady koeficientů těchto funkcionálních hlavních komponent pak umožní vizualizaci změn tvaru rizikově neutrálních hustot v závislosti na čase.

1 Úvod

Majitel kupní opce evropského typu získá v čase T částku $(S_T - K)_+ = \max(S_T - K, 0)$, kde S_T označuje cenu příslušné akcie v čase T a K realizační cenu předem dohodnutou v čase $t < T$. V čase t lze spravedlivou cenu $C_t(K, T)$ této opce, tj. práva koupit danou akcii v čase T za cenu K , zapsat jako střední hodnotu zisku $(S_T - K)_+$ násobenou diskontním faktorem zohledňujícím známou bezrizikovou úrokovou míru r :

$$C_t(K, T) = \exp\{-r(T - t)\} \int_0^{+\infty} (S_T - K)_+ f(S_T) dS_T. \quad (1)$$

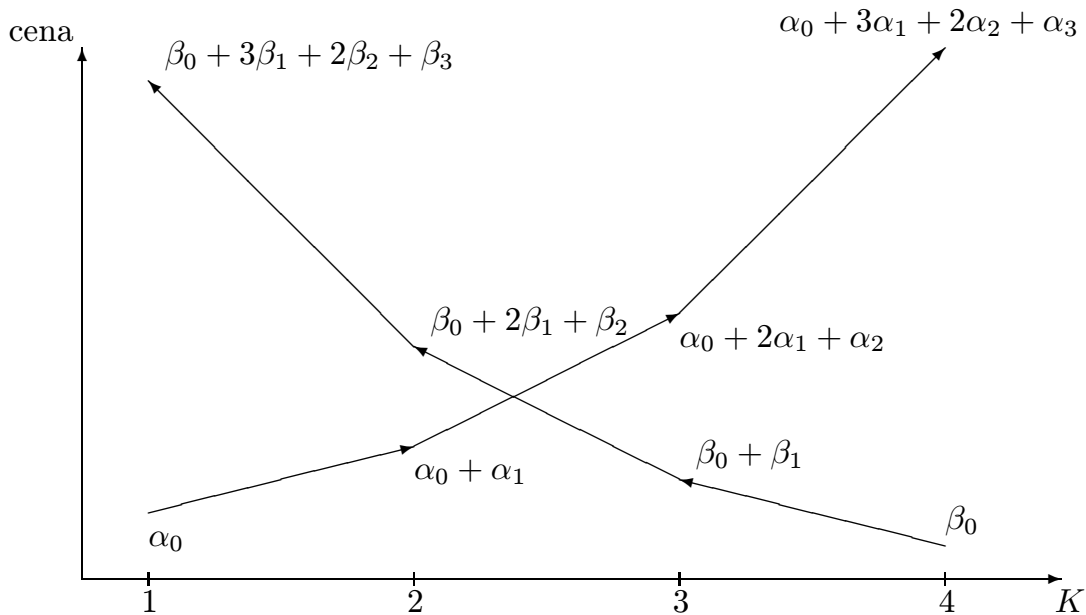
Pravděpodobnostní hustota $f(\bullet)$ splňující vztah (1) se nazývá rizikově neutrální hustota (RNH).

Dvojím zderivováním obou stran výrazu (1), v pevném čase t a pro pevnou dobu splatnosti T , lze RNH $f(\bullet)$ vyjádřit ve tvaru:

$$f(K) = \exp\{r(T - t)\} \frac{\partial^2 C_t(K, T)}{\partial K^2}, \quad (2)$$

tedy jako diskontovanou druhou derivaci ceny opcí vzhledem k realizační ceně, viz [4].

Vyjádření (2) se často s úspěchem používá k odhadům RNH pomocí neparametrických jádrových odhadů [1, 2, 3]. Jiný zajímavý přístup založený na metodě neparametrických nejmenších čtverců a umožňující splnění všech požadovaných podmínek je navržen v článku [8]. V následujícím odstavci stručně popíšeme neparametrický odhad navržený v práci [5]. Další parametrické i neparametrické metody jsou shrnuty v článku [6].



Obrázek 1: Příklad parametrizace cen kupních (β) a prodejních opcí (α).

2 Odhad RNH

Princip odhadu navrženého v práci [5] je znázorněn na obrázku 1, kde klesající křivka (parametry β) modeluje závislost ceny kupních opcí a rostoucí křivka (parametry α) závislost ceny prodejních opcí na realizační ceně K . Další parametry: čas t , doba splatnosti T i bezriziková úroková míra r jsou zde pevné a známé.

Parametr β_0 na obrázku 1 označuje průměrnou cenu kupní opce s realizační cenou $K = 4$. Parametr β_1 pak odhaduje rozdíl mezi cenami kupních opcí v bodech 4 a 3. Další regresní koeficient, β_2 , pak můžeme popsat jako změnu první derivace v bodě 3 a tedy jako odhad druhé derivace v tomto bodě. Parametr β_3 interpretujeme jako odhad druhé derivace funkce $C(K)$ v bodě 2. Podmínky na existenci RNH implikují, že všechny parametry, β_0, \dots, β_3 , musí být nezáporné a $\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 \leq 1$.

Parametry α_j , $j = 0, \dots, 3$, modelují stejným způsobem ceny prodejních opcí. Předpoklad shodných druhých derivací obou křivek můžeme jednoduše zapsat jako $\alpha_2 = \beta_3$ a $\alpha_3 = \beta_2$. Pro první derivace navíc dostáváme předpoklady $\alpha_1 = 1 - (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)$ a $\beta_1 = 1 - (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3)$. Využitím těchto vztahů můžeme model ještě jednou reparametrizovat tak, že parametry α_1 až α_3 nahradíme vhodnými lineárními kombinacemi parametrů β_1 až β_3 . Celý model pro ceny prodejních i kupních opcí lze tedy zapsat pouze pomocí pěti parametrů: β_0 , α_0 , β_1 , β_2 a β_3 .

Interpretace koeficientů nakreslených na obrázku 1 je poněkud zjednodušená díky předpokladu, že vzdálenost sousedních realizačních cen (bodů na horizontální ose) se rovná jedné. V praxi tento předpoklad není splněn a pro zachování interpretace parametrů β_j musíme použít matici experimentu

$$\Delta = \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \vdots \\ \Delta_{p-1} \\ \Delta_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \Delta_p^1 & \Delta_{p-1}^1 & \Delta_{p-2}^1 & \cdots & \Delta_3^1 & \Delta_2^1 \\ 1 & \Delta_p^2 & \Delta_{p-1}^2 & \Delta_{p-2}^2 & \cdots & \Delta_3^2 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \Delta_p^{p-2} & \Delta_{p-1}^{p-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & \Delta_p^{p-1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

kde Δ_j , $j = 1, \dots, p$, jsou řádky matice Δ a $\Delta_j^i = \max(k_j - k_i, 0)$ označuje kladnou část rozdílu mezi k_i a k_j , tj. i -tou a j -tou ($1 \leq i \leq j \leq p$) nejmenší pozorovanou hodnotou realizační ceny. Matice Δ ve vzorci (3) odpovídá pouze cenám kupních opcí, matice experimentu pro ceny prodejních opcí, koeficienty α , se konstruuje obdobně.

Vektor průměrných cen kupních opcí $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_p)^\top$ pro p různých pozorovaných realizačních cen opcí lze nyní zapsat ve tvaru:

$$\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_p \end{pmatrix} = \mu = \Delta \tilde{\beta} = \Delta \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{p-1} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Podmínky na existenci RNH mohou být nyní jednoduše vyjádřeny pomocí parametrů lineárního modelu (4).

Odhad RNH spočítáme jako odhad parametru $\tilde{\beta}$ metodou nejmenších čtverců za podmínek $\beta_i > 0$, $i = 0, \dots, p-1$ a $\sum_{j=1}^{p-1} \beta_j < 1$.

2.1 Heteroskedasticita a korelace

Zvolme opět pevný den t a pevnou dobu splatnosti T . Symbol \mathcal{C} necht' označuje vektor cen opcí pozorovaných v den t a $\mathcal{K} = (K_1, \dots, K_n)^\top$ vektor odpovídajících realizačních cen, ve kterém je každá různá realizační cena k_j pro $j = 1, \dots, p$ zopakována právě n_j -krát, $\sum_{j=1}^p n_j = n$. Symbolem \mathcal{X}_Δ pak označíme matici experimentu, jejíž i -tý ($i = 1, \dots, n$) řádek je Δ_j (j -tý řádek matice Δ , $j = 1, \dots, p$), kde j je zvoleno tak, aby $K_i = k_j$. Symbolem $\tilde{\beta} = (\beta_0, \dots, \beta_{p-1})^\top$ označíme vektor odhadovaných parametrů.

Pokud bychom předpokládali, že chyby $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)^\top$ v regresním modelu

$$\mathcal{C} = \mathcal{X}_\Delta \tilde{\beta} + \varepsilon, \quad (5)$$

jsou nezávislé a stejně rozdělené, pak můžeme model (5) pro i -té pozorování (odpovídající realizační ceně $k_j = K_i$) zapsat také jako $C_i(k_j) = \Delta_j \tilde{\beta} + \varepsilon_i$, nebo obecněji

$$\begin{aligned} C_i(k_j) &= \Delta_j \tilde{\beta}_i + \varepsilon_i, \\ \tilde{\beta}_i &= \tilde{\beta}_{i-1}, \end{aligned} \quad (6)$$

kde $\tilde{\beta}_i$ označuje hodnotu odhadovaného parametru v době, kdy došlo k i -tému obchodu. Zde se tedy odhadovaný parametr (RNH) v průběhu dne t nemění.

Předpokládejme dále, že pozorování jsou seřazená podle času transakce, označme jako $\delta_i > 0$ čas, který uplynul mezi $(i - 1)$ -ním a i -tým obchodem a uvažujme obecnější model

$$\begin{aligned} C_i(k_j) &= \Delta_j \tilde{\beta}_i, \\ \tilde{\beta}_i &= \tilde{\beta}_{i-1} + \delta_i^{1/2} \varepsilon_i, \end{aligned}$$

který umožňuje odvodit kovarianci libovolných dvou pozorovaných cen kupních opcí v závislosti na časech transakcí a realizačních cenách:

$$\begin{aligned} \text{Cov}\{C_{i-u}(k_j), C_{i-v}(k_l)\} &= \text{Cov}(\Delta_j \tilde{\beta}_{i-u}, \Delta_l \tilde{\beta}_{i-v}) \\ &= \sigma^2 \Delta_j \Delta_l^\top \sum_{m=1}^{\min(u,v)} \delta_{i+1-m}. \end{aligned}$$

Obdobně můžeme odvodit kovariance mezi cenami prodejních opcí a kovarianci mezi cenami kupních a prodejních opcí. Podrobnosti jsou uvedeny v [5].

2.2 Odhad pro libovolnou dobu do splatnosti

V práci [5] je na příkladě opcí na index německého akciového trhu DAX ukázáno, že rozptyl odhadovaných rizikově neutrálních funkcí klesá lineárně v závislosti na době $\tau = T - t$ zbývající do splatnosti opce. Abychom tedy dostali srovnatelné odhady RNH pro dva různé dny t_1 a t_2 , musíme zafixovat dobu do splatnosti $\tau_i = T - t_i$, $i = 1, 2$. Bohužel, v datech, která máme k dispozici, nelze T volit libovolně, protože doba splatnosti T je vždy omezena pouze na několik málo pevně stanovených dnů.

Odhad RNH $f_{t,\tau}(\bullet)$ pro nepozorovanou dobu do splatnosti $\tau > 0$ musíme tedy konstruovat jako lineární kombinaci odhadů rizikově neutrálních hustot odpovídajících dostupným dobám do splatnosti opce $\tau^L = T^L - t$ a $\tau^U = T^U - t$, $\tau^L < \tau < \tau^U$, následujícím způsobem:

$$f_{t,\tau}(\bullet) = \frac{(\tau^U - \tau)f_{t,\tau^L}(\bullet) + (\tau - \tau^L)f_{t,\tau^U}(\bullet)}{\tau^U - \tau^L}.$$

Platnost této aproximace je odvozena v práci [5]. Odhady $f_{t,\tau^L}(\bullet)$ a $f_{t,\tau^U}(\bullet)$ spočítáme způsobem popsaným v sekci 2 (pro dané t a $T = \{T^L, T^U\}$).

Pro další analýzu jsme zvolili dobu do splatnosti $\tau = 45$ a odhadli jsme RNH $f_{t,\tau}(\bullet) = f_{t,45}(\bullet) = f_t(\bullet)$ pro každý obchodní den od ledna 1995 až do března 2003 ($t = 1, \dots, N$).

3 Funkcionální hlavní komponenty

Na odhady rizikově neutrálních hustot $f_t(\bullet)$, $t = 1, \dots, N$, zkonstruované pro opce na index DAX od ledna 1995 do března 2003, nyní aplikujeme metodu funkcionálních hlavních komponent, popsanou například v práci [7]:

1. Od odhadů RNH $f_t(u)$, $t = 1, \dots, N$, odečteme průměrnou hustotu $\alpha(u)$ a dostaneme funkce rozdílů $x_t(u) = f_t(u) - \alpha(u)$.
2. Definujeme kovarianční funkci $v(s, u)$ jako

$$v(s, u) = N^{-1} \sum_{t=1}^N x_t(s)x_t(u).$$

3. Funkcionální hlavní komponenty jsou funkce $\xi_m(u)$, které řeší rovnici

$$\int v(s, u)\xi(u)du = \rho\xi(s).$$

V případě, že pozorované funkce jsou definovány svými hodnotami na stále stejné množině bodů u_1, \dots, u_m , lze jednoduše ukázat, že metoda funkcionálních hlavních komponent je ekvivalentní obyčejné metodě hlavních komponent použité na pozorované vektory funkčních hodnot $f_t(u_1), \dots, f_t(u_m)$, $t = 1, \dots, N$. Průměrná hustota, $\alpha(\bullet)$, je průměr pozorovaných vektorů $(\bar{f}(u_1), \dots, \bar{f}(u_m))^\top$ a varianční funkci odpovídá empirická varianční matice vektorů $(f_t(u_1), \dots, f_t(u_m))^\top$, $t = 1, \dots, N$.

3.1 Původní měřítko

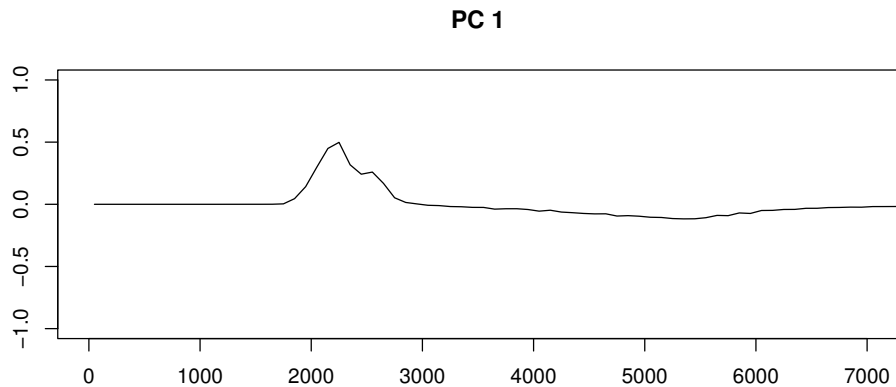
Praktické problémy při aplikaci metody funkcionálních hlavních komponent vznikají, pokud jsou analyzované funkce měřeny v měnicích se bodech nebo pokud některé funkční hodnoty chybí.

V našem případě jsou odhady spočítány pouze pro pozorované realizační ceny, které se každý den mohou měnit. Navíc se může stát, že pozorujeme pouze část RNH a integrál našeho odhadu tedy může být menší než 1. Naštěstí, díky konstrukci našich odhadů, lze odhadnuté RNH přepočítat na hrubší měřítko a navíc můžeme dopočítat i pravděpodobnosti odpovídající menším i větším, než pozorovaným realizačním cenám.

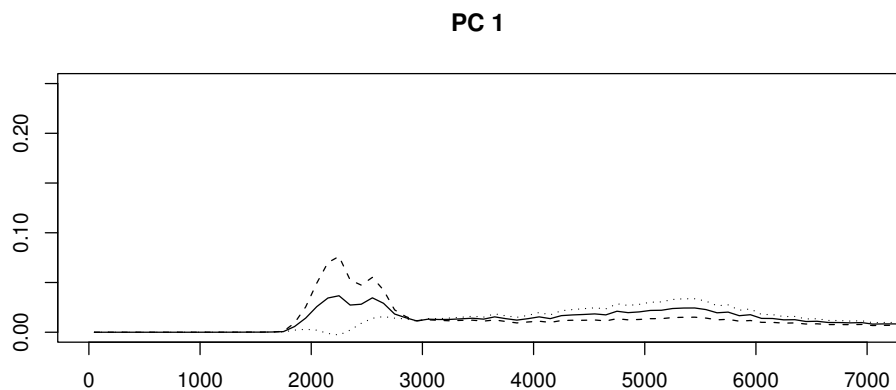
Například na obrázku 1 odhadují parametry β_3 a β_2 hodnoty RNH v bodech 2 a 3. Parametr $1 - \beta_1$ odhaduje hodnotu distribuční funkce mezi body 3 a 4. Díky tomu můžeme $\beta_1 = 1 - (1 - \beta_1)$ interpretovat jako odhad RNH v bodě 4. Podobně, hodnotu $1 - (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)$ můžeme interpretovat jako odhad RNH v bodě 1.

Z těchto odhadů RNH nyní můžeme zkonstruovat odpovídající kumulativní distribuční funkci. Pomocí lineární interpolace můžeme z této odhadnuté distribuční funkce spočítat odhady RNH v libovolných bodech. Pro následující analýzu jsme zvolili násobky 100 (v našich datech byly pozorované realizační ceny násobky 25).

První hlavní komponenta je zobrazená na obrázku 2. Pro interpretaci této hlavní komponenty je ale lepší podívat se na obrázek 3, na kterém je nakreslena funkce $\alpha(\bullet)$, ke které je první hlavní komponenta postupně přičtena (přerušovaná čára) a odečtena (tečkovaná čára). Z obrázku 3 je vidět,



Obrázek 2: První funkcionální hlavní komponenta pro odhady RNH na původním měřítku.



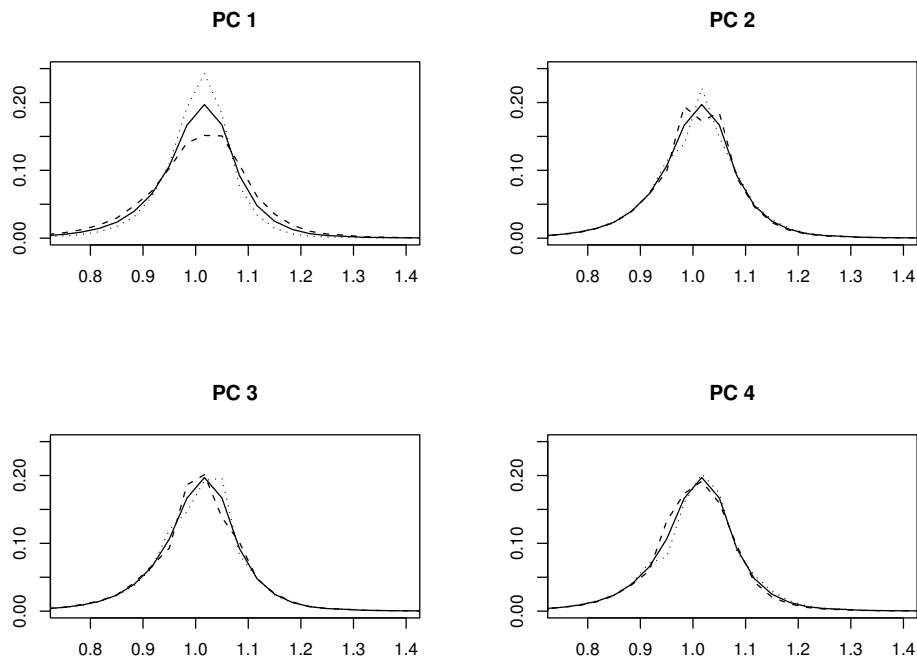
Obrázek 3: Průměrná rizikově neutrální hustota \pm první funkcionální hlavní komponenta na původním měřítku.

že první hlavní komponentu můžeme interpretovat jako kontrast mezi RNH s malým rozptylem a se střední hodnotou 2000–2500 a, na druhé straně, RNH s velkým rozptylem a se střední hodnotou 4000–6000.

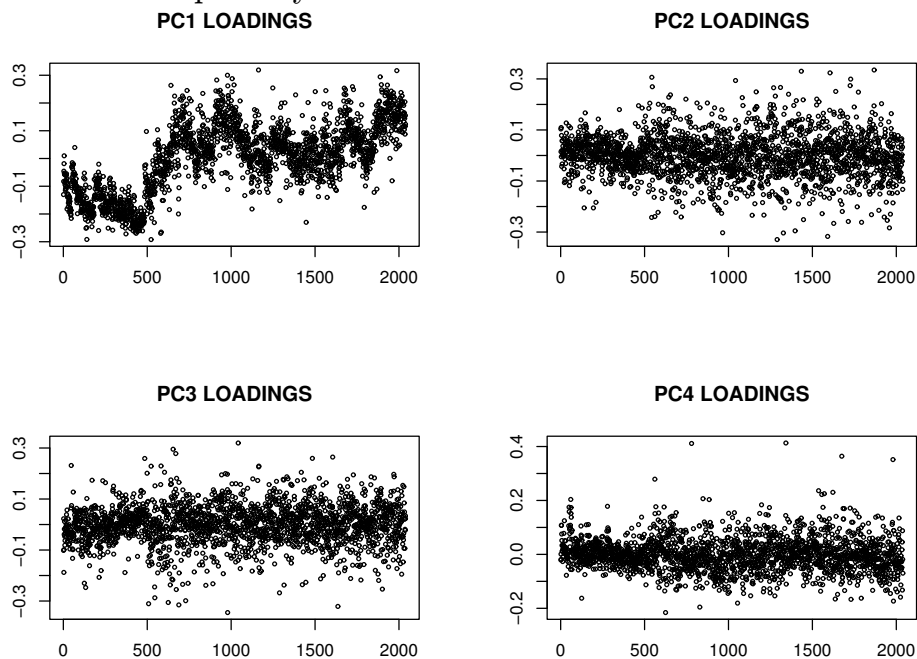
Tato i další hlavní komponenty počítané na tomto měřítku zřejmě pouze popisují pohyby způsobené změnou hodnoty akciového indexu. Proto bude výhodnější použití jiného měřítka.

3.2 Relativní měřítko

K odstranění závislosti odhadnutých hustot na hodnotě indexu DAX můžeme odhady RNH vyčíslit v bodech odpovídajících násobkům současné hodnoty DAXu. Interval od 0 do 4-násobku současné hodnoty jsme rovnoměrně rozděl-



Obrázek 4: Průměrná rizikově neutrální hustota \pm čtyři nejdůležitější funkcionální hlavní komponenty na relativním měřítku.



Obrázek 5: Koefficienty funkcionálních hlavních komponent pro odhady RNH spočítané na relativním měřítku.

lili na 120 částí. Každá „funkce“ tak byla určena 120 funkčními hodnotami.

První čtyři funkcionální hlavní komponenty jsou zobrazeny, vzhledem k průměrné funkci, na obrázku 4. První hlavní komponentu interpretujeme jako změnu rozptylu RNH. Ostatní hlavní komponenty odpovídají změnám tvaru RNH v blízkosti současné hodnoty akciového indexu (bodu 1).

Na obrázku 5 je znázorněn vývoj koeficientů prvních čtyř funkcionálních hlavních komponent v čase. Graf pro první hlavní komponentu ukazuje, kdy rozptyl RNH rostl a kdy klesal. K největší změně došlo v čase $t \approx 500$, to odpovídá internetovému boomu, který začal vznikat zhruba v roce 1997. V roce 2001 ($t \approx 1500$) se hodnota koeficientu první hlavní komponenty ustálila, ale po dni 1700 (11. září 2001) opět došlo k jeho dočasnému zvýšení. Koeficienty ostatních hlavních komponent již tak výrazné změny nevykazují, ale na všech je vidět zvýšení rozptylu na začátku roku 1997.

Reference

- [1] Aït-Sahalia Y., Lo A.W. (1998). *Nonparametric estimation of state-price densities implicit in financial asset prices*. Journal of Finance **53**, 499–547.
- [2] Aït-Sahalia Y., Lo A.W. (2000). *Nonparametric risk management and implied risk aversion*. Journal of Econometrics **94**, 9–51.
- [3] Aït-Sahalia Y., Wang Y., Yared F. (2000). *Do option markets correctly price the probabilities of movement of the underlying asset?*. Journal of Econometrics **102**, 67–110.
- [4] Breeden D., Litzenberger R. (1978). *Prices of state-contingent claims implicit in option prices*. Journal of Business **51**, 621–651.
- [5] Härdle W., Hlávka Z. (2006). *Dynamics of state price densities*. Journal of Econometrics, v recenzním řízení.
- [6] Jackwerth J.C. (1999). *Option-implied risk-neutral distributions and implied binomial trees: a literature review*. Journal of Derivatives **7**, 66–82.
- [7] Ramsay J.O., Silverman B.W. (1997). *Functional data analysis*. Springer, New York.
- [8] Yatchew A., Härdle W. (2005). *Nonparametric state price density estimation using constrained least squares and the bootstrap*. Journal of Econometrics, v tisku.

Poděkování: Tato práce byla podporována MSM 0021620839 a 1K04018.

Adresa: Z. Hlávka, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: hlavka@karlin.mff.cuni.cz

A STOCHASTIC VERSION OF KERMACK-MCKENDRICK MODEL OF EPIDEMICS

Daniel Hlubinka, Jan Hurt

Keywords: S-I-R epidemic model, Engelbert-Schmidt SDE, simulations.

Abstrakt: V článku se zaměříme na stochastickou verzi obecného modelu epidemie. Připomeneme klasický Kermackův-McKendrickův přístup, ukážeme si význam jednotlivých parametrů a poté se budeme věnovat modelování stochastické epidemie. Zvláštní důraz je kladen na simulační přístup, neboť tato úloha vede na soustavu tří diferenciálních rovnic s náhodnými koeficienty, které jsou dány funkcí difúzního procesu—velikostí populace.

1 Introduction

The Kermack-McKendrick model of epidemics was first time described in [4] and since that time it is considered to be the basic three stage model of epidemics, see e.g. [1], [3]. This model is considered to be appropriate for highly infectious disease with a fast recovery (or fatality) in a closed homogeneous population. The influenza is a perfect example of such a disease.

In their paper [4] Kermack and McKendrick assumed a constant rate of infection β and constant recovery rate γ . Kendall [3] pointed out a possible use for a changing rate of infection $\beta(z)$ as a function of removals—people who already recovered from the disease. Actually his main motivation was the fact that the classical model (1) given below has no explicit solution but for a specific choice of decreasing $\beta(z)$ there is an analytic solution to (1).

The Kermack-McKendrick model serves also as a basis for the stochastic epidemic model proposed in [5]. The population is not assumed to be closed. The Engelbert-Schmidt stochastic differential equation (SDE) is considered to be a suitable model for the population size. The population size is hence a diffusion process and since it is also an argument of the changing rate of infection $\beta(z)$, a simulation study is typically needed.

2 A deterministic model

2.1 Classical model

The general model of epidemics is described by the system of ordinary differential equations (ODE)

$$\begin{aligned} dX_t &= -\beta X_t Y_t dt, & X_0 &= x_0 \\ dY_t &= \beta X_t Y_t dt - \gamma Y_t dt, & Y_0 &= y_0 \\ dZ_t &= \gamma Y_t dt, & Z_0 &= 0, \end{aligned} \tag{1}$$

where X_t is the number of susceptibles (exposed to the infection), Y_t is the number of infectives, and Z_t is the number of removals (recovered, dead, or isolated) at time $t > 0$. Constants β and γ govern the process and will be describe later. We suppose that the size of population is constant over time and equal to $N = X_t + Y_t + Z_t, t \geq 0$.

Constant $\beta > 0$ is the rate of infection (the dimension of β is $(\text{time} \times \text{size of population})^{-1}$, and $\gamma > 0$ is the rate of the removal process, i. e., removals by recovery, death, or isolation (the dimension of γ is time^{-1}). In what follows we will measure time in days. From the dimensions of β and γ it follows that the model can be always used for a fixed population “size” $N = 1$ in which case X_t, Y_t and Z_t are ratios of susceptibles, infectives and removals in the population respectively.

Example 2.1. *The choice $\beta = 0.6N^{-1}$ means that the probability of the transfer of the disease from the infected individual to the susceptible one is approximately 0.6. The choice $\gamma = 0.2$ means that approximately $\gamma^{-1} = 5$ days are needed for the transition from infected to removals. To summarize, the transition $X \rightarrow Y$ goes with rate β , $Y \rightarrow Z$ with rate γ , consequently $X \rightarrow Z$ with rate $\rho := \gamma/\beta$.*

2.2 Properties of the solution

Although there is no explicit solution to (1) we can analyse some properties of the solution.

There exists a solution for $\beta > 0, \gamma > 0$ and $x_0 + y_0 = N, x_0 > 0, y_0 > 0$. The solution (X_t, Y_t, Z_t) is nonnegative, the number of susceptibles X_t is nonincreasing, the number of removals Z_t is nondecreasing. Also there exist positive limits $X_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} X_t$ and $Z_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} Z_t$. Further we have $\lim_{t \rightarrow \infty} Y_t = 0$. The cumulative number of infected and removed people Z_∞ is the unique nonnegative solution of

$$Z_\infty + x_0 \exp \left\{ \frac{\beta}{\gamma} Z_\infty \right\} = N,$$

hence for fixed x_0 the number Z_∞ depends on the rate ρ only.

The ratio ρ together with the initial number of susceptibles give us an important information about the severity of the infection. If ρ is closed to x_0 the limit number of removals Z_∞ is not very high. If $\rho < x_0$ then there exists a global maximum of $Y_+ := \max_{t > 0} Y_t$ while for $\rho \leq x_0$ the number of infectives is decreasing function—the epidemics does not start. On the other hand, $\rho < x_0/2$ is typically the pandemic case, unless β rapidly falls to zero, see the examples below. Further properties of the solution can be found in [1], e.g..

2.3 Rate β changing

In [3] Kendall discussed the realistic generalisation of the classical model by using the infection rate changing with the number of removals Z_t , in particular if $\beta(z)$ is decreasing with z increasing. We use as a specific choice

$$\beta(z) = \begin{cases} \beta_0 (1 - z/z_1) & \text{if } z \in [0, z_1], \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2)$$

For this particular $\beta(z)$ the number of susceptibles and infectives can be written as

$$X_t = x_0 \exp \left\{ -\frac{\beta_0}{\gamma} Z_t \left(1 - \frac{Z_t}{2z_1} \right) \right\}, \quad Y_t = N - Z_t - X_t$$

and Z_∞ is the nonnegative solution of

$$Z_\infty + x_0 \exp \left\{ -\frac{\beta_0}{\gamma} Z_\infty \left(1 - \frac{Z_\infty}{2z_1} \right) \right\} = N.$$

It is clear that after the time $t_1 = \inf\{s : Z_s = z_1\}$ the number of susceptibles is not further decreasing. Nevertheless, the number of removals is still increasing since the number of infectives is nonnegative at t_1 .

Further we use $N = 1$ and $x_0 = 0.999$.

Example 2.2. For the first example we use a constant $\beta = 0.65$ and $\gamma = 0.5$, hence $\rho \doteq 0.77$. The epidemics is quite fast thanks to high value of β , see Figure 1 and note that the epidemic lasts approximately 80 days and there is not more than 3 % of the population infected at given moment.

Now we use the same $\beta = 0.65$ but lower recovery rate $\gamma = 0.2$. Therefore $\rho \doteq 0.31$ and we can speak about a strong pandemic, see Figure 2.

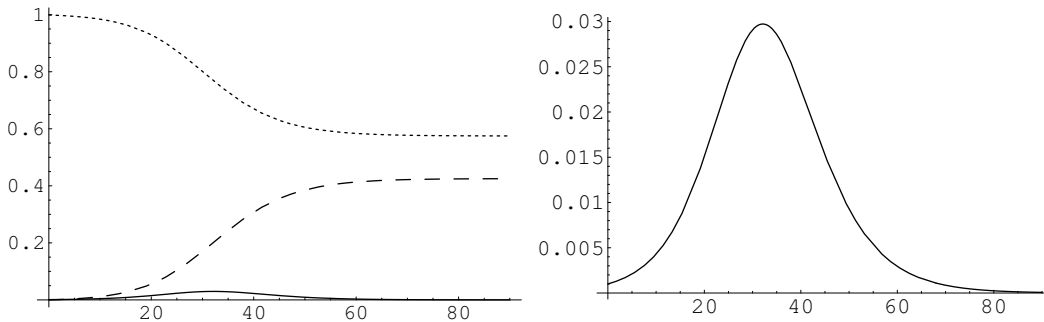


Figure 1: Left: Numbers of susceptibles (dotted), infectives (solid) and removals (dashed) for normal epidemics. Right: Number of infectives.

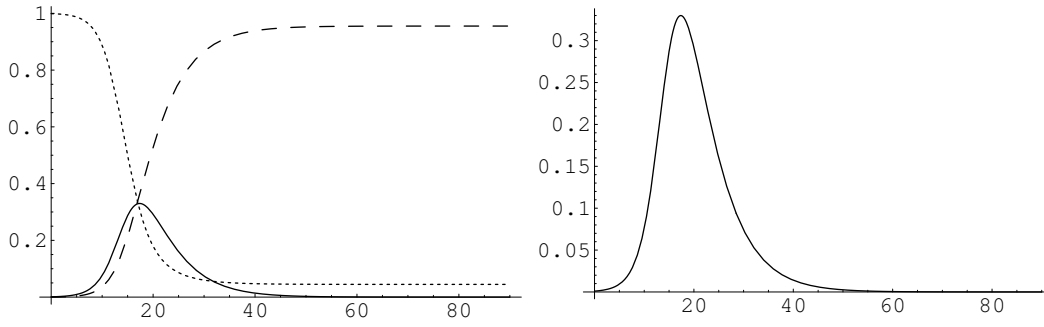


Figure 2: Left: Numbers of susceptibles (dotted), infectives (solid) and removals (dashed) for strong pandemics. Right: Number of infectives.

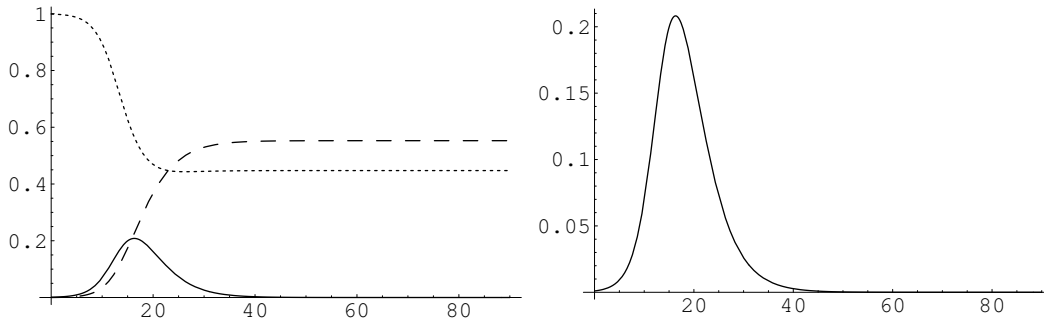


Figure 3: The rate $\beta(z)$ decreasing. Left: Numbers of susceptibles (dotted), infectives (solid) and removals (dashed). Right: Number of infectives.

Example 2.3. Let us consider $\beta(z)$ given by (2), where $\beta_0 = 0.65$ as before and $z_1 = 0.5$. Let us consider $\gamma = 0.2$ and recall that for a constant $\beta = 0.65$ this results in an extreme pandemics. Note that for decreasing β the maximum number of infectives is still very high, $Y_+ > 0.2$, but the total number of removals is lower, see Figure 3.

3 A stochastic diffusion model

3.1 Description

A stochastic generalisation of the classical Kermack-McKendrick epidemic model for a *closed population* is based on a *diffusion model for the population size*. Such a model can be understood as a description of *immigration/emigration variability* of the (open) population. We propose simple nonlinear driftless model

$$dN_t = \sigma(N_t)N_t dW_t, \quad N_0 = n_0, \quad (3)$$

as the SDE for the size of the population N_t . The parameter $\sigma(\cdot)$ is in general a bounded function with the support (or a part of) an interval $[a, b]$, $0 \leq a < b < \infty$. The process W_t is a standard Wiener process. The standard choice is

$$\sigma(n) = \begin{cases} k \frac{(n-a)^{\nu_1} (b-n)^{\nu_2}}{(a+b)^{\nu_3}} & \text{if } a \leq n \leq b, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (4)$$

where $\nu_1 > 0$, $\nu_2 > 0$, $\nu_3 > 0$, $k > 0$. A particular choice $\nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = 1/2$ so that (4) takes the form $\sigma(n) = K(n-a)^{-1/2}(b-n)^{-1/2}$. Note that such $\sigma(\cdot)$ need not to be (locally) Lipschitz continuous but still there exists a unique weak solution according to the Engelbert-Schmidt theorem.

3.2 Stochastic differential equations

3.2.1 Stochastic version of Kermack-McKendrick model We consider triple of stochastic differential equations for the susceptibles, infectives and removals

$$\begin{aligned} dX_t &= -\beta(X_t, Y_t, Z_t)X_t Y_t dt + X_t \sigma(N_t) dW_t, & X_0 &= x_0 \\ dY_t &= \beta(X_t, Y_t, Z_t)X_t Y_t dt - \gamma Y_t dt + Y_t \sigma(N_t) dW_t, & Y_0 &= y_0 \\ dZ_t &= \gamma Y_t dt + Z_t \sigma(N_t) dW_t, & Z_0 &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

where $N_t = X_t + Y_t + Z_t$. Usually it is assumed that $\beta(x, y, z) = \beta(z)$. Compare this model to the classical Kermack-McKendrick model (1). Also note that this SDE's correspond to a system of ODE with random coefficients

$$\begin{aligned} dx(t) &= -\alpha(x(t), y(t), z(t), N_t)x(t)y(t)dt, & x(0) &= \frac{x_0}{N_0} \\ dy(t) &= \alpha(x(t), y(t), z(t), N_t)x(t)y(t)dt - \gamma y(t)dt, & y(0) &= \frac{y_0}{N_0} \\ dz(t) &= \gamma y(t)dt, & z(0) &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

where $x(t) + y(t) + z(t) = 1$ and $\alpha(x, y, z, n) = n\beta(nx, ny, nz)$. Then the solution (X_t, Y_t, Z_t) of (5) is given by $X_t = x(t)N_t$, $Y_t = y(t)N_t$, $Z_t = z(t)N_t$, where $(x(t), y(t), z(t))$ is a solution to (6), and N_t is the population size which dynamics is given by the SDE (3) with $n_0 = x_0 + y_0$.

3.2.2 Properties of the solution Consider the case that there exists a unique strong or weak solution to the generalised diffusion epidemic model. Let us briefly mention the main properties of the solution:

1. N_t is a bounded martingale, $a \leq N_t \leq b$ a.s., and $\lim_{t \rightarrow \infty} N_t$ exists a.s.,
2. $0 < X_t \leq b$ is a supermartingale, $0 \leq Z_t \leq b$ is a submartingale,
3. all limits $X_\infty, Y_\infty, Z_\infty$ exist, $Y_\infty = 0$ a.s. and if $a > 0$ then X_∞ is a positive random variable.

The *unique strong solution* does exist if β is Lipschitz continuous on the set $\{(x, y, z); a \leq x + y + z \leq b\}$, uniformly for $t \geq 0$ (in particular bounded), $\sigma(\cdot)$ bounded, locally Lipschitz.

3.2.3 Engelbert-Schmidt equation for the population size Let us consider the SDE (3) and recall that the usual choice of $\sigma(n)$ need not to be (locally) Lipschitz. Then there exists a *unique weak solution* under the Engelbert-Schmidt condition

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \sigma^{-2}(x+n) dx = \infty \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \iff \quad \sigma(n) = 0 \quad (7)$$

and note that the condition (7) holds for $\sigma(\cdot)$ defined by (4) if $\nu_1, \nu_2 > 0$.

Let $\{B_t, t \geq 0\}$ be a standard Brownian motion defined on some complete probability space. Denote

$$A_t = \int_0^t (B_u \sigma(B_u))^{-2} du,$$

a strictly nondecreasing process. Denote further $\tau_t = \inf \{s : A_s > t\}$ the time of the first entry of A_s to the open interval (t, ∞) . According to Engelbert-Schmidt Theorem, see Chapter 23 in [2], e.g., the process

$$N_t = B_{\tau_t} \quad (8)$$

is the unique weak solution to the SDE for the population size.

3.3 Simulation study

It is of course possible to simulate the solution of the diffusion model (5) directly using simultaneous simulation of the three SDE. Here we prefer a two-stage procedure which enables us to simulate just one diffusion process rather than three. Our plan is

1. to simulate solution to the population model (3)
2. to use the simulated solution and numerically solve the system (6) of ODE with random coefficients.

3.3.1 Simulation of the population size To begin with simulation of the process N_t we need first to simulate a standard Brownian motion B_s up to its first entry to a or b . Let us consider a sequence of independent $N(0, 1)$ distributed r.v.'s Z_i and the simulated Brownian motion with reference points $0 = t_0 < t_1 < \dots < \tau_{\{a,b\}} = \inf \{t_j : B_{t_j} \leq a, \text{ or } B_{t_j} \geq b\}$ which is defined by $B_0 = n_0$ and recursion and interpolation as

$$B(u) = \begin{cases} B_{t_{i-1}} + \sqrt{t_i - t_{i-1}} Z_i, & \text{if } u = t_i, \\ B_{t_{i-1}} + \frac{u - t_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} (B_{t_i} - B_{t_{i-1}}), & \text{if } t_{i-1} \leq u \leq t_i. \end{cases}$$

The time step for simulations of a standard Brownian motion is usually considered fixed, $t_i - t_{i-1} = \Delta$, say. Using this simulated piecewise linear process we calculate the increasing process A_t as piecewise linear with

$$A_{t_i} = A_{t_{i-1}} + \frac{t_i - t_{i-1}}{Z_i} \int_{B_{t_{i-1}}}^{B_{t_i}} (x \cdot \sigma(x))^{-2} dx, \quad A_0 = 0$$

or more simply by Riemann sums

$$A_{t_i} = A_{t_{i-1}} + (t_i - t_{i-1})(B_{t_{i-1}} \cdot \sigma(B_{t_{i-1}}))^{-2}, \quad A_0 = 0.$$

It holds $N_{A_{t_i}} = B_{t_i}$ and we use an interpolation (may be piecewise linear) to evaluate N_u for any u .

Note: A simple simulation of the Brownian motion using the equidistant time points $t_i - t_{i-1} = \Delta$ has a principle disadvantage. The increments of $A_{t_i} - A_{t_{i-1}}$ become *extremely large* if B_t is close to one of the limits a or b , and on the other hand the increments of A_t can be *very small* if B_t is far away from a and b . Hence the simulated time differences $A_{t_i} - A_{t_{i-1}}$ for the population size process N_t may differ substantially. Classical theory as the Lévy modulus of continuity or the Law of iterated logarithm can be used to construct self-adjusted time increments, $t_i - t_{i-1} = \xi(B_{t_{i-1}})$, for the simulated Brownian motion.

We prefer, however, for the sake of simplicity of the simulation procedure, to use only four levels of the time increment. The basic time step is 10^{-1} but when $a + 5$ or $b - 5$ level is passed by the simulated Wiener process we use the time step 10^{-2} . For $B_t > b - 2$ or $B_t < a + 2$ we use the time step 10^{-3} . Finally, since the increments of A_t are unbounded as B_t goes to a or b , we use the time step 10^{-4} if the level $b - 0.1$ or $a + 0.1$ is passed.

The time $s = \max\{t : a < B_r < b \forall r \leq t\}$ is used as the simulated Markov time of the first entrance to the closed set $\{a, b\}$.

3.3.2 Numerical solution of the epidemic model The stochastic epidemic model with random coefficients is given by the system (6) and by the population size SDE (3). The solution to the stochastic version of the Kermack-McKendrick epidemic model (5) is

$$X_t = x(t)N_t, \quad Y_t = y(t)N_t, \quad Z_t = z(t)N_t,$$

where N_t is our simulated population size and $(x(t), y(t), z(t))$ are *numerical solutions* to (6) since there is typically no explicit solution to this system of random differential equations. The coefficients of this differential equation depend moreover on the simulated process N_t and must be therefore interpolated.

Note that for a constant infection rate β (or α for the system (6)) the solution is a simple multiplication of the deterministic solution of the classical Kermack-McKendrick model with population size 1 and of the population size N_t .

Example 3.1. *Let us consider two examples:*

1. *the rate of infection is constant, $\beta = 0.6$, the recovery rate is $\gamma = 1/3$, and the initial percentage of infectives is 0.1%, and*
2. *the rate of infection decreases to zero as the number of removals increases, in particular*

$$\beta(z) = \max \left\{ \beta_0 \left(1 - \frac{2z}{N_t} \right), 0 \right\}, \quad \beta_0 = 0.6, \quad \gamma = 1/3,$$

and the initial percentage of infectives is 0.1% again.

The initial population size is $n_0 = 1,025$ in both cases and the bounds for the population are $a = 1,000$, and $b = 1,050$, respectively. The diffusion coefficient is

$$\sigma(x) = \begin{cases} 3\sqrt{\frac{(x-a)(b-x)}{a+b}} & \text{if } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (9)$$

Hence for the first case we solve the differential equation with constant coefficients while in the second case we have to start with the simulation of the population which is then used in the random coefficients of (6).

The simulated population size N_t is given in Figure 4. Note that the level 1,050 is reached approximately at time $\tau = 250$ what is quite enough for the studied epidemic models which need not to be followed for more than 90 days usually.

The numerical solution to the epidemic model (6) is in Figure 5. Note that the trajectories are smooth functions of bounded variation in both examples.

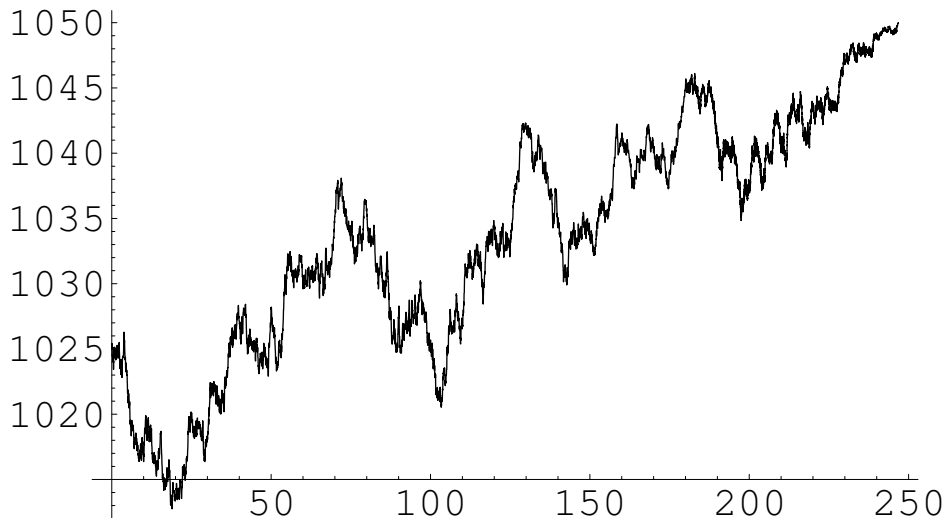


Figure 4: Simulated population size.

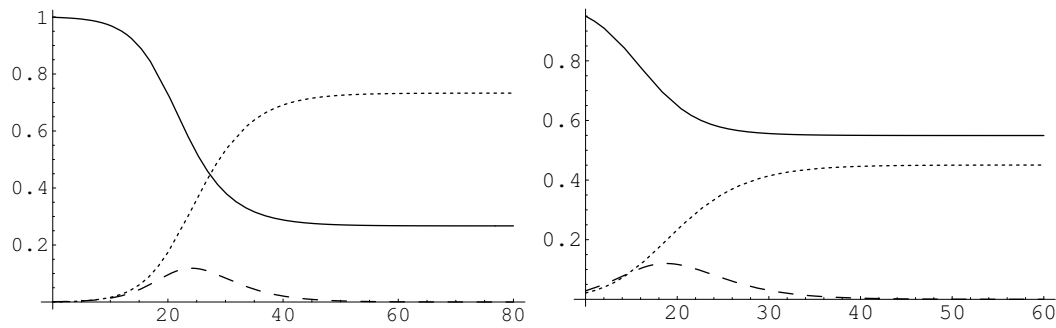


Figure 5: The epidemic. Solid line are susceptibles, dashed line are infected and dotted line are removed. Left β constant, right β given by (9).

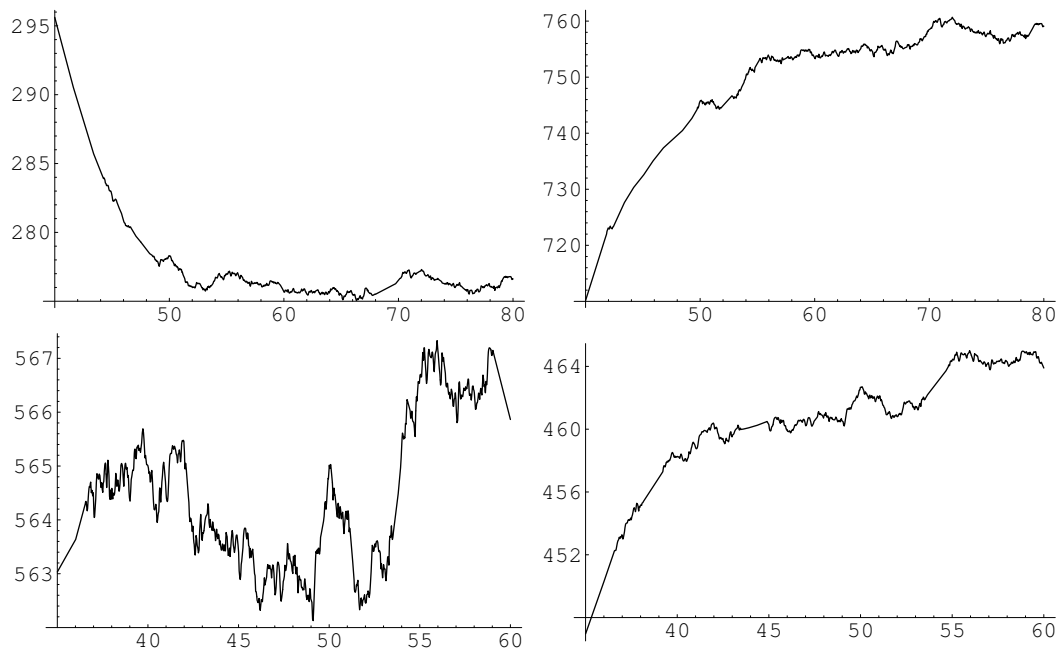


Figure 6: The epidemic. Above β constant, below β given by (9). Left number of susceptibles X_t , right number of removals Z_t .

The infinite variation of the solution of (5) is a consequence of the infinite variation of the population size trajectory $t \mapsto N_t$.

Note that for $\beta(z)$ decreasing the epidemic is shorter and not so severe although we have assumed lower recovery rate $\gamma = 1/4$ than $\gamma = 1/3$ in the model with β constant.

The population size N_t during the observed period $t \in [0, 80]$ is not varying very much. Indeed, it does not leave the interval $[1010, 1040]$. On the other hand, the ratio of susceptibles is decreasing from nearly 1 to less than 0.3, or 0.6 for nonconstant β , respectively. Similar observation can be done for the ratio of removals. Therefore the influence of the diffusion part of the model (5) is limited. It can be seen in Figure 6 that if the ratio of susceptibles

(removals) is changing fast, the influence of the population variation is suppressed. Hence we show only a part of the solution of (5) for the susceptibles $X_t = x(t)N_t$ and for the removed $Z_t = z(t)N_t$ in Figure 6.

Note that for the choice of β decreasing the number of susceptibles is essentially not decreasing after $t = 35$ but for the number of removals such a stabilization takes place later (about $t = 40$) which corresponds with the recovery rate γ . In Figure 6 the “delay in stabilization” of the number of removals with respect to the number of susceptibles can be observed.

Reference

- [1] Daley D.J., Gani J. (1999). *Epidemic modelling; an introduction*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [2] Kallenberg O. (2002). *Foundations of modern probability*. 2nd ed. Springer-Verlag, New York.
- [3] Kendall D.G. (1956). *Deterministic and stochastic epidemics in closed population..* In: Proc. Third Berkeley Symp. Math. Statist. Probab. **4**, Univ. of California Press, Berkeley, 149–165.
- [4] Kermack W.O., McKendrick A.G. (1927). *A contribution to the mathematical theory of epidemics*. Proc. Roy. Soc. London A **115**, 700–721.
- [5] Štěpán J., Hlubinka D. (2006). *Kermack-McKendrick model revisited*. Kybernetika, to appear.

Acknowledgement: The research has been supported by Grant of Czech Ministry of Education MSM 0021620839

Address: D. Hlubinka, J. Hurt, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: {daniel.hlubinka,jan.hurt}@mff.cuni.cz

ANALÝZA EXTRÉMŮ METEOROLOGICKÝCH ŘAD

Daniela Jarušková

Klíčová slova: Odhad vícerozměrných kvantilů, chvost rozdělení, extrémální rozdělení, max - stabilita.

Abstrakt: Článek se zabývá problémem odhadu vícerozměrných kvantilů. Metoda navržená v článku Joe a kol. (1992), která je založena na aproximaci chvostů rozdělení chvosty extrémálních rozdělení, byla použita na odhad dvojrozměrných kvantilů srážkových denních úhrnů měřených v několika srážkoměrných stanicích na severní Moravě.

1 Úvod

Jednou ze základních úloh statistické hydrologie a klimatologie je odhadnout pravděpodobnost p překročení velmi vysoké úrovně x sledovanou veličinou X nebo naopak k velmi malé pravděpodobnosti p najít takovou úroveň $x(p)$, která je překročena právě jen s touto pravděpodobností.

Stejná úloha nás může zajímat i ve vícerozměrném případě, to znamená, sledujeme-li vektor $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_k)$. Vícerozměrný p 100% horní kvantil pak definujeme jako vektor $(x_1(p), \dots, x_k(p))$ takový, že

$$P(X_1 > x_1(p) \cap \dots \cap X_k > x_k(p)) = p.$$

Je zřejmé, že tento vztah splňuje celá množina bodů. V dvojrozměrném případě je to například nějaká křivka v rovině.

K odhadování charakteristik, které nás zajímají, bychom teoreticky mohli použít některou z neparametrických vyhlazovacích metod. Většinou však máme pro použití neparametrických metod málo dat, a tak se raději přikláname k odhadu pomocí parametrických a semiparametrických metod. Jednou z možností je modelovat „chvosty“ rozdělení sledovaného vektoru \mathbf{X} pomocí „chvostů extrémálních rozdělení.“

Postupy, které budeme užívat, jsou popsány v knize [1]. Metoda dvojrozměrných kvantilů byla převzata z článku [2].

2 Data

Data, na něž jsme použili metody pro odhadování vícerozměrných kvantilů, jsme získali z Českého hydrometeorologického ústavu. Jednalo se o denní srážkové úhrny měřené v 9 meteorologických stanicích na severní Moravě - Heřmanovice, Karlovice, Krnov, Lichnov, Opava, Praděd, Rejvíz, Vidly, Albrechtice - Žáry. Nejdelší záznam zahrnoval 45 let, ale většina byla kratší, často s řadou chybějících pozorování.

3 Asymptotická teorie extrémů

Jednorozměrný případ

Uvažujme posloupnost nezávislých stejně rozdělených náhodných veličin X_1, \dots, X_n s distribuční funkcí $F(x)$. Pak $\max_{1 \leq i \leq n} X_i$ má rozdělení s distribuční funkcí $(F(x))^n$. Vzhledem k tomu, že $0 \leq F(x) \leq 1$, je limita posloupnosti $(F(x))^n$ pro rostoucí n buď rovna 0 nebo 1.

Chceme-li, aby limita posloupnosti $(F(x_n))^n$ byla nedegenerovaná, studujeme jen ty posloupnosti $\{x_n\}$, pro které platí $x_n \rightarrow u$, kde $u = \sup\{x; F(x) < 1\}$. Nejoblíbenější volbou je posloupnost $\{x_n\}$ ve tvaru $x_n = a_n x + b_n$. Existují-li posloupnosti $\{a_n\}$ a $\{b_n\}$ takové, aby

$$F^n(a_n x + b_n) \rightarrow G(x) \quad \text{pro } x \in R^1,$$

kde $G(x)$ je nedegenerovaná distribuční funkce, pak $G(x)$ nazýváme distribuční funkcí extrémálního rozdělení.

Distribuční funkce extrémálního rozdělení jsou max-stabilní, tj. existují posloupnosti $\{\alpha_m\}$ a $\{\beta_m\}$ takové, že

$$G(x) = (G(\alpha_m x + \beta_m))^m \quad \text{pro } x \in R^1,$$

což znamená, že maximum náhodných veličin s distribuční funkcí $G(x)$ má, až na lineární transformaci, tutéž distribuci. Třídou distribučních funkcí extrémálního rozdělení lze parametrizovat pomocí tří parametrů μ, σ, ξ :

$$\begin{aligned} \text{pro } \xi \neq 0 \quad G(x) &= \exp \left\{ - \left(1 + \xi \frac{x - \mu}{\sigma} \right)^{-1/\xi} \right\}, & 1 + \xi \frac{x - \mu}{\sigma} > 0, \\ \text{pro } \xi = 0 \quad G(x) &= \exp \left\{ - e^{-\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)} \right\}, & x \in R^1. \end{aligned} \quad (1)$$

Vícerozměrný případ

Uvažujme distribuční funkci $F(x_1, \dots, x_k)$ náhodného vektoru (X_1, \dots, X_k) . Jestliže existují posloupnosti $\{a_{n1}\}, \dots, \{a_{nk}\}, \{b_{n1}\}, \dots, \{b_{nk}\}$ tak, aby

$$(F(a_{n1}x_1 + b_{n1}, \dots, a_{nk}x_k + b_{nk}))^n \rightarrow G(x_1, \dots, x_k) \quad \text{pro } (x_1, \dots, x_k) \in R^k, \quad (2)$$

kde $G(x_1, \dots, x_k)$ je nedegenerovaná distribuční funkce k -rozměrného rozdělení, pak říkáme, že $G(x_1, \dots, x_k)$ je distribuční funkcí k -rozměrného extrémálního rozdělení. Všimněme si, že pokud $\{(X_{i1}, \dots, X_{ik}), i = 1, \dots, n\}$ jsou nezávislé vektory s distribuční funkcí $F(x_1, \dots, x_k)$, pak levá strana (2) odpovídá

$$P \left(\max_{1 \leq i \leq n} X_{i1} \leq a_{n1}x_1 + b_{n1}, \dots, \max_{1 \leq i \leq n} X_{ik} \leq a_{nk}x_k + b_{nk} \right).$$

Dále zřejmě marginální distribuční funkce $G_j(x_j) = G(\infty, \dots, x_j, \dots, \infty)$, $j = 1, \dots, k$ jsou jednorozměrnými distribučními funkcemi extrémálního rozdělení. Distribuční funkce $G(x_1, \dots, x_k)$ je max-stabilní, tj. existují posloupnosti $\{\alpha_{m1}\}, \dots, \{\alpha_{mk}\}, \{\beta_{m1}\}, \dots, \{\beta_{mk}\}$ tak, aby

$$\left(G(\alpha_{m1}x_1 + \beta_{m1}, \dots, \alpha_{mk}x_k + \beta_{mk})\right)^m = G(x_1, \dots, x_k), \quad (3)$$

přičemž

$$\left(G_j(\alpha_{mj}x_j + \beta_{mj})\right)^m = G_j(x_j).$$

V dalším textu budeme formálně psát levou stranu (2) jako $(F(\mathbf{a}_n \mathbf{x} + \mathbf{b}_n))^n$ a levou stranu (3) jako $(G(\boldsymbol{\alpha}_m \mathbf{x} + \boldsymbol{\beta}_m))^m$.

4 Aproximace chvostu rozdělení pomocí chvostu extrémálního rozdělení

Myšlenka

Pro velká n platí, viz (2), $(F(\mathbf{a}_n \mathbf{x} + \mathbf{b}_n))^n \sim G(\mathbf{x})$. Zlogaritmováním předchozí aproximace, využitím vlastnosti logaritmu $\log(1+x) = x + o(x)$ pro $x \rightarrow 0$ a max-stability funkce $G(\mathbf{x})$ dostáváme pro $n \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} n \log(1 - (1 - F(\mathbf{a}_n \mathbf{x} + \mathbf{b}_n))) &\sim \log G(\mathbf{x}), \\ n(1 - F(\mathbf{a}_n \mathbf{x} + \mathbf{b}_n)) &\sim -\log G(\mathbf{x}), \\ (1 - F(\mathbf{a}_n \mathbf{x} + \mathbf{b}_n)) &\sim -\log(G(\mathbf{x}))^{1/n}, \\ (1 - F(\mathbf{a}_n \mathbf{x} + \mathbf{b}_n)) &\sim -\log G(\boldsymbol{\alpha}_n \mathbf{x} + \boldsymbol{\beta}_n). \end{aligned}$$

Odtud zřejmě pro velká \mathbf{y} získáme aproximaci:

$$F(\mathbf{y}) \approx G\left(\boldsymbol{\alpha}_n\left(\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{a}_n}\right)\mathbf{y} - \boldsymbol{\alpha}_n\left(\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{a}_n}\right)\mathbf{b}_n + \boldsymbol{\beta}_n\right),$$

přičemž pravá strana je opět distribuční funkce extrémálního rozdělení $\tilde{G}(\mathbf{y})$, která se odlišuje od $G(\mathbf{y})$ pouze lineární transformací.

Jednorozměrný případ

Studujeme-li podmíněné extrémální rozdělení veličiny Y za podmínky $Y > u$ (u se nazývá práh):

$$G_u(x) = P(Y < x + u | Y > u), \quad x \geq 0,$$

pak $G_u(x)$ lze aproximovat pro velká u distribuční funkcí zobecněného Paretova rozdělení ($x \geq 0$):

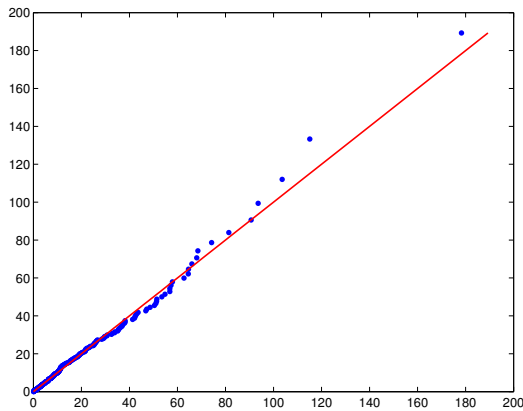
$$\begin{aligned} F^*(x) &= 1 - \left(1 + \frac{\xi}{\beta}x\right)^{-1/\xi} \quad \text{jestliže } \xi \neq 0, \\ &= 1 - e^{-x/\beta} \quad \text{jestliže } \xi = 0. \end{aligned}$$

Použijeme-li myšlenku aproximace chvostu rozdělení veličiny X chvostem Paretova rozdělení, pak můžeme distribuční funkci $F(x)$ veličiny X odhadnout na základě napozorovaných hodnot X_1, \dots, X_n následovně:

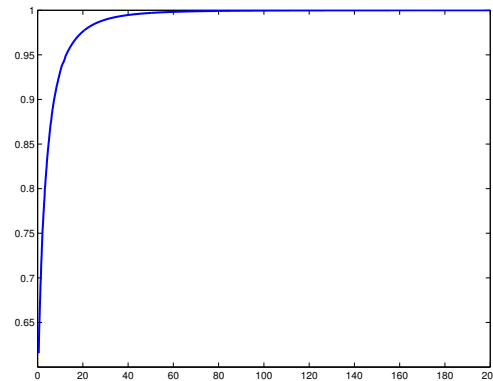
$$\begin{aligned}\widehat{F}(x) &= \frac{\text{počet}\{X_i \leq x\}}{n} & x \leq u, \\ &= \widehat{F}(u) + (1 - \widehat{F}^*(x)) \frac{n_u}{n} & x > u,\end{aligned}\quad (4)$$

kde $n_u = \text{počet}\{X_i > u\}$. Odhad $\widehat{F}^*(x)$ pak lze získat například metodou maximální věrohodnosti na základě pouze těch hodnot ve výběru, která přesáhnou práh u . Práh u je ovšem nutno volit subjektivně.

Na obrázcích 1 a 2 je ilustrován popsáný odhad pro srážkovou řadu Heřmanovice. Hodnota prahu $u = 12.65$ byla zvolena tak, aby odpovídala 95% empirickému kvantilu všech dat (to je včetně dnů beze srážek). Parametry Paretova rozdělení byly odhadnuty maximálně věrohodnými odhady $\widehat{\beta} = 9.0173$ a $\widehat{\xi} = 0.26132$. Všimněme si, že odhad parametru ξ je kladný. Jedná se tedy o model s „těžkými chvosty“.



Obrázek 1: Q-q plot pro „chvost“ srážkové řady Heřmanovice.



Obrázek 2: Odhad distribuční funkce (4) srážkové řady Heřmanovice.

Vícerozměrný případ

Stejně jako ve většině statistických učebnic budeme výklad provádět pouze pro dvojrozměrný vektor, kde je možné myšlenky snadno ilustrovat obrázky.

Předpokládejme, že chceme najít odhad dvojrozměrné distribuční funkce. Pokud je dvojrozměrné rozdělení extrémální, pak víme, že marginální rozdělení jsou extrémální, určené třemi parametry, viz (1). Tyto parametry lze odhadnout například metodou maximální věrohodnosti, a tím odhadnout marginální distribuce. Pokud není studované vícerozměrné rozdělení extrémální, budou mít marginály nějaké obecné rozdělení, které se však bude chovat přibližně jako extrémální nad nějakým prahem, a tudíž lze odhadnout pomocí

postupu z předchozího paragrafu. V každém případě můžeme tedy „předpokládat“, že marginální rozdělení „známe“ a můžeme je tudíž transformovat na nějaké vhodné distribuce, s kterými se nám dobře pracuje. Nejčastěji se doporučuje veličiny transformovat tak, aby marginály měly Fréchetovo rozdělení, tj. rozdělení s distribuční funkcí

$$F_z(z) = \exp(-1/z) \quad \text{pro } z > 0, \quad F_z(z) = 0 \quad \text{pro } z \leq 0.$$

Pokud vycházíme z dvojrozměrného výběru $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ a již máme odhadnuty distribuční funkce $\widehat{F}_1(x), \widehat{F}_2(y)$, pak použijeme transformaci

$$Z_{i1} = -\frac{1}{\log(\widehat{F}_1(X_i))}, \quad Z_{i2} = -\frac{1}{\log(\widehat{F}_2(Y_i))}.$$

Nyní na chvíli předpokládejme, že $G^*(z_1, z_2)$ je dvojrozměrné extrémální rozdělení s Fréchetovými marginály, pak $G^*(z_1, z_2)$ je max-stabilní s konstantami $\{\alpha_{m1} = m\}, \{\alpha_{m2} = m\}, \{\beta_{m1} = 0\}, \{\beta_{m2} = 0\}$, a tedy

$$\left(G^*(mz_1, mz_2)\right)^m = G^*(z_1, z_2).$$

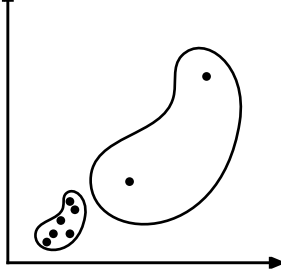
Předchozí tvrzení je důsledkem toho, že posloupnosti $\{\alpha_{m1}\}, \{\alpha_{m2}\}, \{\beta_{m1}\}, \{\beta_{m2}\}$ jsou určeny max-stabilitou marginál a pro Fréchetovo rozdělení mají právě tento tvar.

Definujme dále funkce

$$\mu(z_1, z_2) = -\log(G^*(z_1, z_2)), \quad z_1 \geq 0, z_2 \geq 0.$$

Pro libovolné m přirozené platí: $\mu(mz_1, mz_2) = \frac{1}{m} \mu(z_1, z_2)$, což lze rozšířit i na libovolné reálné s : $\mu(sz_1, sz_2) = \frac{1}{s} \mu(z_1, z_2)$.

Označme $([0, z_1] \times [0, z_2])^c$ doplněk obdélníka $[0, z_1] \times [0, z_2]$ do prvního kvadrantu. Definujme-li v 1. kvadrantu na borelovských množinách míru Λ pomocí



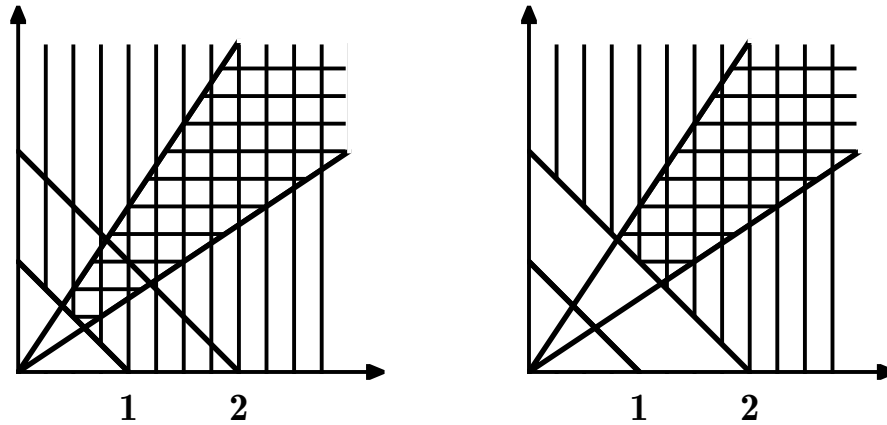
$$\Lambda\left(\left([0, z_1] \times [0, z_2]\right)^c\right) = \mu(z_1, z_2),$$

pak i tato míra splňuje pro každou měřitelnou množinu B a pro každé reálné $s > 0$:

$$\Lambda(sB) = \frac{1}{s} \Lambda(B). \quad (5)$$

Na druhé straně pro velká z_1, z_2 je $G^*(z_1, z_2)$ blízko 1, a tedy $\mu(z_1, z_2) = -\log(G^*(z_1, z_2)) \approx (1 - G^*(z_1, z_2))$, což odpovídá podílu bodů (odpovídajícím dvojicím realizací po transformaci), které padnou do $([0, z_1] \times [0, z_2])^c$.

Vlastnost (5) míry Λ platí pro jakoukoliv Borelovskou množinu, a tedy i pro úhly, což ilustrují následující obrázky: Míra vykřížkované plochy ku vyšrafované ploše je na obou obrázcích stejná. Navíc míra vyšrafované plochy na obrázku vpravo je polovinou vyšrafované plochy na obrázku vlevo.



Transformujeme-li tedy Z_1, Z_2 na $R = Z_1 + Z_2$ a $\Omega = \frac{Z_1}{Z_1 + Z_2}$, pak lze míru Λ faktorizovat

$$\Lambda(dr, d\omega) = R(dr) \cdot H(d\omega),$$

kde míra R má hustotu $g(r) = 1/r^2$ pro $r \geq 0$. Pokud míra H má hustotu $h(\omega)$, pak lze vyjádřit

$$\mu(z_1, z_2) = \int_0^{\frac{z_1}{z_1+z_2}} -\frac{1-\omega}{z_2} h(\omega) d\omega + \int_{\frac{z_1}{z_1+z_2}}^1 \frac{\omega}{z_1} h(\omega) d\omega.$$

Pro velké hodnoty z_1 a z_2 bude tedy díky aproximaci chvostu rozdělení chvostem extrémálního rozdělení a díky (3) relativní počet bodů padnoucí do oblasti $A \subset [z_1, \infty) \times [z_2, \infty)$ přibližně odpovídat míře $\Lambda(A)$. V praxi pak postupujeme tak, že zvolíme subjektivně mez C a na základě těch $\omega_i = Z_{i1}/(Z_{i1} + Z_{i2})$, pro které $Z_{i1} + Z_{i2} > C$, odhadneme parametricky či neparametricky funkci $h(\omega)$. Uvědomme si, že odhadujeme-li $H(\omega)$, respektive $h(\omega)$, odhadujeme vlastně „závislost mezi X a Y v oblasti jejich dvojrozměrného chvostu“. „Velké hodnoty“ $h(\omega)$ uprostřed a „malé“ na okrajích intervalu $[0, 1]$ odpovídají „silné závislosti“, zatímco „malé“ uprostřed a „velké“ na okrajích odpovídají slabé závislosti. Kromě toho zde „závislost“ odpovídá závislosti pořadí, protože marginální rozdělení jsme již odhadli předem. Mnozí autoři doporučují odhadovat současně parametry marginál a současně „závislostní struktury“, což je jistě z hlediska matematického lepší postup, ale může přinášet numerické problémy.

Pokud se rozhodneme odhadovat $h(\omega)$ parametricky, můžeme si vybrat z řady rozdělení s hustotou, jejíž nosič je interval $[0, 1]$. V případě našich srážkových dat se zdálo, že histogramy jsou ve všech případech „symetrické“ kolem $1/2$. Nejčastěji používanými symetrickými hustotami na intervalu $[0, 1]$ je hustota **logistického rozdělení**:

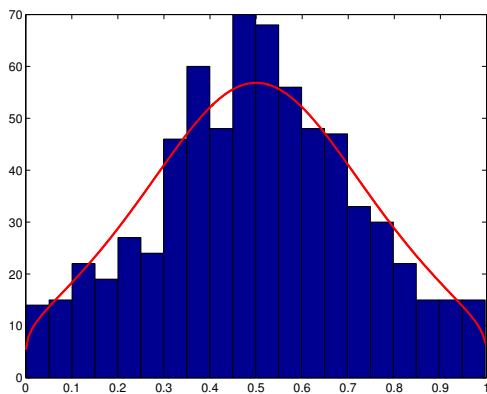
$$h(\omega) = \frac{1-\alpha}{\alpha} \left(\omega(1-\omega) \right)^{-1-1/\alpha} \left(\omega^{-1/\alpha} + (1-\omega)^{-1/\alpha} \right)^{\alpha-2}, \quad (6)$$

kde parametr $\alpha \in (0, 1)$. Pro symetrické logistické rozdělení s parametrem α má distribuce $G^*(z_1, z_2)$ tvar:

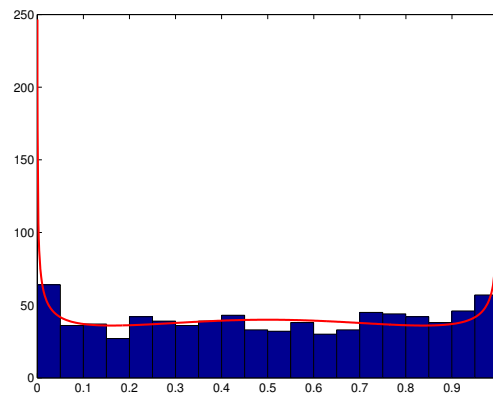
$$G^*(z_1, z_2) = \exp \left\{ - \left((1/z_1)^{1/\alpha} + (1/z_2)^{1/\alpha} \right)^\alpha \right\}.$$

Vyšší hodnoty α odpovídají slabší závislosti, nižší silnější.

Na obrázku 3 a 4 jsou ilustrace odhadů hustoty $h(\omega)$ pro dvě dvojice denních srážkových úhrnů Heřmanovice - Rejvíz a Heřmanovice - Opava. Stanice Heřmanovice a stanice Rejvíz jsou relativně blízko položené, přičemž korelační koeficient mezi naměřenými hodnotami byl roven 0.83. „Dvojrozměrná mez“ byla zvolena $u = 3.66$ a odhad parametru α metodou maximální věrohodnosti $\hat{\alpha} = 0.46$. Stanice Heřmanovice a stanice Opava mají značně rozdílný charakter a jejich závislost je „relativně slabší“ s výběrovým korelačním koeficientem 0.56. „Dvojrozměrná mez“ byla opět zvolena $u = 3.66$ a odhad parametru α metodou maximální věrohodnosti $\hat{\alpha} = 0.64$.



Obrázek 3: Histogram $\{\omega_i\}$ a proložená hustota logistického rozdělení s parametrem $\alpha = 0.46$ pro dvojici Heřmanovice - Rejvíz.



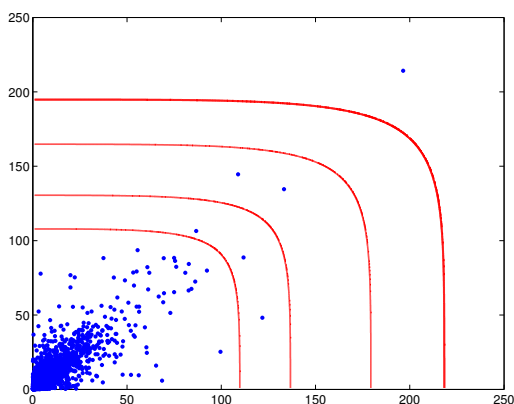
Obrázek 4: Histogram $\{\omega_i\}$ a proložená hustota logistického rozdělení s parametrem $\alpha = 0.64$ pro dvojici Heřmanovice - Opava.

5 Vícerozměrné kvantily

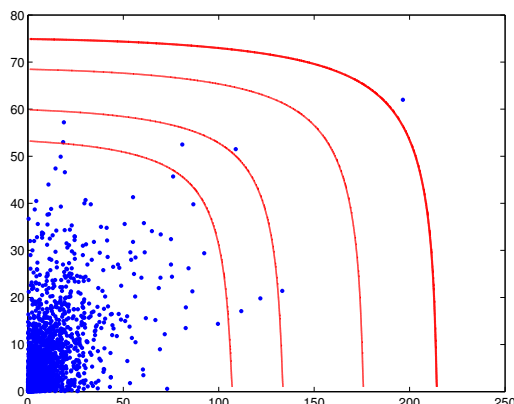
Připomeňme, že vícerozměrný horní kvantil byl definován jako množina bodů $\{(x_1(p), \dots, x_k(p))\}$ splňujících $P(X_1 > x_1(p), \dots, X_k > x_k(p)) = p$. Dvojrozměrné kvantily se dají odhadnout z následujících aproximací:

$$\begin{aligned} P(X > x \cap Y > y) &= P(X > x) + P(Y > y) - P(X > x \cup Y > y) = \\ &= (1 - F_1(x)) + (1 - F_2(y)) - (1 - F(x, y)) \\ &\approx -\log F_1(x) - \log F_2(y) + \log F(x, y) \\ &\approx -\log F_1(x) - \log F_2(y) + \\ &\quad + \log G^* \left(-\frac{1}{\log F_1(x)}, -\frac{1}{\log F_2(y)} \right). \end{aligned}$$

Na obrázcích 5 a 6 jsou zobrazeny 10%, 5%, 2% a 1% dvojrozměrné horní kvantily (v letech) pro srážkové řady Heřmanovice - Rejvíz a Heřmanovice - Opava.



Obrázek 5: Odhady dvojměrných kvantilů pro dvojici Heřmanovice - Rejvíz.



Obrázek 6: Odhady dvojměrných kvantilů pro dvojici Heřmanovice - Opava.

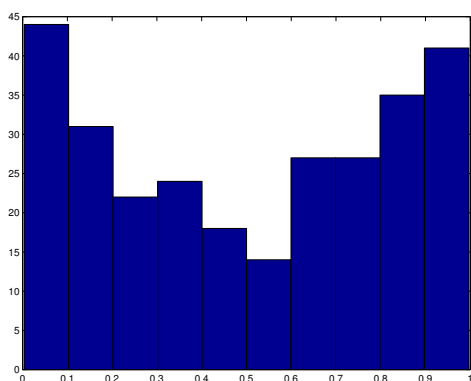
6 Závěr

Metoda odhadování chvostů pomocí chvostů extrémálních rozdělání je jistě velmi zajímavá. Má však i řadu problémů. Ačkoliv ji lze aplikovat na libovolně dimenzionální vektor, není pro vícerozměrný vektor takovým přínosem jako ve dvojměrném případě. Chceme-li například modelovat chvost trojměrného rozdělání, znamená to, že budeme pro modelování závislostí vybírat mezi dvojměrnými rozděláními $\{H(\omega_1, \omega_2), \omega_1 \geq 0, \omega_2 \geq 0, \omega_1 + \omega_2 \leq 1\}$. Vhodných rozdělání tu není mnoho a intuice, jak je vybrat, je mnohem slabší. Zdá se, že jediné rozdělání, které se používá v aplikacích ve více než trojměrném případě, je Dirichletovo rozdělání.

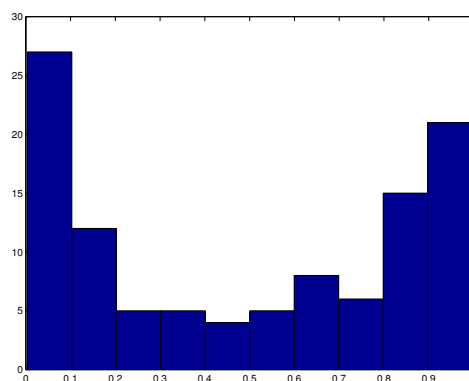
Ještě obtížnější bývá rozhodnout, zda vůbec můžeme metodu použít, případně, jak zvolit prahy, nad kterými už platí „alespoň přibližně“ asymptotická teorie. Popsaná metoda spočívá na předpokladu, že nad jistým prahem je už chování extrémů stabilní, a tudíž pravděpodobnost výskytu „velmi vysokých extrémů“ lze odhadnout na základě výskytu „menších extrémů“. Nejčastěji se doporučuje kreslit si histogramy pro různé hodnoty prahů a sledovat, zda se jejich tvar už částečně stabilizoval, nebo počítat některou charakteristiku (například rozptyl) a dívat se, zda se již nad nějakým prahem příliš nemění.

Pro zpracovávání srážková data se zdálo, že se s rostoucím prahem závislost mezi řadami snižuje. Tento jev byl tím výraznější, čím byly řady (díky vzdálenosti srážkoměrných stanic) „méně závislé“. Na obrázku 7 a 8 vidíme histogram úhlové složky odpovídající prahům $r = \exp(3)$ a $r = \exp(4)$ pro dvojici stanic Heřmanovice–Opava. Obrázek 9 ilustruje závislost mezi volbou prahu a rozptylem úhlové složky, zatímco obrázek 10 závislost mezi volbou prahu a odhadem parametru α logistického rozdělání úhlové složky, obojí opět pro dvojici stanic Heřmanovice–Opava.

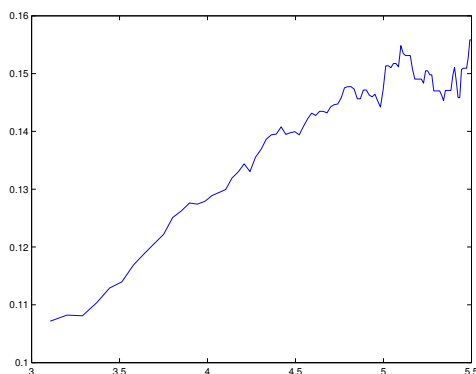
Na základě všech těchto obrázků vznikají pochybnosti o oprávněnosti použití popsané metody, obzvlášť při odhadování vysokých kvantilů. Na druhé



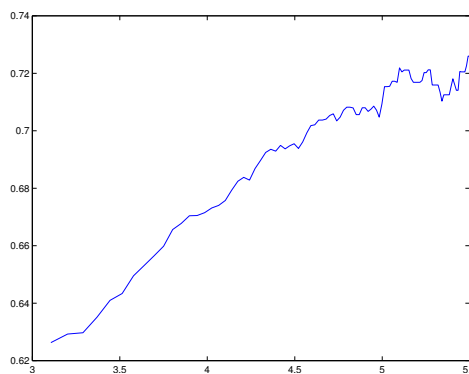
Obrázek 7: Histogram $\{\omega_i\}$ pro $r > \exp(3)$, Heřmanovice - Opava.



Obrázek 8: Histogram $\{\omega_i\}$ pro $r > \exp(4)$, Heřmanovice - Opava.



Obrázek 9: Výběrově rozptyly spočtené z $\{\omega_i; \omega_i > \exp(r)\}$ pro různé hodnoty r .



Obrázek 10: Odhady parametru α v logistickém rozdělení na základě $\{\omega_i, \omega_i > \exp(r)\}$.

straně, pokud je závislost mezi extrémů ve skutečnosti menší než jsme odhadli, pak se naše odhady pohybují na „bezpečné straně“, to znamená, že náš odhad pravděpodobnosti, že se v obou stanicích vyskytnou současně velmi vysoké hodnoty, bude větší než tomu bude ve skutečnosti.

Reference

- [1] Beirlant J., Goegebeur Y., Teugels J., Segers J., De Waal. (2004). *Statistics of extremes. Theory and applications*. John Wiley, Chichester.
- [2] Joe H., Smith R.L., Weissman I. (1992). *Bivariate threshold methods for extremes*. J. R. Statist. Soc B **54**, 171–183.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem MSM 6840770002.

Adresa: D. Jarušková, Fakulta stavební ČVUT, Katedra matematiky, Tháškurova 7, CZ 166 29 Praha 6

E-mail: jarus@mat.fsv.cvut.cz

O INTERVALOVÝCH ODHADĚCH PRAVDĚPODOBNOSTÍ, ZVLÁŠTĚ MALÝCH

Jan Klaschka

Klíčová slova: Konfidenční interval, binomické rozdělení.

Abstrakt: Práce se zabývá modifikací Clopper-Pearsonova konfidenčního intervalu pro parametr binomického rozdělení při nulovém nebo plném počtu úspěchů. Ukazuje se, že modifikace, která má stále své přívržence, je nekorrektní. Dále jsou připomenuty některé lepší alternativy k nejběžněji používaným typům konfidenčních intervalů.

1 Úvod

Impuls pro tuto práci vzešel z aplikací, kde je někdy třeba sestrojít intervalový odhad pravděpodobnosti jevu, který v n nezávislých pokusech vůbec nenastal, popř. naopak nastal ve 100 % případů. S takovými situacemi se můžeme setkat např. při vytváření klasifikačního modelu pro detekci mikrospánků na základě spektra EEG. Také v medicíně se tyto případy vyskytují: Úspěšnost léčby některých banálních chorob nebo účinnost odvíšivovací kúry může být tak vysoká, že se ve studii běžného rozsahu nevyskytne ani jeden neúspěch.

V sekci 2 budou připomenuty dva typy konfidenčních intervalů pro parametr binomického rozdělení, které každý statistik určitě zná (nebo by přinejmenším znát měl): tzv. standardní (přibližný) konfidenční interval a Clopper-Pearsonův (exaktní) konfidenční interval. V sekci 3 uvedu jednoduchý nápad, jak Clopper-Pearsonův interval vylepšit – jak jej modifikovat, když počet úspěchů je nulový nebo stoprocentní. Dále se pak podíváme, jak se to má s původností a korektností tohoto nápadu. V sekci 4 upozorním na některé lepší alternativy k intervalům probíraným v sekci 2.

2 Co o konfidenčních intervalech pro p ví každý

V celé práci budeme předpokládat, že X je počet „úspěchů“ v n nezávislých opakováních pokusu, v němž „úspěch“ nastane s pravděpodobností p . Náhodná veličina X tedy bude mít binomické rozdělení parametry n a p ($n \geq 1$, $0 \leq p \leq 1$), tj. (formálně $0^0 = 1$)

$$P_p(X = i) = \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i} \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Budeme se zabývat oboustrannými konfidenčními intervaly $CI(X, n, \alpha)$ pro parametr p na hladině spolehlivosti $1 - \alpha$ při pevném známém n .

Skoro v každé učebnici statistiky najdeme vzorec pro přibližný konfidenční interval založený na aproximaci binomického rozdělení normálním rozdělením:

$$CI^{st}(X, n, \alpha) = \hat{p} \pm z_{\alpha/2} \sqrt{\hat{p}(1 - \hat{p})/n}, \quad (1)$$

kde $\hat{p} = X/n$ a z_α je $(1 - \alpha)$ -kvantil normovaného normálního rozdělení. Je to určitě (viz např. [1]) jeden z historicky prvních návrhů konfidenčního intervalu (nejen pro parametr p binomického rozdělení, ale pro jakýkoli parametr obecně): Laplace jej publikoval v r. 1812 [9]. V literatuře i v praxi je tak rozšířený, že se mu běžně říká *standardní* konfidenční interval (odtud ono „st“ v CI^{st}).

Je dobře známo, že konfidenční interval (1) není vhodné používat, pokud \hat{p} je blízké extrémním hodnotám 0 nebo 1. Při $X = 0$ nebo $X = n$ degeneruje CI^{st} na jediný bod, 0 resp. 1. Kdybychom takovou informaci o p vzali za bernou minci, museli bychom věřit, že co se v dosavadních pokusech nestalo, nemůže se stát vůbec, popř. že co se stalo v pokusu pokaždé, musí se vždy opakovat i v budoucnu. Při malém počtu úspěchů (např. pro $X = 1$ a $n \geq 2$) nebo neúspěchů může vyjít dolní hranice konfidenčního intervalu záporná, popř. horní hranice větší než 1, což také nevypadá právě dobře. To jsou ovšem jen nejnápadnější vady intervalu (1) při malém nebo velkém \hat{p} . I tehdy, když interval (1) je nedegenerovaný a je podmnožinou intervalu $[0, 1]$, může být pravděpodobnost pokrytí skutečné hodnoty p konfidenčním intervalem výrazně menší než nominální úroveň spolehlivosti $1 - \alpha$. V literatuře se uvádějí různá doporučení, kdy je „bezpečné“ interval (1) použít. Jedná se zpravidla o podmínky typu $n \cdot \min(p, 1 - p) \geq c$ nebo $np(1 - p) \geq c$, popř. $n \cdot \min(\hat{p}, 1 - \hat{p}) \geq c$ nebo $n\hat{p}(1 - \hat{p}) \geq c$, kde c je nejčastěji konstanta mezi 5 a 10 (včetně).

Alternativu ke standardnímu konfidenčnímu intervalu, jež se dá použít i v situacích, kdy vzorec (1) dává nesmyslné nebo nespolehlivé výsledky, představuje *Clopper-Pearsonův konfidenční interval* CI^{CP} , publikovaný v r. 1934 [7]. (Často se uvádí také jako *exaktní* konfidenční interval. Tento termín – viz sekci 4 – však zde budeme užívat v jiném, obecnějším smyslu.)

Ačkoli se jinak budeme zajímat jen o oboustranné konfidenční intervaly, bude se nám kvůli dalšímu výkladu hodit zavést nejdříve jednostranné varianty Clopper-Pearsonova intervalu.

Jednostranné Clopper-Pearsonovy intervaly mají tvar $[0, p_H(X, n, \alpha)]$ a $[p_D(X, n, \alpha), 1]$. Pro $X = 0$ je $p_D(X, n, \alpha) = 0$ a pro $X = n$ je $p_H(X, n, \alpha) = 1$, jinak jsou $p_D = p_D(X, n, \alpha)$ a $p_H = p_H(X, n, \alpha)$ řešením rovnic

$$\sum_{i=X}^n \binom{n}{i} (p_D)^i (1 - p_D)^{n-i} = \alpha, \quad \sum_{i=0}^X \binom{n}{i} (p_H)^i (1 - p_H)^{n-i} = \alpha.$$

Oboustranný Clopper-Pearsonův interval na hladině spolehlivosti $1 - \alpha$ je pak průnik jednostranných intervalů na hladině $1 - \alpha/2$, tj.

$$CI^{CP}(X, n, \alpha) = [p_D(X, n, \alpha/2), p_H(X, n, \alpha/2)].$$

Snadno nahlédneme, že pravděpodobnost pokrytí skutečné hodnoty parametru p Clopper-Pearsonovým intervalem je vždy rovna alespoň nominální hladině spolehlivosti $1 - \alpha$.

Pamatuji ještě doby, kdy nejpraktičtější metodou „výpočtu“ Clopper-Pearsonova konfidenčního intervalu pro mě bylo vyhledání v Lagových a Likešových tabulkách [10]. Dnes se meze p_D a p_H dají snadno spočítat třeba v Excelu pomocí známých vzorců obsahujících kvantily rozdělení F (viz např. [10]) nebo ještě pohodlněji (s evidentními výjimkami $p_D(0, n, \alpha) = 0$ a $p_H(n, n, \alpha) = 1$) jako

$$p_D(X, n, \alpha) = B(1 - \alpha, X + 1, n - X), \quad p_H(X, n, \alpha) = B(\alpha, X, n - X + 1),$$

kde $B(\alpha, m, k)$ je α -kvantil rozdělení beta s parametry m a k .

3 Nešlo by to pro $X = 0$ lépe?

Oboustranný Clopper-Pearsonův interval je konstruován tak, aby riziko α , že skutečná hodnota p nebude intervalem pokryta, bylo rozděleno na riziko nadhodnocení (dolní mez bude větší než p) a podhodnocení (horní mez bude menší než p) symetricky. Pokrytí skutečného p s pravděpodobností alespoň $1 - \alpha$ však bude zajištěno také tehdy, když riziko α rozdělíme na libovolná nezáporná čísla α_1 a α_2 , kde $\alpha_1 + \alpha_2 = \alpha$, a za konfidenční interval vezmeme $[p_D(X, n, \alpha_1), p_H(X, n, \alpha_2)]$. Pokud v n pokusech není pozorován ani jeden úspěch, tj. $X = 0$, nemusí být člověku příliš jasné, proč riziko α dělit na dvě stejné části $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha/2$, když dolní mez intervalu je 0, takže riziko podhodnocení v tomto případě neexistuje. Jinými slovy, „za α_1 si nic nekoupíme“. Proč ale potom při $X = 0$ pokládat $\alpha_1 = \alpha_2$, nebo vůbec $\alpha_1 > 0$ – není to marnotratné?

Kdybychom při $X = 0$ místo $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha/2$ použili hodnoty $\alpha_1 = 0$ a $\alpha_2 = \alpha$, tj. konstruovali konfidenční interval jako jednostranný, dolní hranice by se nezměnila (byla by stále nulová), ale horní by se snížila, konkrétně z $1 - (\alpha/2)^{1/n}$ na $1 - \alpha^{1/n}$ (např. pro $n = 10$ a $\alpha = 0,05$ z 0,308 na 0,259).

Analogicky můžeme uvažovat o případě $X = n$. Kdybychom v takové situaci volili $\alpha_1 = \alpha$ a $\alpha_2 = 0$, byl by konfidenční interval kratší – horní hranice by byla stále rovna 1, ale dolní by se zvýšila z $(\alpha/2)^{1/n}$ na $\alpha^{1/n}$.

Modifikovaný Clopper-Pearsonův konfidenční interval $CI^{mCP}(X, n, \alpha)$ by tedy byl pro $0 < X < n$ shodný s $CI^{CP}(X, n, \alpha)$, ale pro $X = 0$ a $X = n$ by bylo $CI^{mCP}(X, n, \alpha) = CI^{CP}(X, n, 2\alpha)$. Je takový návrh korektní v tom smyslu, že je garantována pravděpodobnost pokrytí skutečného p alespoň $1 - \alpha$? Uvidíme po malé vsuvce.

V dalším textu budeme používat značení $cover(p)$ pro pravděpodobnost pokrytí skutečného p konfidenčním intervalem CI , tj. $cover(p) = P_p(p \in CI)$. Malý objev, který pro mě téma článku učinil přitažlivějším, spočívá v tom, že se hodnoty $cover(p)$ (nejen pro CI^{CP} nebo CI^{mCP} , ale pro konfidenční

interval jakéhokoli typu) dají snadno numericky spočítat a graficky znázornit pomocí vzorce¹

$$\text{cover}^{CI}(p) = \sum_{i=0}^n I[CI(i, n, \alpha)] \cdot \binom{n}{i} p^i (1-p)^{n-i}, \quad (2)$$

kde $I[A]$ je charakteristická funkce (indikátor) množiny A .

Ale zpět k modifikaci Clopper-Pearsonova intervalu. Jak dopadly experimenty pomocí (2) v R? Prvních několik zkoušek vypadalo nadějně – pro $\alpha = 0,05$ a $n \leq 4$ neklesá $\text{cover}(p)$ pod $1 - \alpha$, viz obr. 1a-c. Další příklady – viz obr. 1d-f – však ukazují, že obecným důkazem nerovnosti $\text{cover}(p) \geq 1 - \alpha$ není nutno se namáhat.

Takže *nápad korektní není*. Jak to jde dohromady s tím, že můžeme riziko α na α_1 a α_2 za podmínky $\alpha_1 + \alpha_2 = \alpha$ rozložit libovolně? Dobře: Rozklad skutečně může být libovolný, pokud je pro všechny hodnoty X stejný. Nelze jen bez omezení volit α_1, α_2 různě podle počtu úspěchů.

Nápad pochopitelně, jak se ukázalo, měli dříve i jiní, jak se lze přesvědčit např. na www.cytel.com². V sekci častých dotazů se tam dlouholetý uživatel softwaru StatXact ptá, proč současná verze programu počítá konfidenční interval pro parametr p binomického rozdělení při $X = 0$ a $X = n$ jako oboustranný. Z odpovědi: Dříve skutečně byla implementovaná modifikace pro $X = 0$ a $X = n$, ale v současné verzi byl takový přístup opuštěn, protože by konfidenční interval nebyl konsistentní s oboustranným exaktním testem hypotézy, že p je rovno dané konstantě. (Např. při $X = n = 5$ je dosažená hladina oboustranného testu hypotézy $p = 1/2$ rovna 0,0625, takže hypotéza se na hladině 0,05 nezamítá. Dolní hranice „normálního“ konfidenčního intervalu na hladině spolehlivosti 0,95 je 0,478, tj. 1/2 ve shodě s testem leží v intervalu. Modifikovaný konfidenční interval by měl dolní hranici 0,549, takže 1/2 leží mimo interval, v rozporu s testem.) Bez zajímavosti není závěr odpovědi: *Ani na vašem přístupu však není nic špatného. Dáváte-li přednost tomu použít při extrémním výsledku celou chybu na jeden chvost, můžete toho dosáhnout tak, že změníte hladinu spolehlivosti z $1 - \alpha$ na $1 - 2\alpha$.*

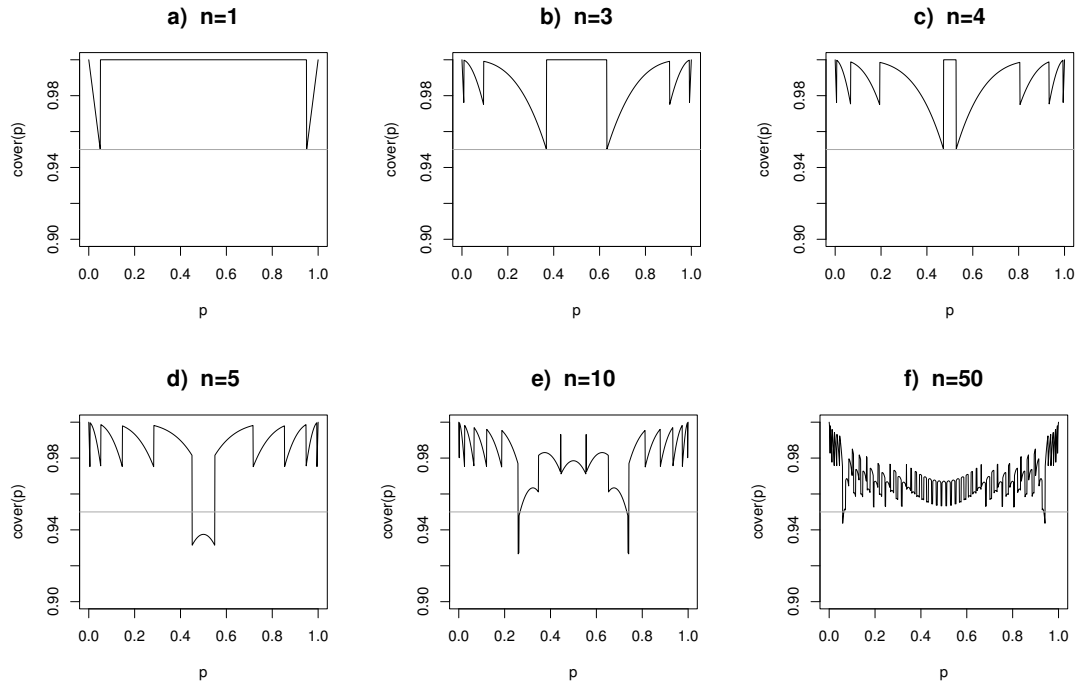
Není na něm nic špatného? Ani bych neřekl, viz obr. 1d-f.

4 Co o konfidenčních intervalech pro p možná nevíte

Konfidenční intervaly pro parametr p binomického rozdělení nejsou – navzdory letopočtům 1812 a 1934 v rodných listech metod zmiňovaných v sekci 2 – uzavřenou kapitolou statistiky. Proberme ve stručnosti některé poznatky z literatury.

¹Během Robustu 2006 mě Josef Tvrđík upozornil na Zvárův článek [14]. Autor reaguje na diplomovou práci, v níž diplomant vyšetřoval hladiny testů pomocí simulací. V [14] byl zřejmě použit, i když to není explicitně uvedeno, vzorec pro hladinu testu analogický vzorci (2), podle kterého lze hladiny prostě spočítat, takže simulace jsou zbytečné.

²Cytel je softwarové firma Cyruse Mehty, který představuje jedno ze současných „velkých jmen“ v oblasti exaktních statistických testů a je autorem programu StatXact.



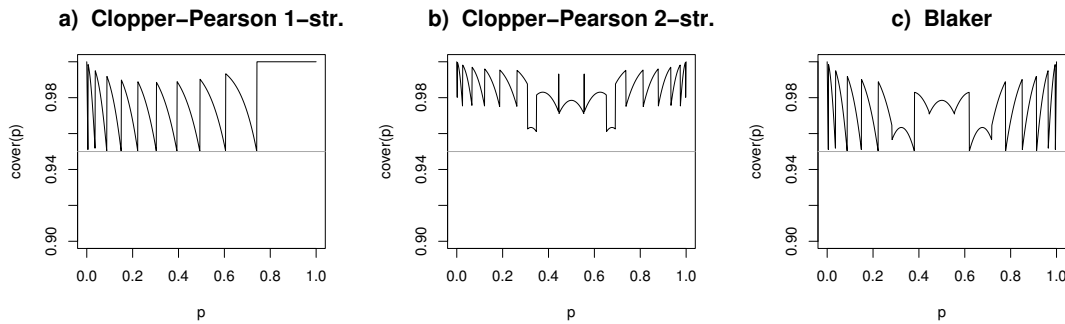
Obrázek 1: Pravděpodobnost pokrytí p intervalem CI^{mCP} na hladině spolehlivosti 95 % pro $n = 1, 3, 4, 5, 10, 50$.

Jak je vidět ze vzorce (2), funkce $cover(p)$ je po částech polynomiální, a jako taková se nemůže všude rovnat $1 - \alpha$ a nutně osciluje³. Pak je žádoucí, aby byla konstantě $1 - \alpha$ alespoň dosti blízká. („Kvalita“ konfidenčního intervalu se zpravidla posuzuje podle maximálních i různým způsobem „zprůměrovaných“ odchylek funkce $cover(p)$ od $1 - \alpha$, viz např. [1].) Nepanuje ovšem shoda mezi zastánci tzv. *exaktních* a *přibližných* konfidenčních intervalů. První trvají na tom, že musí všude platit $cover(p) \geq 1 - \alpha$ a funkci $cover(p)$ je třeba minimalizovat v rámci tohoto omezení. Druzí považují kladné odchylky od $1 - \alpha$ za obdobnou chybu jako odchylky záporné a spokojují se s tím, že funkce $cover(p)$ kolem $1 - \alpha$ „spravedlivě“ kolísá. Nebudu se snažit spor mezi oběma tábory „soudcovat“ a zmíním se o metodách obou typů.

Podívejme se nejdříve na *exaktní* konfidenční intervaly.

Interval $CI^{CP}(X, n, \alpha) = [p_D, p_H]$ je „nehospodárný“ tím, že místo postačujícího $P_p(p < p_D \text{ nebo } p_H < p) \leq \alpha$ zachovává silnější podmínky $P_p(p < p_D) \leq \alpha/2$ a $P_p(p_H < p) \leq \alpha/2$. Funkce $cover(p)$ jednostranného intervalu $[p_D(X, n, \alpha), 1]$ (stejně jako $[0, p_H(X, n, \alpha)]$) hodnoty $1 - \alpha$ v některých bodech dosahuje, viz obr. 2a. Pro *oboustranný* interval CI^{CP} však typicky platí $\inf_{p \in [0,1]} cover(p) > 1 - \alpha$, viz obr. 2b.

³Platí to alespoň v případě *nerandomizovaných* konfidenčních intervalů. Nejsilnější výsledky ohledně randomizovaných konfidenčních intervalů pro p viz např. [3] a práce tam citované. Stejněměrně nejkratší nestranný konfidenční interval, to zní hrdě, ale z pohledu praktika je to vzhledem k randomizaci – řečeno s Otou Pavlem [11] – „pumpurdentlich“.



Obrázek 2: Pravděpodobnost pokrytí p při $n = 10$ a $1 - \alpha = 0,95$. a) Jednostranný Clopper-Pearsonův interval $[p_D, 1]$, b) oboustranný Clopper-Pearsonův interval, c) Blakerův interval.

Clopper-Pearsonův interval se nedá korektně zlepšit způsobem navrženým v sekci 3, což ale ještě neznamená, že se nedá zlepšit vůbec. Od 50. let 20. století se různí autoři zabývali konfidenčními intervaly, které dostaneme invertováním *oboustranných* testů hypotézy $p = p_0$ (takový test není dán jednoznačně), tj. jako množinu těch p_0 , pro která se hypotéza nezamítá. (Clopper-Pearsonův interval invertuje dvojici jednostranných testů na hladině $\alpha/2$.)

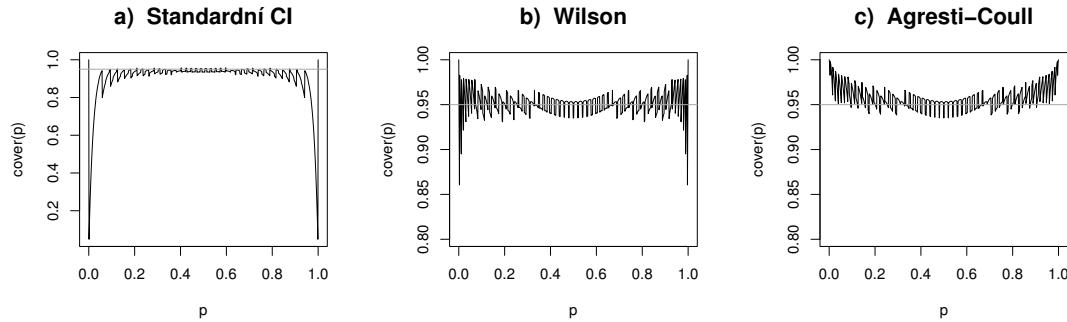
Sterne [12] a Crow [8] navrhli exaktní konfidenční interval, který je řešením optimalizační úlohy: součet délek $n + 1$ intervalů $CI(i, n, \alpha)$ pro $i = 0, \dots, n$ je nejmenší možný. Na www.univet.hu/users/jreiczig je ke stažení program v binárním tvaru na výpočet Sterne-Crowova intervalu napsaný J. Reiczigelem. Blyth a Still [4] a Casella [6] přicházejí s dalšími návrhy, které eliminují některé „nelogické“ vlastnosti Sterneho a Crowových intervalů (konkrétně viz [6]). Výpočet Blyth-Still-Casellových intervalů je součástí komerčního programu StatXact⁴.

Blaker [2] sice neoptimalizuje délku intervalu, jeho metoda (teoretické pozadí viz citovaná práce) má ale oproti výše uvedeným jiné výhody: Blakerův interval $CI^B(i, n, \alpha)$ je vždy podmnožinou intervalu $CI^{CP}(i, n, \alpha)$ a výpočet je relativně jednoduchý – součástí článku [2] je krátký program v jazyce S (resp. R). Ukázka funkce $cover(p)$ Blakerova intervalu je na obr. 2c.

Závěrem ještě krátce o konfidenčních intervalech *přibližných*.

Standardní konfidenční interval je v učebnicích i aplikacích všudypřítomný. Kdyby však měl být vyslyšen článek [5] včetně diskuse, do níž přispěla řada autorů zvůčných jmen, musela by se daná metoda přestat používat i vyučovat. Citovaná práce není jediná ani první, která standardní interval kritizuje, činí to jen zevrubně a velmi tvrdě. Standardní konfidenčnímu intervalu se vytýká, že pravděpodobnost pokrytí skutečného p se chová v závislosti na n a p chaoticky a příliš často je nedostatečná. Ukázka funkce $cover(p)$ pro

⁴Metoda je tím pádem praktickým statistikům k dispozici. Tak alespoň v diskusi k článku [5] soudí C. Mehta, autor programu a majitel firmy, která s programem obchoduje.



Obrázek 3: Pravděpodobnost pokrytí p při $n = 50$ a $1 - \alpha = 0,95$. a) Standardní interval b) Wilsonův interval, c) Agresti-Coullův interval.

standardní konfidenční interval je na obr. 3a. Navíc žádné z doporučení v literatuře, kdy je užití standardního intervalu „bezpečné“, není opodstatněné. (Proto také jsem si v sekci 2 nedal práci určitější doporučení vyslovit.) Pro podrobnosti odkazují na [5].

Standardní interval CI^{st} invertuje Waldův test hypotézy $p = p_0$ založený na porovnání statistiky $(\hat{p} - p_0)/SE(\hat{p}) = (\hat{p} - p_0)/\sqrt{\hat{p}(1 - \hat{p})/n}$, s kvantily normovaného normálního rozdělení. Invertujeme-li místo Waldova testu skórový test porovnávající s normálními kvantily statistiku $(\hat{p} - p_0)/SE(p_0) = (\hat{p} - p_0)/\sqrt{p_0(1 - p_0)/n}$, dostaneme tzv. *Wilsonův konfidenční interval*, který můžeme při stejném značení jako v (1) zapsat například ve tvaru

$$CI^W(X, n, \alpha) = \left(\hat{p} + \frac{z_{\alpha/2}^2}{2n} \pm z_{\alpha/2} \sqrt{\frac{\hat{p}(1 - \hat{p}) + z_{\alpha/2}^2/4n}{n}} \right) \cdot \frac{n}{n + z_{\alpha/2}^2}.$$

Wilsonův interval na rozdíl od standardního intervalu nikdy nedegeneruje na jediný bod a jeho meze leží vždy v intervalu $[0, 1]$ (na hranici jen pro $X = 0$ a $X = n$). Především ale CI^W daleko lépe než CI^{st} pokrývá skutečné p – viz alespoň ukázkou na obr. 3b. Chování funkce $cover(p)$ blízko 0 a 1, kde v úzkém rozmezí „ustřeluje“ dolů, lze případně zlepšit modifikací konfidenčního intervalu pro několik nejmenších a největších hodnot X („naroubováním“ konfidenčních mezí pro parametr Poissonova rozdělení, viz [5]). Wilsonův interval není žádná „žhavá novinka“, Wilson jej publikoval již v r. 1927 [13], ale do učebnic a do praxe proniká jen velmi pomalu. Práce [5], [1] jej doporučují jako minimálně jednu z nejlepších alternativ standardního intervalu.

Střed Wilsonova intervalu je číslo $\tilde{p} = \tilde{X}/\tilde{n}$, kde $\tilde{X} = X + z_{\alpha/2}^2/2$ a $\tilde{n} = n + z_{\alpha/2}^2$, tedy relativní frekvence „úspěchu“ poté, co bychom k reálným datům přidali $z_{\alpha/2}^2/2$ imaginárních „pseudo-úspěchů“ a stejný počet „pseudo-neúspěchů“. Pro $\alpha = 0,05$ je celkový počet takových „pseudo-pozorování“ roven $3,84 \approx 4$. Agresti a Coull [1] navrhují zvláště pro výuku, kde nejvíce záleží na jednoduchosti a „průhlednosti“ vzorců, interval CI^{AC} , který je aproximací Wilsonova intervalu a počítá se jako standardní interval CI^{st}

s tím rozdílem, že se v (1) místo n použije $\tilde{n} = n + 4$ a $p = X/n$ se nahradí $\tilde{p} = (X + 2)/\tilde{n}$. Interval CI^{AC} je při $\alpha = 0,05$ o něco delší a konzervativnější než Wilsonův interval. Pravděpodobnost pokrytí p blízkého 0 nebo 1 je dostatečná – viz ukázkou na obr. 3c. Interval CI^{AC} může „přetéct“ mimo meze 0 a 1, ale na rozdíl od CI^{st} nikdy nedegeneruje na jediný bod. Práce [5] doporučuje interval CI^{AC} jako jeden z nejlepších pro $n \geq 40$.

Pro informace o dalších typech přibližných konfidenčních intervalů je vzhledem k omezenému rozsahu příspěvku třeba odkázat na literaturu [5].

Reference

- [1] Agresti A., Coull A. (1998). *Approximate is better than “exact” for interval estimation of binomial proportions*. Am. Statistician **52**, 119–126.
- [2] Blaker H. (2000). *Confidence curves and improved exact confidence intervals for discrete distributions*. Canadian J. of Statistics **28**, 783–798. Oprava: Canadian J. of Statistics **29**, 681–681, popř. www.stat.ufl.edu/~aa/cda/R/one_sample/R1.
- [3] Blyth C.R., Hutchinson D.W. (1960). *Table of Neyman-shortest unbiased confidence intervals for the binomial parameter*. Biometrika **47**, 381–391.
- [4] Blyth C.R., Still H.A. (1983). *Binomial confidence intervals*. JASA **78**, 108–116.
- [5] Brown L.D., Cai T.T., DasGupta A. (2001). *Interval estimation for a binomial proportion*. Statistical Science **16**, 101–133.
- [6] Casella G. (1986). *Refining binomial confidence intervals*. Canadian J. of Statistics **14**, 113–129.
- [7] Clopper C.J., Pearson E.S. (1934). *The use of confidence or fiducial limits illustrated in the case of the binomial*. Biometrika **26**, 404–413.
- [8] Crow E.L. (1956). *Confidence intervals for a proportion*. Biometrika **43**, 423–435.
- [9] Laplace P.S. (1812). *Théorie analytique des probabilités*. Courcier, Paris.
- [10] Likeš J., Laga J. (1978). *Základní statistické tabulky*. SNTL, Praha.
- [11] Pavel O. (1974). *Jak jsem potkal ryby*. Československý spisovatel, Praha.
- [12] Sterne T.E. (1954). *Some remarks on confidence or fiducial limits*. Biometrika **41**, 117–129.
- [13] Wilson E. B. (1927). *Probable inference, the law of succession, and statistical inference*. JASA **22**, 209–212.
- [14] Zvára K. (1995) *Skutečná hladina testů o pravděpodobnosti v binomickém rozdělení*. Informační bulletin České statistické společnosti **6**, 27–31.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem ME 701 MŠMT ČR a výzkumným záměrem AV0Z10300504.

Adresa: J. Klaschka, ÚI AV ČR, Pod Vodárenskou věží 2, 18207 Praha 8

E-mail: klaschka@cs.cas.cz

A NOTE ON PARAMETER ESTIMATION IN REGRESSION MODELS FOR CASE-COHORT DATA

Petr Klášterecký, Michal Kulich

Keywords: Case-cohort study, linear transformation model, estimating equations, survival analysis.

Abstract: The class of linear transformation models provides a general framework for analysing censored time-to-event data. With T being the failure time and Z the covariate vector, the linear transformation model assumes that $H(T) = -\beta'Z + \varepsilon$, where H is an unknown monotone transformation function, ε is a random variable independent of Z with a known distribution, and β is an unknown vector of regression parameters. This class includes the well known proportional hazards and proportional odds models as special cases. A unified estimation procedure motivated by the counting process approach and martingale representation was developed by Chen et al. [2]. A modification of the estimating equations for case-cohort data was proposed by Lu and Tsiatis who suggested weighting the equations with inverse selection probabilities [5]. However, their method is seriously biased when applied in practically relevant settings. We argue that a new estimation procedure should be developed.

1 Linear transformation models

Censored time-to-event data appear as an outcome in many experimental and observational studies and are frequently analyzed by regression models. Theoretical and practical issues in regression analysis of censored data have been the topic of many papers, including the famous Cox's 1972 paper on the proportional hazards model [3]. A useful general family of regression models for censored data, which includes the Cox proportional hazards model as a special case, is the class of linear transformation models. These models assume that the survival time T follows the equation

$$H_0(T) = -\beta'_0 Z + \varepsilon, \quad (1)$$

where H_0 is an unknown monotone transformation function such that $H_0(0) = -\infty$, β_0 is an unknown p -dimensional regression parameter, Z is a p -vector of covariates, and ε is a random variable with a known distribution, independent of Z . Specific models of this class are obtained by choosing a particular distribution of ε . Both the proportional hazards and the proportional odds models are special cases of model (1). The former is obtained when ε follows the extreme-value distribution; the latter arises from the standard logistic distribution.

Let us show how the parameters β_0 and H_0 are estimated when all data is completely observed. Let $i = 1 \dots n$ index the population of all study subjects and assume that $(T_i, C_i, \tilde{T}_i, \delta_i, Z_i)$ are independent copies of $(T, C, \tilde{T}, \delta, Z)$, where T is the failure time, C is the censoring time, $\tilde{T} = \min(T, C)$, and $\delta = I_{[T \leq C]}$. Denote by $\lambda(\cdot)$ the known hazard function of ε defined on $(-\infty, \infty)$, and let $\Lambda(t) = \int_{-\infty}^t \lambda(s) ds$. Finally, let $Y(t) = I_{[\tilde{T} \geq t]}$, $N(t) = \delta I_{[\tilde{T} \leq t]}$, and

$$M(t) = N(t) - \int_0^t Y(s) d\Lambda\{\beta'_0 Z + H_0(s)\}.$$

Chen et al. [2] developed a unified estimation procedure for model (1) based on the estimating equations

$$U(\beta, H) = \sum_{i=1}^n \int_0^{\infty} Z_i [dN_i(t) - Y_i(t) d\Lambda\{\beta' Z_i + H(t)\}] = 0 \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^n [dN_i(t) - Y_i(t) d\Lambda\{\beta' Z_i + H(t)\}] = 0 \quad (t \geq 0), \quad (3)$$

Chen et al. show that the resulting estimator \hat{H} of H_0 is a nondecreasing step function with jumps in the observed failure times and that the estimator $\hat{\beta}$ of β_0 is consistent and asymptotically normal under suitable regularity conditions, with a closed-form variance. Although the above equations have to be solved iteratively, standard numerical procedures such as the Newton-Raphson algorithm work quite well and reasonably fast.

In the special case of the proportional hazards model, equations (2) and (3) reduce into the Cox's partial likelihood score equation. Thus, the method of Chen et al. can be viewed as a generalization of partial likelihood methods.

2 Linear transformation models for case-cohort studies

The case-cohort design was introduced by Prentice in 1986 [6]. The main idea is to sample individuals from the study population (here called the *full cohort*) in order to reduce data collection costs, especially when there are relatively few events compared to the size of the cohort. Only the subjects experiencing the event (cases) and a subcohort consisting of the sampled individuals are followed during the study and have the covariate values recorded. The aim of the analysis is to consistently estimate the regression parameters of the selected model, e.g. one of the linear transformation models.

The methods for analysing case-cohort data are usually modifications of the corresponding procedures for complete data. The key problem is to eliminate the information which is not observed due to the case-cohort design and to account properly for the sampling scheme. A typical way of dealing with these issues is to introduce weighting functions or constants that give zero weight to all subjects not sampled into the study and positive weight to

all sampled cases and controls. Using different weight functions and sampling schemes leads to different types of estimators, see [4] for a more detailed overview.

A modification of the estimating equations (2) and (3) to case-cohort data was proposed by Lu and Tsiatis [5] who suggested weighting the equations with inverse selection probabilities. The modified estimating equations have the form

$$\sum_{i=1}^n \int_0^{\infty} Z_i \pi_i [dN_i(t) - Y_i(t) d\Lambda\{\beta' Z_i + H(t)\}] = 0 \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^n \pi_i [dN_i(t) - Y_i(t) d\Lambda\{\beta' Z_i + H(t)\}] = 0 \quad (t \geq 0), \quad (5)$$

where the weights π_i are the inverse selection probabilities for each individual in the full cohort. Specifically, $\pi_i = \delta_i + (1 - \delta_i)\xi_i/p$, where ξ_i is the subcohort indicator (1 for subjects included in the subcohort and 0 otherwise) and $p = P(\xi_i = 1)$ is the subcohort sampling probability. The full cohort estimator given by (2) and (3) is obtained by setting $\pi_i = p = 1$, $i = 1, \dots, n$. Under the case-cohort design, the proposed weights eliminate all unobserved data.

The resulting estimator \hat{H} of H_0 is again a step function with jumps in the observed failure times. Similarly to the full cohort case, the estimator of β_0 is consistent and asymptotically normal (see [5]). Lu and Tsiatis illustrate these theoretical results on several simulated examples with a pair of uncorrelated covariates, where the estimating procedure seems to perform rather well. We investigated the performance of the estimator more generally by extending the simulation studies of Lu and Tsiatis to other practically relevant settings.

3 Computational algorithms and simulation studies

3.1 The estimating procedure

Let $0 < t_1 < \dots < t_K < \infty$ be the K observed distinct failure times in the full cohort; all the failure times are observed with probability one in a case-cohort study. The computational algorithm we used in our simulations is an adaptation of the procedure suggested by Chen et al. in [2]; the same procedure was used by Lu and Tsiatis in [5]. The algorithm “shuttles” between estimation of H and β . It can be summarized as follows:

Step 1: Fix β at an initial value $\beta^{(0)}$.

Step 2: Compute $H^{(0)}(t_1), \dots, H^{(0)}(t_K)$ by solving the equations

$$\sum_{i=1}^n \pi_i Y_i(t_k) \Lambda\{H(t_k) + \beta' Z_i\} = 1 + \sum_{i=1}^n \pi_i Y_i(t_k) \Lambda\{H(t_k-) + \beta' Z_i\}$$

for $H^{(0)}(t_k)$, $k = 1, \dots, K$, with $\beta = \beta^{(0)}$. Recall that $\hat{H}(\cdot)$ is a non-decreasing step function which only jumps at the observed failure times.

We set $H^{(0)}(t_1-) = -\infty$, reflecting the fact that $H(0) = -\infty$. The last sum thus vanishes in the first equation.

Step 3: Update the estimate of β by solving equation (4) for β with H fixed at the $H^{(0)}$ obtained in Step 2.

Step 4: Set $\beta^{(0)}$ to the new value obtained in Step 3 and repeat steps 2 and 3 until convergence is reached.

Except for certain special cases, solving the nonlinear equations in steps 2 and 3 requires an iterative procedure. The modified Newton-Raphson algorithm with step halving was used for this task and its performance was generally quite good. Chen et al. [2] proposed an approximation for estimating $H(\cdot)$ based on the first order differences, which only requires direct calculations. We found that the inaccuracy induced in this way overrides the advantage of simplicity.

3.2 Simulation methodology and results

Lu and Tsiatis [5] report good performance of their estimator for two uncorrelated covariates with uniform/Bernoulli distribution. We extended their results to other settings such as correlated covariates with truncated normal distribution.

We generated failure times from the proportional odds model, which arises as a special case of the linear transformation model with hazard function of ε given by $\lambda(t) = \exp(t)/(1 + \exp(t))$. We set $H(t) = \log(\exp(t) - 1)$. Censoring times were independent of the covariates and uniformly distributed over the interval $(0, c)$ where c was chosen so that the desired probability of censoring was achieved. We considered cohorts consisting of 1000 subjects, set the failure rate to be 10% and selected the subcohort by independent Bernoulli sampling so that the expected number of subcohort controls was equal to the expected number of failures (the subcohort selection probability was $p = 0.1150$). We generated 1000 full cohorts with complete data, selected the subcohort, and calculated the full cohort estimator of Chen et al. (2)–(3) using all data and the case-cohort estimator of Lu and Tsiatis (4)–(5) which only uses covariate data on the cases and the subcohort.

In the first set of simulations, two independent covariates $Z_1 \sim U(0, 1)$ and $Z_2 \sim \text{Alt}(0.35)$ were generated. The true regression parameters were $\beta_1 = 1$ and $\beta_2 = -1$. This is one of the settings Lu and Tsiatis chose for the simulation studies reported in [5]. Our results confirm that the estimator performs well in this case (see Table 3.2 (a)). The parameter estimates are only slightly biased, the standard errors are well estimated, the confidence interval coverage is good, and the asymptotic normal distribution well approximates the empirical distribution of the simulated estimates (Figure 1). The standard deviations of the estimates are higher than those for the full cohort estimates; this is due to the incompletely observed data in the case-cohort design.

(a) Independent covariates

Param.	True value	Mean Estim.	Empirical std. err.	Mean est. std. err.	95% CI coverage
Full cohort estimator					
β_1	1.0	1.004	0.362	0.380	0.966
β_2	-1.0	-1.004	0.240	0.230	0.950
Case-cohort estimator					
β_1	1.0	1.026	0.573	0.577	0.965
β_2	-1.0	-1.021	0.345	0.327	0.941

(b) Dependent covariates

Param.	True value	Mean Estim.	Empirical std. err.	Mean est. std. err.	95% CI coverage
Full cohort estimator					
β_1	2.3	2.316	0.282	0.281	0.953
β_2	0.7	0.699	0.244	0.246	0.955
β_3	2.9	2.922	0.577	0.570	0.948
Case-cohort estimator					
β_1	2.3	2.423	0.530	0.468	0.909
β_2	0.7	0.750	0.452	0.412	0.924
β_3	2.9	3.066	1.085	0.941	0.894

Table 1: Simulation summaries.

In the second set of simulations, we considered three mutually correlated covariates: a dichotomous covariate $Z_1 \sim \text{Alt}(0.35)$ and two continuous covariates. The conditional distribution of Z_2 given Z_1 was normal with mean $-0.3Z_1$ and variance $(0.5 + 0.2Z_1)^2$; the conditional distribution of Z_3 given Z_1 and Z_2 was normal with mean $-0.3Z_1 + 0.3Z_2$ and variance $(0.1 + 0.1Z_1 + 0.1|Z_2|)^2$. The conditional normal distributions for Z_2 and Z_3 were truncated 3 standard deviations away from the mean because the asymptotic theory presented by Lu and Tsiatis [5] assumed bounded covariates. The true parameter values were $\beta_1 = 2.3$, $\beta_2 = 0.7$, and $\beta_3 = 2.9$. All other settings were the same as in the previous simulation study.

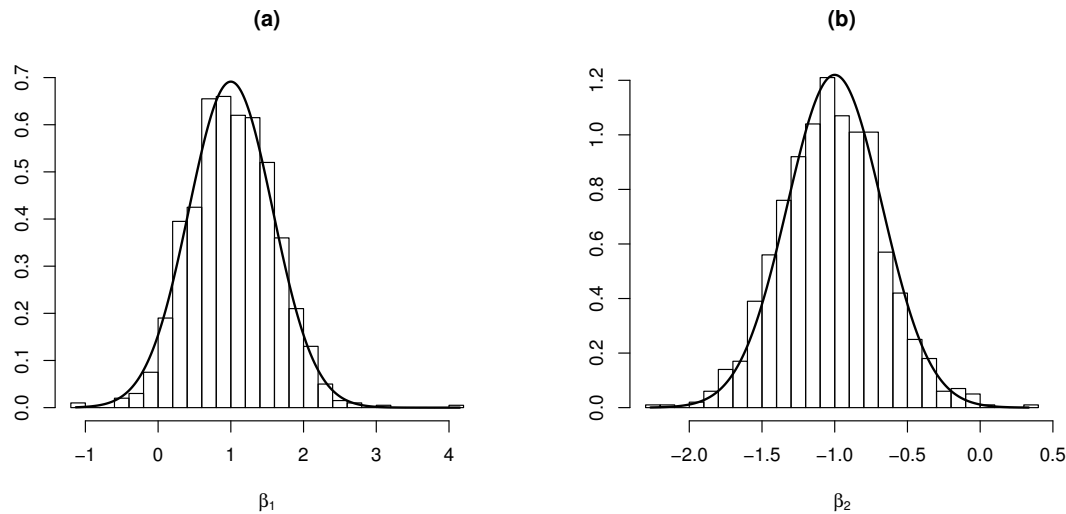


Figure 1: Relative frequency histograms of simulated case-cohort estimates of (a) β_1 and (b) β_2 , the case of independent covariates. For comparison, the densities of the theoretical asymptotic normal distributions are shown.

This time, the performance of the estimator proposed by Lu and Tsiatis was much worse (Table 3.2 (b)). While the full cohort estimator of Chen et al. behaves equally well as in the case of two independent covariates, the case-cohort estimator suffers from substantial biases, underestimated standard errors, and poor confidence interval coverage. The histograms of the simulated estimates (Figure 2) reveal noticeable skewness towards the upper tail of the distribution for all the three parameter estimates.

In additional unreported simulation studies, we varied the full cohort size from 5000 to 500,000 subjects while decreasing the proportion of cases to 1% and sampling 1 to 5 subcohort controls per case. In general, we saw that the performance of the case-cohort estimator was worse when the subcohort sampling fraction was lower, regardless of the absolute subcohort size. This indicates that the problem is not a slow convergence to the limiting asymptotic distribution but rather the low subcohort sampling probability. This is not entirely surprising as the asymptotic theory for inverse probability weighted estimators assumes that the sampling probability must be bounded away from zero. Even when the subcohort sampling probability is relatively low, the case-cohort estimator of Lu and Tsiatis behaves quite well as long as the covariates are independent or the covariate effects are small.

4 Conclusions

The case-cohort design is most useful when a very large population yields just a few cases of a relatively rare disease or condition. This is where it is most frequently used in practice. The full cohort often includes hundreds of

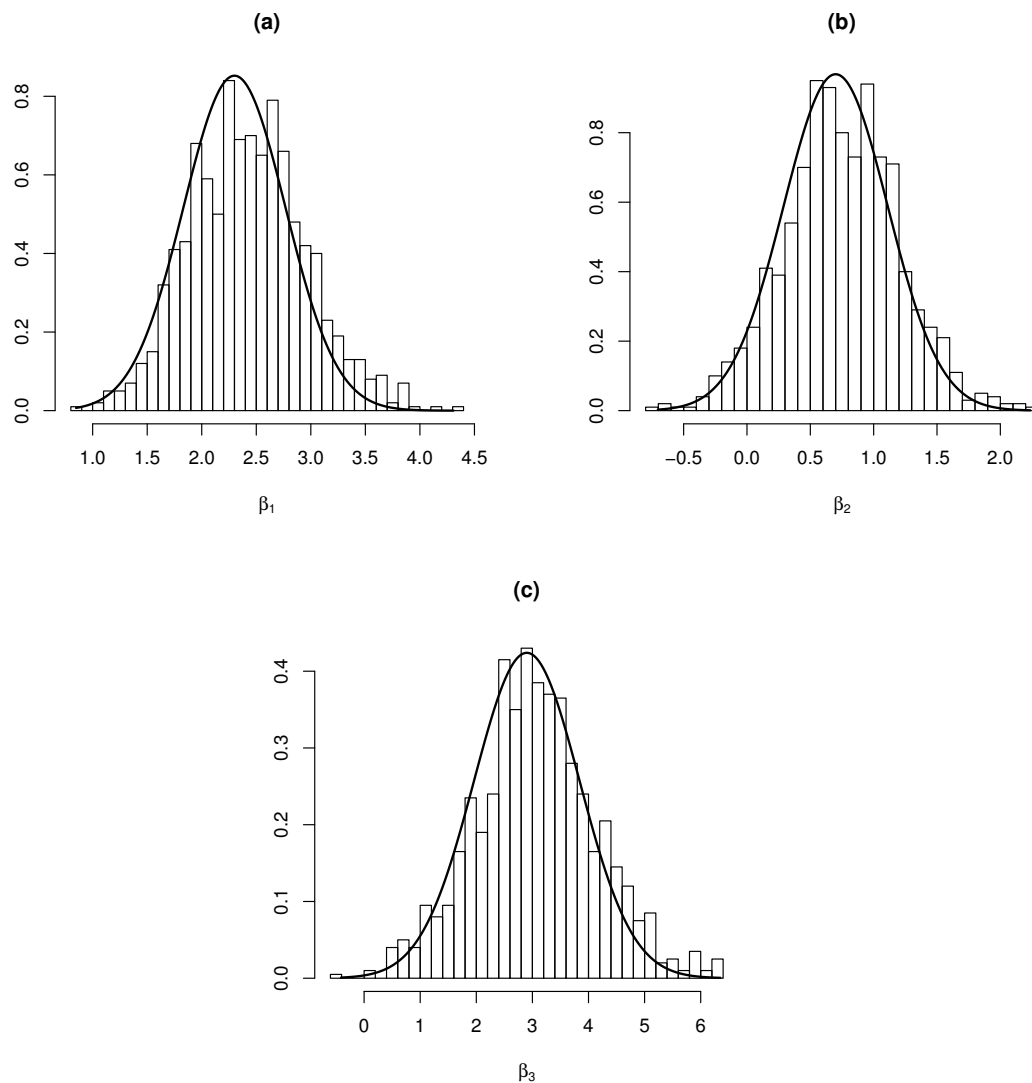


Figure 2: Relative frequency histograms of simulated case-cohort estimates of (a) β_1 , (b) β_2 , and (c) β_3 , the case of correlated covariates. For comparison, the densities of the theoretical asymptotic normal distributions are shown.

thousands of people and the number of cases is in the hundreds. The size of the subcohort is usually comparable to or somewhat larger than the number of cases. This frequent scenario generates exactly the setting where the case-cohort estimator proposed by Lu and Tsiatis encounters serious performance problems. The fact that it works better with independent covariates is not consoling because independent covariates rarely occur in an observational study. Though a similar problem can be seen with the proportional hazards model [1], it seems to be even more profound for the proportional odds model (and presumably other linear transformation models). Thus we recommend that the estimator proposed by Lu and Tsiatis should not be used in practice. Instead, a new estimator that circumvents the issues inherent in the inverse probability weighted approach should be developed.

Reference

- [1] Chen H.Y. (2001). *Fitting semiparametric transformation regression models to data from a modified case-cohort design*. *Biometrika* **88**, 255–268.
- [2] Chen K., Jin Z., Ying Z. (2002). *Semiparametric analysis of transformation models with censored data*. *Biometrika* **89**, 659–668.
- [3] Cox D.R. (1972). *Regression models and life-tables*. *J. R. Statist. Soc. B* **34**, 187–220.
- [4] Kulich M., Lin D.Y. (2004). *Improving the efficiency of relative-risk estimation in case-cohort studies*. *JASA* **99**, 832–844.
- [5] Lu W., Tsiatis A.A. (2005). *Semiparametric transformation models for the case-cohort study*. *Biometrika*, to appear in 2006.
- [6] Prentice R.L. (1986). *A case-control design for epidemiologic cohort studies and disease prevention trials*. *Biometrika* **73**, 1–11.

Acknowledgement: This work was partially supported by the grant GAČR 201/05/H007 and by the research project MSM 0021620839.

Address: P. Klášterecký, M. Kulich, Charles University in Prague,
Department of Probability and Mathematical Statistics, Sokolovská 83,
186 75 Praha 8

E-mail: klaster@karlin.mff.cuni.cz, kulich@karlin.mff.cuni.cz

VOLBA OPTIMÁLNÍ ŠÍŘKY OKNA PŘI JÁDROVÝCH ODHADĚCH REGRESNÍ FUNKCE

Jan Kolářek

Klíčová slova: neparametrické odhady, regresní funkce, jádro, optimální šířka okna, Fourierova transformace

Abstrakt: V oblasti neparametrických metod odhadu regresní funkce představují metody jádrového vyhlazování jednu z neúčinnějších vyhlazovacích technik. Kvalita jádrových odhadů regresní funkce závisí především na šířce vyhlazovacího okna, která řídí hladkost odhadu. Tento faktor nejvíce ovlivňuje výsledný odhad a jeho volba je zásadním problémem ve vyhlazovacích metodách. Cílem tohoto příspěvku je shrnout dosud známé metody pro odhad optimální šířky okna a uvést některé další možné přístupy k této problematice. Dále bude provedeno srovnání uvedených metod na simulovaných i reálných datech.

1 Regresní model, jádra

Uvažujme standardní regresní model s pevným plánem

$$Y_i = m(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 0, \dots, T-1, \quad T \in \mathbb{N}, \quad (1)$$

kde x_i , $i = 0, \dots, T-1$, jsou uspořádané „pevné“ body měření a ε_i , $i = 0, \dots, T-1$, jsou chyby měření, o nichž se předpokládá, že jsou nezávislé náhodné veličiny mající stejné rozdělení a splňující podmínky

$$E(\varepsilon_i) = 0, \quad \text{var}(\varepsilon_i) = \sigma^2 > 0, \quad i = 0, \dots, T-1.$$

Pro jednoduchost se předpokládá, že body x_i jsou ekvidistantně rozloženy na intervalu $[0, 1]$, tj. $x_i = i/T$, $i = 0, \dots, T-1$.

Označme $Lip[a, b]$ třídu spojitých funkcí na intervalu $[a, b]$ splňujících nerovnost

$$|g(x) - g(y)| \leq L|x - y|, \quad \forall x, y \in [a, b], \quad L > 0, \quad L \text{ je konstanta.}$$

Definice. Nechť κ je sudé celé číslo takové, že $\kappa \geq 2$. Funkci $K \in Lip[-1, 1]$, nosič(K) = $[-1, 1]$, splňující podmínky

$$(i) \quad K(-1) = K(1) = 0$$

$$(ii) \quad \int_{-1}^1 x^j K(x) dx = \begin{cases} 0, & 0 < j < \kappa \\ 1, & j = 0 \\ \beta_\kappa \neq 0, & j = \kappa, \end{cases}$$

nazýváme *jádrem* řádu κ a třídu všech takových jader značíme $S_{0\kappa}$.

2 Jádrové odhady

Nechť $K \in S_{0\kappa}$, κ – sudé, položíme $K_h(\cdot) = \frac{1}{h}K(\frac{\cdot}{h})$, h je šířka vyhlazovacího okna. Mezi nejznámější typy jádrových odhadů regresní funkce patří:

1. Nadarayovy – Watsonovy odhady (1964)

$$\hat{m}_{NW}(x; h) = \frac{\sum_{i=0}^{T-1} K_h(x_i - x) Y_i}{\sum_{i=0}^{T-1} K_h(x - x_i)}$$

2. Lokální lineární estimátory (Stone 1977, Cleveland 1979)

$$\hat{m}_{LL}(x; h) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} \frac{\{\hat{s}_2(x; h) - \hat{s}_1(x; h)(x_i - x)\} K_h(x_i - x) Y_i}{\hat{s}_2(x; h) \hat{s}_0(x; h) - \hat{s}_1(x; h)^2},$$

kde

$$\hat{s}_r(x; h) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} (x_i - x)^r K_h(x_i - x)$$

3. Priestleyho – Chaovy odhady (1972)

$$\hat{m}_{PCH}(x; h) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} K_h(x_i - x) Y_i$$

4. Gasserovy – Müllerovy odhady (1979)

$$\hat{m}_{GM}(x; h) = \sum_{i=0}^{T-1} Y_i \int_{s_{i-1}}^{s_i} K_h(t - x) dt,$$

kde

$$s_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \quad i = 0, \dots, T-2, \quad s_{-1} = 0, \quad s_{T-1} = 1.$$

V případě, že by v některém z prvních dvou odhadů nastalo dělení nulou, dodefinujeme příslušný odhad jako nulový.

Jádrové odhady tedy můžeme zapsat ve tvaru

$$\hat{m}(x; h) = \sum_{i=0}^{T-1} W_i(x; h) Y_i, \quad (2)$$

kde váhy W_i , odpovídají postupně odhadům \hat{m}_{NW} , \hat{m}_{LL} , \hat{m}_{PCH} , \hat{m}_{GM} . Můžeme tedy říci, že jádrový odhad funkce m v bodě x je vážený průměr těch pozorování, pro která odpovídající body plánu leží v symetrickém okolí $[x-h, x+h]$ bodu x . Tyto váhy závisí na bodu x , na vyhlazovacím parametru h a na jádře K . Vyhlazovací parametr h řídí hladkost odhadu a jeho volba je zásadním problémem ve vyhlazovacích metodách.

3 Volba šířky okna

Kvalitu jádrových odhadů globálně popisuje *průměrná střední kvadratická chyba AMSE* (Average Mean Square Error)

$$R_T(h) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} E(\hat{m}(x_i; h) - m(x_i))^2. \quad (3)$$

Hlavní člen této chyby (viz např. [6]) lze vyjádřit jako

$$\overline{R_T}(h) = \frac{\sigma^2 V(K)}{Th} + \frac{h^{2\kappa}}{(\kappa!)^2} \beta_\kappa^2 A_\kappa^2, \quad (4)$$

kde

$$V(K) = \int_{-1}^1 K^2(x) dx, \quad \beta_\kappa = \int_{-1}^1 x^\kappa K(x) dx, \quad A_\kappa = \int_0^1 \left(m^{(\kappa)}(x)\right)^2 dx.$$

Hodnota h , pro kterou $\overline{R_T}(h)$ nabývá minimální hodnoty je určena vztahem

$$h_{opt} = \left(\frac{\sigma^2 V(K) (\kappa!)^2}{2\kappa T \beta_\kappa^2 A_\kappa} \right)^{\frac{1}{2\kappa+1}}. \quad (5)$$

Tato hodnota h_{opt} závisí na neznámých veličinách σ^2 , $m^{(\kappa)}(x)$, a není tedy užitečná pro praktické účely.

Většina metod pro odhad optimální šířky okna vychází z tzv. *residuálního součtu čtverců*

$$RSS_T(h) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} [\hat{m}(x_i; h) - Y_i]^2. \quad (6)$$

3.1 Metoda křížového ověřování

Označme $\hat{m}_j(x_j; h)$ odhad hodnoty regresní funkce \hat{m} v bodě x_j bez použití tohoto bodu, tj.

$$\hat{m}_j(x_j; h) = \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{T-1} W_i(x_j) Y_i.$$

S takto pozměněnými vyhlazovači má $RSS_T(h)$ tvar

$$CV(h) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} [\hat{m}_i(x_i; h) - Y_i]^2. \quad (7)$$

Funkce $CV(h)$ se nazývá *funkce křížového ověřování*.

Odhad optimální šířky okna \hat{h}_{opt} je minimum funkce $CV(h)$.

$$\hat{h}_{opt} = \arg \min_{h \in (0,1)} CV(h).$$

3.2 Penalizační funkce

Zavedeme tzv. „penalizační funkci“ $\Xi(u)$ s Taylorovým rozvojem 1. řádu

$$\Xi(u) = 1 + 2u + O(u^2), \quad u \rightarrow 0.$$

Vynásobením $RSS_T(h)$ výrazem $\Xi(T^{-1}W_i(x_i))$ vzniká chybová funkce

$$G(h) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} [\hat{m}(x_i) - Y_i]^2 \Xi(T^{-1}W_i(x_i)).$$

Odhad optimální šířky okna \hat{h}_{opt} je minimum této funkce. Příklady některých penalizačních funkcí:

1. *Rice's bandwidth selector* (Rice 1984)

$$\Xi_R(u) = \frac{1}{1 - 2u}$$

2. *ET bandwidth selector* (Koláček 2001)

$$\Xi_{ET}(u) = e^{\frac{4}{\pi} \tan \frac{\pi}{2} u}$$

3.3 Mallowsova metoda

Rice v [5] navrhl chybovou funkci

$$\hat{R}_T(h) = RSS_T(h) - \hat{\sigma}^2 + \frac{2\hat{\sigma}^2}{T} \sum_{i=0}^{T-1} W_i(x_i), \quad (8)$$

kde $\hat{\sigma}^2$ je odhad σ^2

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{2T-2} \sum_{i=1}^{T-1} (Y_i - Y_{i-1})^2. \quad (9)$$

Podobný typ poprvé navrhl Mallows [4].

Odhad optimální šířky okna \hat{h}_{opt} je definován jako minimum funkce $\hat{R}_T(h)$.

3.4 Metoda Fourierovy transformace

V této kapitole uvažujeme tzv. „cyklický model“, tj. předpokládáme, že $m(x)$ je hladká periodická funkce a odhad je získán jádrovým vyhlazováním na rozšířené řadě $[\tilde{x}_t, \tilde{Y}_t]$, kde $\tilde{x}_{t+kT} = x_t, \tilde{Y}_{t+kT} = Y_t$ pro $k = 0, \pm 1, \dots$

Definice. Vektor $\mathbf{x}^\pm = (x_0^\pm, \dots, x_{T-1}^\pm)'$ $\in \mathbb{C}^T$, kde

$$x_t^\pm = \sum_{k=0}^{T-1} x_k e^{\pm \frac{i2\pi kt}{T}}, \quad t = 0, 1, \dots, T-1,$$

se nazývá *diskrétní Fourierova transformace* vektoru \mathbf{x} .

Píšeme $\mathbf{x}^\pm = DFT^\pm(\mathbf{x})$.

Definice. Vektor $\mathbf{I}_Y = (I_{Y_0}, \dots, I_{Y_{T-1}})'$

$$I_{Y_t} = \frac{|Y_t^-|^2}{2\pi T}, \quad t = 0, \dots, T-1,$$

kde $Y^- = DFT^-(Y)$ se nazývá *periodogram* vektoru Y .

Označení: označme $\mathbf{w} := (w_0, w_1, \dots, w_{T-1})'$, kde

$$w_t = W_0(x_t - 1) + W_0(x_t) + W_0(x_t + 1). \quad (10)$$

Nyní bude popsána metoda pro hledání optimální šířky okna, která využívá Fourierovu transformaci:

Najdeme nejmenší index $J_1 \in \{2, \dots, N\}$ takový, že $I_{Y_{J_1}} < c\hat{\sigma}^2/2\pi$

$$\tilde{I}_{Y_t} = \begin{cases} I_{Y_t}, & t < J_1 \\ \hat{\sigma}^2/2\pi, & t \geq J_1 \end{cases}.$$

Dostáváme tak modifikovaný residuální součet čtverců

$$MRSS_T(h) = \frac{4\pi}{T} \sum_{t=1}^N \tilde{I}_{Y_t} \{1 - w_t^-\}^2 \quad (11)$$

a odtud navrhovanou chybovou funkci

$$\tilde{R}_T(h) = MRSS_T(h) - \hat{\sigma}^2 + 2\hat{\sigma}^2 w_0, \quad (12)$$

$\hat{\sigma}^2$ je dáno vztahem (9).

Odhad optimální šířky okna \hat{h}_{opt} je minimum této funkce.

Touto myšlenkou se zabývá Chiu ve svém článku [2], kde uvažuje podobný postup pro speciální třídu váhových funkcí. Zde je tato metoda zobecněna na třídu $S_{0\kappa}$, κ sudé. Chiu se také zaměřil pouze na Pristleyho – Chaovy odhady, kdežto my bereme v úvahu všechny zmiňované typy.

3.5 Plug-in metoda

Tato metoda je založena na minimalizaci průměrné střední kvadratické chyby $R_T(h)$, resp. jejího hlavního členu (4). Odhad optimální šířky okna je dán vztahem

$$\hat{h}_{opt} = \left(\frac{\hat{\sigma}^2 V(K)(\kappa!)^2}{2\kappa T \beta_\kappa^2 \hat{A}_\kappa} \right)^{\frac{1}{2\kappa+1}}, \quad (13)$$

kde $\hat{\sigma}^2$ je dáno vztahem (9) a odhad parametru A_κ je

$$\hat{A}_\kappa = \frac{4\pi}{T} \sum_{j=1}^{J-1} (2\pi j)^{2\kappa} \left\{ I_{Y_j} - \frac{\hat{\sigma}^2}{2\pi} \right\}.$$

Opět se zde předpokládá cyklický model a využívá Fourierovy analýzy. Index J je volen podobně jako při přechodí metodě, více viz Koláček [3].

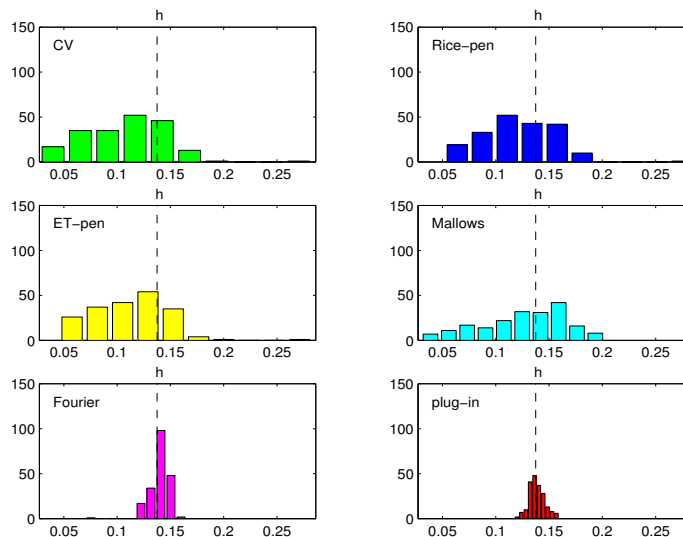
4 Simulace

V této kapitole se porovnávají výše uvedené metody. Srovnání jsme prováděli na simulovaných datech v systému MATLAB. Pro každou metodu jsme vygenerovali 200 řad ($T = 74$) a získali odhady optimální šířky okna. Z těchto hodnot jsme vyjádřili střední hodnotu a určili směrodatnou odchylku. Pomocí histogramů jsou znázorněna rozdělení všech 200 odhadů optimální šířky okna získaných jednotlivými metodami.

Simulace 1

Byla simulována data s regresní funkcí $m(x) = \sin(2\pi x)$, s rozptylem $\sigma^2 = 0,2$. Výsledné průměry a směrodatné odchylky jsou shrnuty v následující tabulce. Na obrázku je zobrazeno rozložení všech výsledků.

	$\kappa = 2$		$\kappa = 4$		$\kappa = 6$	
	$h_{opt} = 0.1374$		$h_{opt} = 0.3521$		$h_{opt} = 0.5783$	
	$E(\hat{h}_{opt})$	$std(\hat{h}_{opt})$	$E(\hat{h}_{opt})$	$std(\hat{h}_{opt})$	$E(\hat{h}_{opt})$	$std(\hat{h}_{opt})$
CV	0.1063	0.0391	0.2232	0.0712	0.3273	0.1056
Rice-pen.	0.1222	0.0329	0.2493	0.0585	0.3691	0.0877
ET-pen.	0.1114	0.0342	0.2312	0.0625	0.3397	0.0915
Mallows	0.1269	0.0402	0.3354	0.0938	0.4432	0.1078
Fourier	0.1409	0.0095	0.3625	0.0306	0.4967	0.0172
plug-in	0.1383	0.0074	0.3422	0.0348	0.5604	0.0623

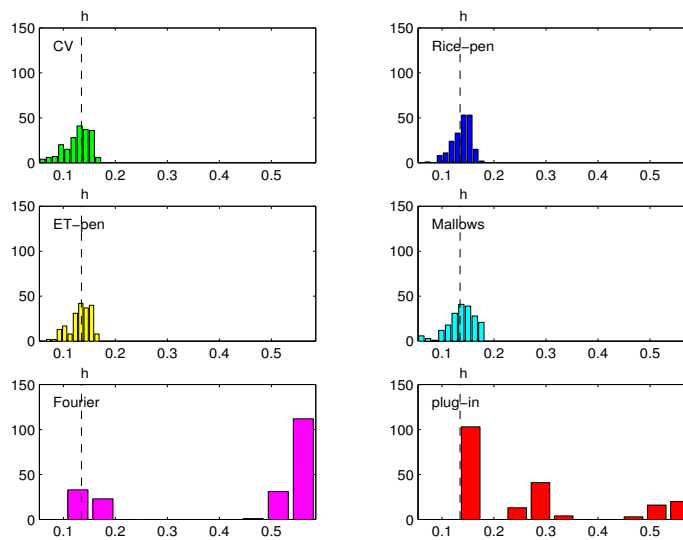


Obrázek 1: Rozložení všech 200 výsledků pro případ $\kappa = 2$.

Simulace 2

Byla simulována data s regresní funkcí $m(x) = -2 \sin(-4 + 1/6 x) + 5 + \cos(20 x)$, s rozptylem $\sigma^2 = 0,3$. Výsledné průměry a směrodatné odchylky jsou opět shrnuty v následující tabulce.

	$\kappa = 2$		$\kappa = 4$		$\kappa = 6$	
	$h_{opt} = 0.0609$		$h_{opt} = 0.1349$		$h_{opt} = 0.2075$	
	$E(\hat{h}_{opt})$	$std(\hat{h}_{opt})$	$E(\hat{h}_{opt})$	$std(\hat{h}_{opt})$	$E(\hat{h}_{opt})$	$std(\hat{h}_{opt})$
CV	0.0589	0.0144	0.1264	0.0259	0.2016	0.0379
Rice-pen	0.0683	0.0094	0.1392	0.0189	0.2183	0.0267
ET-pen	0.0647	0.0095	0.1321	0.0204	0.2112	0.0281
Mallows	0.0623	0.0137	0.1362	0.0261	0.2169	0.0394
Fourier	0.3251	0.1653	0.4485	0.1920	0.5482	0.2057
plug-in	0.1533	0.0665	0.2594	0.1495	0.3899	0.2025

Obrázek 2: Rozložení všech 200 výsledků pro případ $\kappa = 4$.

Jak je z obou simulací vidět, úspěšnost metod je různá. Především propad posledních dvou metod ve druhé simulaci je zřetelný. Může být způsoben tím, že daná regresní funkce nesplňuje předpoklady pro cyklický model. Bohužel z důvodu nedostatku místa není možné ukázat výsledné odhady regresních funkcí.

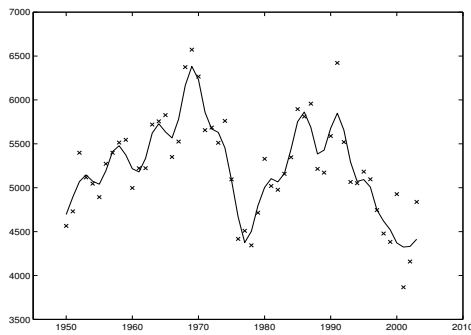
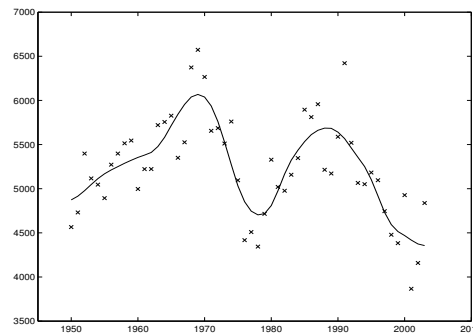
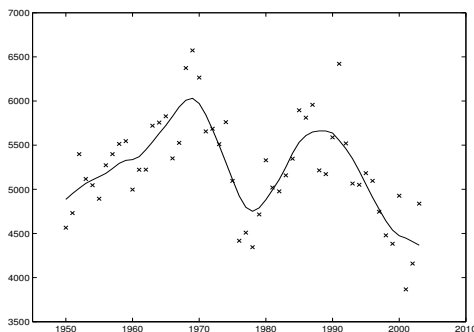
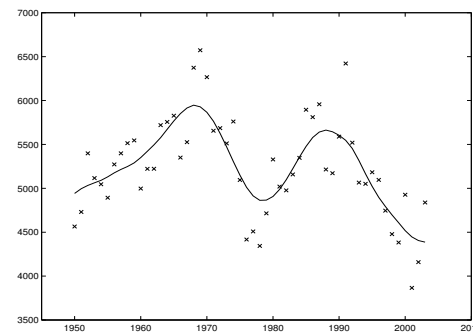
5 Reálná data

V této kapitole se srovnávají jednotlivé metody pro odhad optimální šířky okna aplikací na reálných datech.

Sňatky ve Švýcarsku

Počet sňatků ve Švýcarsku v letech 1950 – 2003, tj. $T = 54$.

	$\kappa = 2$	$\kappa = 4$	$\kappa = 6$
CV	0.0370	0.0740	0.2411
Rice-pen	0.0470	0.1841	0.2411
ET-pen	0.0470	0.1841	0.2411
Mallows	0.0370	0.0740	0.2424
Fourier	0.0776	0.1584	0.2455
plug-in	0.1003	0.2180	0.3353

CV, Mallows: $\hat{h}_{opt} = 0.0740$ Fourier: $\hat{h}_{opt} = 0.1584$ penalizace: $\hat{h}_{opt} = 0.1841$ plug-in: $\hat{h}_{opt} = 0.218$

Protože neznáme skutečnou regresní funkci $m(x)$, je těžké objektivně posoudit, který z jádrových odhadů je nejlepší. Nezbyvá nám tedy než subjektivně vybrat jeden z nabízených odhadů. Z obrázků i z hodnot uvedených v tabulce je patrné, že odhady vyhlazovacího parametru získané metodou křížového ověřování a Mallowsovou metodou nabývají malých hodnot a výsledný odhad regresní křivky je podhlazený. Tyto metody můžeme tedy v tomto případě vyloučit.

Reference

- [1] Härdle W. (1990). *Applied nonparametric regression*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [2] Chiu S.T. (1990). *Why bandwidth selectors tend to choose smaller bandwidths, and a remedy*. *Biometrika* **77**, 222–226.
- [3] Koláček J. (2005). *Jádrové odhady regresní funkce*. Disertační práce.
- [4] Mallows C. (1973). *Some comments on C_p* . *Technometrics* **15**, 661–675.
- [5] Rice J. (1984). *Bandwidth choice for nonparametric regression*. *The Annals of Statistics* **12**, 1215–1230.
- [6] Wand M.P., Jones M.C. (1995). *Kernel smoothing*. Chapman & Hall, London.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GAČR 402/04/1308.

Adresa: J. Koláček, KAM PřF MU, Janáčkovo nám. 2a, 602 00 Brno

E-mail: kolacek@math.muni.cz

REGRESE SE SHLUKOVANÝMI DVOJITĚ INTERVALOVĚ CENZOROVANÝMI DATY: ČAS DO VZNIKU ZUBNÍHO KAZU

Arnošt Komárek, Emmanuel Lesaffre

Klíčová slova: Lineární smíšený model, MCMC, Náhodné efekty.

Abstrakt: V článku navrhne metodologii pro regresní analýzu dvojité intervalově cenzorovaných dat v situaci, kdy se navíc nedá předpokládat nezávislost jednotlivých pozorování z důvodu jejich uspořádání do shluků. Metoda bude založena na lineárním smíšeném modelu, v kterém pomocí techniky motivované penalizovaným vyhlazováním B-spliny odhadneme též hustoty chybového členu a náhodných efektů. Jako ilustraci uvedeme analýzu času do vzniku kazu u trvalých 1. stoliček.

1 Úvod

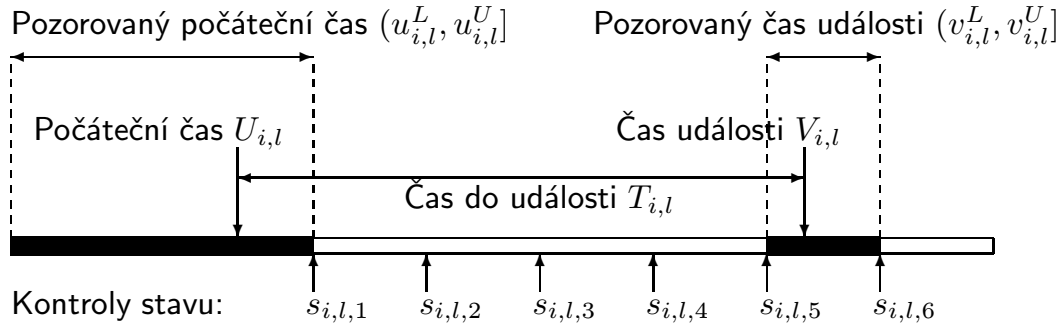
Standardní metody analýzy přežití předpokládají, že čas T do studované události je buď znám, anebo je pouze zprava cenzorován. K tomu, abychom zjistili, zda studovaná událost skutečně nastala, jsou však v mnoha případech (studie o viru HIV, zubní lékařství) nutná (pravidelná) vyšetření, např. laboratorní analýza, kontrola zubařem. O skutečném času T je potom pouze známo, že leží v intervalu $(t^L, t^U]$ a mluvíme o *intervalovém cenzorování*.

V určitých situacích je však nejen čas události, ale též okamžik – *počáteční čas* U , kdy jednotka začne přicházet do úvahy pro studovanou událost, zjišťován tímto způsobem. Je-li kupříkladu T časem do výskytu zubního kazu, potom čas U je zřejmě roven okamžiku prořezání daného zubu, neboť teprve od této chvíle je zub vystaven riziku zubního kazu. Čas do události (zubního kazu) T lze tedy zapsat jako $T = V - U$, kde U je počáteční (chronologický) čas a V (chronologický) čas události. Je-li jak U , tak V intervalově cenzorováno, mluvíme o pozorovaných časech události T jako o *dvojitě intervalově cenzorovaných datech*.

V příspěvku se zaměříme na regresní analýzu dvojité intervalově cenzorovaných dat v situaci, kdy navíc ne všechna pozorování jsou nutně nezávislá. Typickým příkladem je situace, kdy jednotlivá pozorování odpovídají jednotkám, které se vyskytují ve shlucích a v rámci shluku lze předpokládat nenulovou korelaci mezi jednotlivými časy do sledované události.

1.1 Příklad: Signal Tandmobiell[®] data

Uvažujme data sebraná ve vlámské části Belgie v rámci longitudinální studie probíhající v letech 1996–2001. V ročních intervalech bylo u každého účastníka studie (2 315 chlapců a 2 153 dívek narozených v roce 1989) provedeno



Obrázek 1: Schéma dvojitě intervalově cenzorovaného pozorování získaného kontrolou v časech $s_{i,l,1}, \dots, s_{i,l,6}$. Počáteční čas $U_{i,l}$ je pozorován jako interval $(0, s_{i,l,1}]$, čas události $V_{i,l}$ je pozorován jako interval $(s_{i,l,5}, s_{i,l,6}]$.

6 zubních vyšetření. Kromě dat o čase prořezání, resp. vzniku kazu u jednotlivých zubů, jež jsou intervalově cenzorována s pozorovanými intervaly o délce 1 rok byly shromážděny též informace o faktorech, které by mohly mít vliv jak na čas prořezání jednotlivých zubů, tak na jejich kazivost.

V tomto článku se budeme zabývat úkolem ohodnotit vliv několika vybraných faktorů na kazivost trvalých 1. stoliček (zuby 16, 26, 36, 46 v evropském značení). Konkrétně nás bude zajímat vliv pozice zubu ($16 =$ vpravo nahoře, $26 =$ vlevo nahoře, $36 =$ vlevo dole, $46 =$ vpravo dole), pohlaví, stavu mléčné 2. stoličky v době prořezání stoličky trvalé (*zdravá nebo dmf = s kazem/chybějící kvůli kazu/s výplní*), frekvence čištění (*denně nebo méně často*), přítomnosti jisté formy ochrany, jež spočívá v preventivním vyplnění puklin speciální hmotou, a přítomnost plaku v množství vyšším než určená mez.

Poznamenejme, že nelze předpokládat nulovou korelaci mezi časy do vzniku kazu pro zuby patřících jednomu dítěti. Důvodem přitom mohou být shodné genetické dispozice, stravovací a hygienické návyky apod. sdílené všemi zuby konkrétního jedince.

2 Model

2.1 Lineární smíšený model pro dvojitě intervalově cenzorovaná data

Nechť $U_{i,l}$, $i = 1, \dots, N$, $l = 1, \dots, n_i$ je počáteční čas (čas prořezání zubu) pro l -tou jednotku z i -tého shluku (l -tý zub i -tého dítěte). Nechť $U_{i,l}$ je pozorováno jako interval $(u_{i,l}^L, u_{i,l}^U]$. Obdobně, necht' čas sledované události $V_{i,l}$ (čas vzniku kazu) je pozorován jako interval $(v_{i,l}^L, v_{i,l}^U]$. Konečně, necht' $T_{i,l} = V_{i,l} - U_{i,l}$ je čas do sledované události (čas do vzniku kazu) – veličina primárního zájmu. Schematicky je takováto situace dvojitě intervalově cenzorovaných dat znázorněna na obr. 1. Předpokládejme dále, že cenzorující mechanismus (mechanismus generující okamžiky kontrol) nezávisí pro každé i a l ani na $U_{i,l}$, ani na $V_{i,l}$.

Vektor regresorů, jež mohou ovlivnit počáteční čas $U_{i,l}$ označíme jako $\mathbf{z}_{i,l}$, vektor regresorů, jež mohou ovlivnit čas do události $T_{i,l}$ potom jako $\mathbf{x}_{i,l}$. Závislost $U_{i,l}$, resp. $T_{i,l}$ na regresorech umožníme skrze následující lineární smíšený model:

$$\left. \begin{aligned} \ln(U_{i,l}) &= \mathbf{z}'_{i,l}\boldsymbol{\delta} + d_i + \zeta_{i,l} \\ \ln(V_{i,l} - U_{i,l}) = \ln(T_{i,l}) &= \mathbf{x}'_{i,l}\boldsymbol{\beta} + b_i + \varepsilon_{i,l} \end{aligned} \right\} i = 1, \dots, N, l = 1, \dots, n_i. \quad (1)$$

V modelu (1) jsou $\boldsymbol{\delta}$ a $\boldsymbol{\beta}$ vektory neznámých regresních koeficientů, $\zeta_{i,l}$ a $\varepsilon_{i,l}$ náhodné chyby, a d_i a b_i náhodné efekty, jejichž hodnota je vždy společná pro všechny jednotky z daného shluku. Dále předpokládáme, že $\{\zeta_{i,l} : i = 1, \dots, N, l = 1, \dots, n_i\}$ jsou i.i.d. náhodné veličiny z rozdělení s hustotou g_ζ , $\{\varepsilon_{i,l} : i = 1, \dots, N, l = 1, \dots, n_i\}$ i.i.d. z rozdělení s hustotou g_ε , $\{d_i : i = 1, \dots, N\}$ i.i.d. z rozdělení s hustotou g_d a konečně $\{b_i : i = 1, \dots, N\}$ i.i.d. z rozdělení s hustotou g_b .

Pro všechna $i_1, i_2, i_3, i_4, l_1, l_2$ předpokládáme dále, že $\zeta_{i_1, l_1}, \varepsilon_{i_2, l_2}, d_{i_3}$ a b_{i_4} jsou nezávislé náhodné veličiny. V kontextu námi uvažovaného zubařského problému tento předpoklad mj. implikuje (a) náchylnost daného dítěte ke kazivosti zubů nezávisí na celkové rychlosti vývoje trvalých zubů (nezávislost b_i a d_i); (b) náchylnost konkrétního zubu ke kazivosti nezávisí na čase jeho prořezání ani na časech prořezání ostatních zubů (nezávislost ε_{i, l_1} a ζ_{i, l_2}). Pro námi uvažovaná data lze tento předpoklad považovat za splněný, vezmeme-li v potaz výsledky dřívější analýzy (viz Leroy et al. [5]), která neprokázala významný vliv času prořezání na čas do vzniku kazu ($p=0,78$).

Poznamenejme, že nenulová korelace mezi počátečními časy, resp. časy do události uvnitř jednoho shluku je umožněna zahrnutím náhodných efektů do modelu a např. pro časy do události platí:

$$\text{cor}\{\ln(T_{i, l_1}), \ln(T_{i, l_2})\} = \frac{\text{var}(b)}{\text{var}(\varepsilon) + \text{var}(b)}, \quad i = 1, \dots, N, l_1 \neq l_2.$$

2.2 Semiparametricky specifikovaná rozdělení

V kontextu cenzorovaných dat je velice obtížné ověřit jakýkoliv parametrický předpoklad týkající se rozdělení odezvy. Z tohoto důvodu využijeme semiparametrického modelu pro rozdělení, který byl použit v Komárek et al. [4] za účelem specifikace rozdělení chybových členů lineárního modelu pro nezávislá, jednoduše intervalově cenzorovaná data.

Necht' $g(y)$ je hustota, kterou chceme specifikovat (za g dosadíme posléze $g_\varepsilon, g_\zeta, g_b, g_d$). Náš přístup je motivován vyhlazováním pomocí penalizovaných B-splínů, viz Eilers a Marx [1]. Vzhledem k tomu, že odhadujeme hustoty, je výhodné (viz Komárek [3], kap. 6) nahradit B-splíny jejich limitami (pro stupeň B-splínu $\rightarrow \infty$), kterými jsou normální hustoty. Neznámá hustota $g(y)$ je tedy vyjádřena jako posunutá a škálovaná normální směs:

$$g(y) = \tau^{-1} \sum_{j=-K}^K w_j \varphi_j \{ \tau^{-1}(y - \alpha) \}, \quad (2)$$

kde φ_j je hustota $\mathcal{N}(\mu_j, \sigma^2)$.

Parametry, které musíme odhadnout jsou: posunutí α , měřítko τ a váhy $\mathbf{w} = (w_{-K}, \dots, w_K)'$ splňující

$$0 < w_j < 1, \quad j = -K, \dots, K, \quad \sum_{j=-K}^K w_j = 1. \quad (3)$$

Oproti tomu, počet komponent směsi $2K + 1$, střední hodnoty (uzle) $\boldsymbol{\mu} = (\mu_{-K}, \dots, \mu_K)'$ jednotlivých komponent a rozptyl σ^2 jednotlivých komponent jsou pevné. V duchu penalizovaného vyhlazování je počet komponent směsi vyšší než by bylo nutné u klasického vyhlazování bez penalizace. Namísto toho, abychom věnovali příliš pozornosti umístění jednotlivých uzlů, umístíme je ekvidistantně ($\mu_{j+1} - \mu_j = d$) do rozmezí $[\mu^{\min}, \mu^{\max}]$, v němž lze pro standardizované rozdělení očekávat nezanedbatelnou pravděpodobnost. Konečně volba rozptylu σ^2 odpovídá v jistém smyslu volbě stupně B-splinu. Základními volbami, které lze v závislosti na analyzovaném problému upravit, může být $\mu_{\min} = -4,5$, $\mu_{\max} = 4,5$, $d = 0,3$ (odpovídající $K = 15$) a $\sigma = (2/3)d$. Motivaci pro tyto volby lze nalézt v Komárek [3], kap. 6. Abychom se vyhnuli omezením (3) kladeným na váhy \mathbf{w} , budeme odhadovat jejich transformace $\mathbf{a} = (a_{-K}, \dots, a_K)'$, $a_0 = 0$, které již nejsou nijak omezeny. Vztah mezi vektory \mathbf{a} a \mathbf{w} je následující:

$$w_j = \frac{\exp(a_j)}{\sum_{k=-K}^K \exp(a_k)}, \quad a_j = \ln \left(\frac{w_j}{w_0} \right), \quad j = -K, \dots, K. \quad (4)$$

V dalším textu, necht' $\mathcal{G} = \{\mathbf{a}, \alpha, \tau\}$. Pomocí indexu ε , ζ , b , resp. d dále rozlišíme parametry určující hustoty g_ε , g_ζ , g_b , resp. g_d , tj. $\mathcal{G}_\varepsilon = \{\mathbf{a}^\varepsilon, \alpha^\varepsilon, \tau^\varepsilon\}$, $\mathcal{G}_\zeta = \{\mathbf{a}^\zeta, \alpha^\zeta, \tau^\zeta\}$, $\mathcal{G}_b = \{\mathbf{a}^b, \alpha^b, \tau^b\}$, $\mathcal{G}_d = \{\mathbf{a}^d, \alpha^d, \tau^d\}$. Vzhledem k tomu, že není možné rozlišit mezi posunutím chybového členu a náhodného efektu, položíme dále $\alpha^b = \alpha^d = 0$.

3 Odhad parametrů

3.1 Věrohodnost

Označíme-li jako p obecnou hustotu, je pro model (1) s hustotami g_ε , g_ζ , g_b , g_d specifikovanými pomocí (2) příspěvek i -tého shluku do celkové věrohodnosti dán následujícím výrazem:

$$L_i = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left\{ \prod_{l=1}^{n_i} \int_{u_{i,l}^L}^{u_{i,l}^U} \int_{v_{i,l}^L - u_{i,l}}^{v_{i,l}^U - u_{i,l}} p(t_{i,l}, b_i, u_{i,l}, d_i) dt_{i,l} du_{i,l} \right\} db_i dd_i$$

$$= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left[\prod_{l=1}^{n_i} \int_{u_{i,l}^L}^{u_{i,l}^U} \left\{ \int_{v_{i,l}^L - u_{i,l}}^{v_{i,l}^U - u_{i,l}} p(t_{i,l} | b_i) dt_{i,l} \right\} p(u_{i,l} | d_i) du_{i,l} \right] p(b_i) p(d_i) db_i dd_i, \quad (5)$$

kde $p(t_{i,l} | b_i) = t_{i,l}^{-1} g_{\varepsilon} \{ \ln(t_{i,l}) - \mathbf{x}'_{i,l} \boldsymbol{\beta} - b_i \}$, $p(u_{i,l} | d_i) = u_{i,l}^{-1} g_{\zeta} \{ \ln(u_{i,l}) - \mathbf{z}'_{i,l} \boldsymbol{\delta} - d_i \}$, $p(b_i) = g_b(b_i)$ a $p(d_i) = g_d(d_i)$.

3.2 Penalizovaná logaritmická věrohodnost

V práci Komárek et al. [4] byla k odhadu neznámých parametrů použita metoda penalizované maximální věrohodnosti. V našem případě bychom museli maximalizovat následující penalizovanou logaritmickou věrohodnost:

$$\ell_P = \sum_{i=1}^N \ln(L_i) + q(\mathbf{a}^{\varepsilon} | \lambda^{\varepsilon}) + q(\mathbf{a}^{\zeta} | \lambda^{\zeta}) + q(\mathbf{a}^b | \lambda^b) + q(\mathbf{a}^d | \lambda^d), \quad (6)$$

kde

$$q(\mathbf{a} | \lambda) = -\frac{\lambda}{2} \sum_{j=-K+m}^K (\Delta^m a_j)^2 = -\frac{\lambda}{2} \mathbf{a}' \mathbb{D}'_m \mathbb{D}_m \mathbf{a}, \quad (7)$$

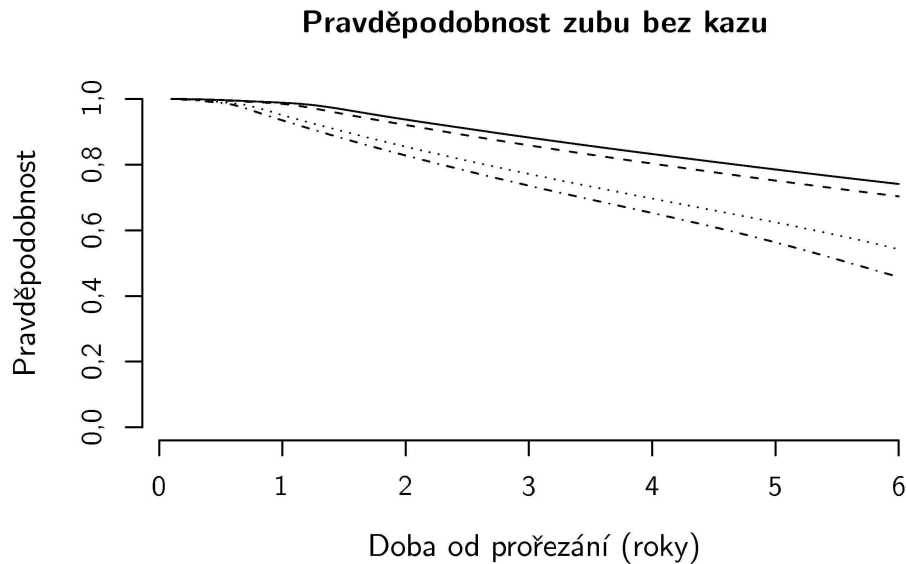
přičemž Δ^m je diferenční operátor m -tého řádu a \mathbb{D}_m příslušná matice. Kromě parametrů modelu je dále nutno odhadnout vyhlazovací hyperparametry λ^{ε} , λ^{ζ} , λ^b , λ^d .

Zejména s ohledem na formu věrohodnosti (5) se jeví maximalizace výrazu (6) dosti obtížná. Snažším postupem k získání odhadů se zdá být bayesovská specifikace modelu a odhad na základě výběru z aposteriorního rozdělení, získaného simulační metodou MCMC.

3.3 Bayesovská specifikace modelu

Pro všechny parametry modelu, kromě transformovaných vah \mathbf{a}^{ε} , \mathbf{a}^{ζ} , \mathbf{a}^b , \mathbf{a}^d volíme plochá apriorní rozdělení, standardně používaná v bayesovské statistice. Apriorní rozdělení pro transformované váhy \mathbf{a} , jehož hustotu označíme jako $p(\mathbf{a} | \lambda)$ má potom formu gaussovského markovského náhodného pole a souvisí přímo s penalizací (7), neboť $p(\mathbf{a} | \lambda) \propto \exp\{q(\mathbf{a} | \lambda)\}$. Aposteriorní rozdělení je potom proporcionální výrazu $\exp(\ell_P) \times$ plochá apriorní rozdělení. Oblast, kde má aposteriorní hustota své maximum tedy odpovídá oblasti, v které penalizovaná věrohodnost nabývá svého maxima.

Detaily bayesovské specifikace modelu a potřebná odvození pro implementaci MCMC nalezne čtenář v Komárek [3], kap. 9. Popsaná metodologie byla dále implementována ve formě R balíčku `bayesSurv`, který je možno zdarma stáhnout z CRANu (<http://www.R-project.org>).



Obrázek 2: Signal Tandmobiel® data. Aposteriorní prediktivní pravděpodobnost zubu bez kazu (funkce přežití) pro zub 16 (trvalá 1. stolička vpravo nahoře) u chlapců a následující kombinace hodnot prediktorů: (1) bez plaku, s ochranou, denní čištění, (1a) a zdravá mléčná 2. stolička (plná čára), (1b) a zkažená mléčná 2. stolička (přerušovaná čára); (2) s plakem, bez ochrany, méně časté než denní čištění, (2a) a zdravá mléčná 2. stolička (tečkovaná čára), (2b) a zkažená mléčná 2. stolička (čerchovaná čára).

4 Vybrané výsledky analýzy času do vzniku kazu

Čas do vzniku kazu spolu s časem prořezání byly analyzovány pomocí modelu (1). Časovou jednotkou byl rok a vzhledem k tomu, že z klinického hlediska je nemožné, aby se trvalý zub prořezal před 5. rokem věku, byl za čas 0 celého modelu zvolen tento moment, tj. v modelu (1) použijeme $\ln(U_{i,l} - 5)$ namísto $\ln(U_{i,l})$.

Pro čas prořezání jsme jako regresory uvažovali pouze pohlaví a pozici zubu. Do modelu pro čas do vzniku kazu jsme zahrnuli všechny regresory popsané v odd. 1.1. Do startovacího modelu jsme dále zahrnuli interakce uvažovaných faktorů s pozicí zubu. Na základě aposteriorních pseudo-profilových pravděpodobností (obdoba klasických p-hodnot) navržených v Held [2], odd. 2.1 jsme všechny interakce z modelu vyřadili (ve všech případech $p > 0,1$).

Aposteriorní medián (bodový odhad), 95% kredibilní oblast (získaná metodou popsanou v Held [2], odd. 2.1) a oboustranná pseudo profilová pravděpodobnost pro regresní parametry a momenty chybového členu a náhodných efektů v modelu bez interakcí jsou uvedeny v tab. 1. S ohledem na čas prořezání nebyl nalezen signifikantní rozdíl mezi jednotlivými trvalými 1. stoličkami. Jak se dalo očekávat, čas prořezání je však u dívek významně

Parametr	Čas prořezání		Čas do vzniku kazu	
	Aposter. medián	95% KO	Aposter. medián	95% KO
Pozice zubu	p > 0,5		p > 0,5	
<i>zub 26</i>	-0,003	(-0,013, 0,007)	-0,006	(-0,045, 0,031)
<i>zub 36</i>	0,001	(-0,008, 0,011)	-0,009	(-0,051, 0,034)
<i>zub 46</i>	0,002	(-0,008, 0,012)	-0,016	(-0,059, 0,026)
Pohlaví	p = 0,008		p = 0,085	
<i>dívka</i>	-0,023	(-0,039, -0,007)	-0,071	(-0,155, 0,009)
Stav mléčného			p < 0,001	
<i>dmf</i>			-0,140	(-0,193, -0,091)
Čištění			p < 0,001	
<i>denně</i>			0,337	(0,233, 0,436)
Ochrana			p < 0,001	
<i>přítomna</i>			0,119	(0,060, 0,178)
Plak			p < 0,001	
<i>přítomen</i>			-0,114	(-0,171, -0,067)
E(chyba)	0,442	(0,427, 0,456)	1,920	(1,810, 2,059)
sd(chyba)	0,029	(0,025, 0,034)	0,767	(0,712, 0,834)
sd(náh. efekt)	0,199	(0,191, 0,210)	0,672	(0,614, 0,734)

Tabulka 1: Signal Tandmobiell[®] data. Aposteriorní medián, 95% kredibilní oblast (KO) a pseudo profilová pravděpodobnost (p).

kratší než u chlapců. S ohledem na čas do vzniku kazu již významný rozdíl mezi dívkami a chlapci nalezen nebyl, stejně jako rozdíl mezi jednotlivými trvalými 1. stoličkami. Vliv zbylých uvažovaných faktorů na kazivost zubů je však významný a vždy ve směru, který by se dal vzhledem k logice problému čekat. Lepší hygiena ústní dutiny reprezentovaná denním čištěním zubů, stejně jako preventivní ochrana vedou k významně vyššímu času do vzniku kazu. Oproti tomu kazy objevující se již na mléčných zubech anebo přítomnost plaku vedou k významně kratšímu času do vzniku kazu.

Bližší představu o vlivu jednotlivých faktorů na kazivost trvalých 1. stoliček nám mohou podat například aposteriorní prediktivní pravděpodobnosti zubu bez kazu (v obecné terminologii funkce přežití). V okamžiku, kdy již máme k dispozici výběr z aposteriorního rozdělení je jejich výpočet již poměrně snadný (viz Komárek [3], kap. 9). Příslušné grafy pro trvalou 1. stoličku vpravo nahoře u chlapců, 2 „výhodné“ a 2 „nevýhodné“ kombinace hodnot prediktorů nalezneme na obr. 2.

5 Závěr

V tomto článku jsme si stručně ukázali možnosti analýzy dvojité intervalově cenzorovaných dat, u kterých se navíc nedá předpokládat nezávislost jednotlivých pozorování z důvodu jejich uspořádání do známých shluků. Byla navržena metodologie založená na lineárním smíšeném modelu a vyhlazovaném odhadu hustot specifikujících rozdělení chybových členů modelu a náhodných efektů. Metoda byla následně aplikována na analýzu dat ze zubařského prostředí.

Vzhledem k omezenému rozsahu tohoto článku nebylo možné vysvětlit vše do detailů. Čtenář, kterého však přednesené téma zaujalo, nalezne vše potřebné v dizertaci prvního autora (viz Komárek [3]).

Reference

- [1] Eilers P.H.C., Marx B.D. (1996). *Flexible smoothing with B-splines and penalties (with Discussion)*. *Statistical Science* **11**, 89–121.
- [2] Held L. (2004). *Simultaneous posterior probability statements from Monte Carlo output*. *Journal of Computational and Graphical Statistics* **13**, 20–35.
- [3] Komárek A. (2006) *Accelerated failure time models for multivariate interval-censored data with flexible distributional assumptions*. Leuven: Ph.D. Dissertation, Katholieke Universiteit Leuven, Faculteit Wetenschappen.
- [4] Komárek A., Lesaffre E., Hilton J.F. (2005). *Accelerated failure time model for arbitrarily censored data with smoothed error distribution*. *Journal of Computational and Graphical Statistics* **14**, 726–745.
- [5] Leroy R., Bogaerts K., Lesaffre E., Declerck D. (2005). *Effect of caries experience in primary molars on cavity formation in the adjacent permanent first molar*. *Caries Research* **39**, 342–349.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem BDB-B/05/10, Onderzoeksfonds, Katholieke Universiteit Leuven.

Sběr dat použitých v tomto článku byl podporován firmou Unilever, Belgium. Signal Tandmobiel® projekt byl uskutečněn pod vedením následujících partnerů: D. Declerck (Dental School, Catholic University Leuven), L. Martens (Dental School, University Ghent), J. Vanobbergen (Oral Health Promotion and Prevention, Flemish Dental Association), P. Bottenberg (Dental School, University Brussels), E. Lesaffre (Biostatistical Centre, Catholic University Leuven), K. Hoppenbrouwers (Youth Health Department, Catholic University Leuven; Flemish Association for Youth Health Care).

Adresa: A. Komárek, E. Lesaffre, Katholieke Universiteit Leuven, Biostatistisch centrum, Kapucijnenvoer 35, 3000 Leuven, Belgie

E-mail: Arnost.Komarek@med.kuleuven.be

VZTAH FIREM K ŽIVOTNÍMU PROSTŘEDÍ APLIKACE NA LOGISTICKOU REGRESI S ORDINÁLNÍMI DATY

Lenka Komárková, Jiří Dvořák

Klíčová slova: Logistická regrese, ordinální data, proporcionální šance.

Abstrakt: Obsahem příspěvku je aplikace logistické regrese pro zkoumání závislostí v ekonomické oblasti. Předmětem zkoumání je vzájemný vztah mezi úsilím, jaké firmy věnují problematice životního prostředí, a důsledky této strategie pro ekonomickou úspěšnost firmy. Všechny tyto otázky jsou sledovány z hlediska třístupňové hodnotící škály, což vede na problém statistického zpracování ordinálních dat. V našem příspěvku jsme zvolili logistickou regresi s kumulativními logity a proporcionálními šancemi.

1 Úvod

Je stav světa, ve kterém žijeme, kritický, jak proklamují přední environmentalisté, nebo situace není tak špatná a postupně se zlepšuje, jak oponují někteří ekonomové? Odpověď na tuto otázku není jednoduchá a většinou odráží spíše osobní přesvědčení respondenta, než obecně platnou skutečnost. Jednou z často diskutovaných otázek je působení podnikatelských subjektů na životní prostředí. Předmětem dalších úvah bude především obchodní společnost, tak jak ji chápe zákon č. 513/1991 Sb., Obchodní zákoník ve znění pozdějších předpisů. Z tohoto zákona vyplývá, že vliv obchodní společnosti na životní prostředí je zákonitým rysem provázejícím jakoukoliv obchodní činnost. Tento vliv může být ve svých důsledcích pro životní prostředí jak relativně neutrální, tak i velmi negativní. Pomineme-li poměrně komplikovanou otázku jak měřit a posuzovat míru tohoto vlivu, naskýtá se další zajímavé téma: Je v manažerském pohledu místo pro zohlednění vlivů fungování obchodní společnosti na životní prostředí? A pokud ano, jaké pohnutky manažera k tomuto uvažování vedou?

Z příspěvků věnovaných praktickému výzkumu postojů členů vedení a zaměstnanců k úsilí, jež je ve společnosti na tuto oblast vynakládáno, a jaké výsledky toto úsilí přináší v ekonomické úspěšnosti společnosti, patří k zajímavým práce [3]. Práce dokládá na empirickém výzkumu provedeném na stu malých a středních podniků ve státě Indiana, USA, existenci určité statisticky významné korelace mezi těmito oblastmi zkoumání:

- *zájem* zaměstnanců a vedení firmy o problematiku životního prostředí;
- *úsilí*, jaké společnost na řešení problémů vynakládá;
- *výsledky* z pohledu ekonomické výkonnosti společnosti.

Od předešlé trojice autorů jsme převzali dotazník a použili ho na firmy obchodující v České republice. Metodiku autorů vhodnou pro data kvantitativní jsem upravili. Zvolili jsme statistické metody na data ordinální, viz [1]. V předchozí naší práci [2] byla určována existence závislosti mezi jednotlivými proměnnými charakterizující tři výše uvedené sledované oblasti. Předmětem tohoto příspěvku je najít konkrétní vzájemný vztah mezi chováním obchodní organizace z hlediska jejího vlivu na životní prostředí a její konkurenceschopností.

2 Data

V rámci průzkumu se zjišťovalo, jaké úsilí obchodní společnosti vynakládají na zlepšení životního prostředí, a to konkrétně v níže uvedených oblastech:

1. snížení spotřeby energie \rightarrow proměnná **energie** (x_1)
2. omezení znečištění vzduchu a vody \rightarrow proměnná **znečištění** (x_2)
3. znovuvyužití odpadů \rightarrow proměnná **recyklace** (x_3)
4. vliv na environmentální politiku partnerů \rightarrow proměnná **partneři** (x_4)
5. zisk certifikace ISO 14001 \rightarrow proměnná **certifikace** (x_5)

s hodnocením:

- *žádné úsilí* (0) – oblast respondenta nezajímá, nevěnuje se jí;
- *přiměřené úsilí* (1) – oblasti se respondent věnuje jen, pokud je zřejmá ekonomická návratnost;
- *značné úsilí* (2) – oblasti respondent věnuje veškeré volné zdroje (nejen finanční).

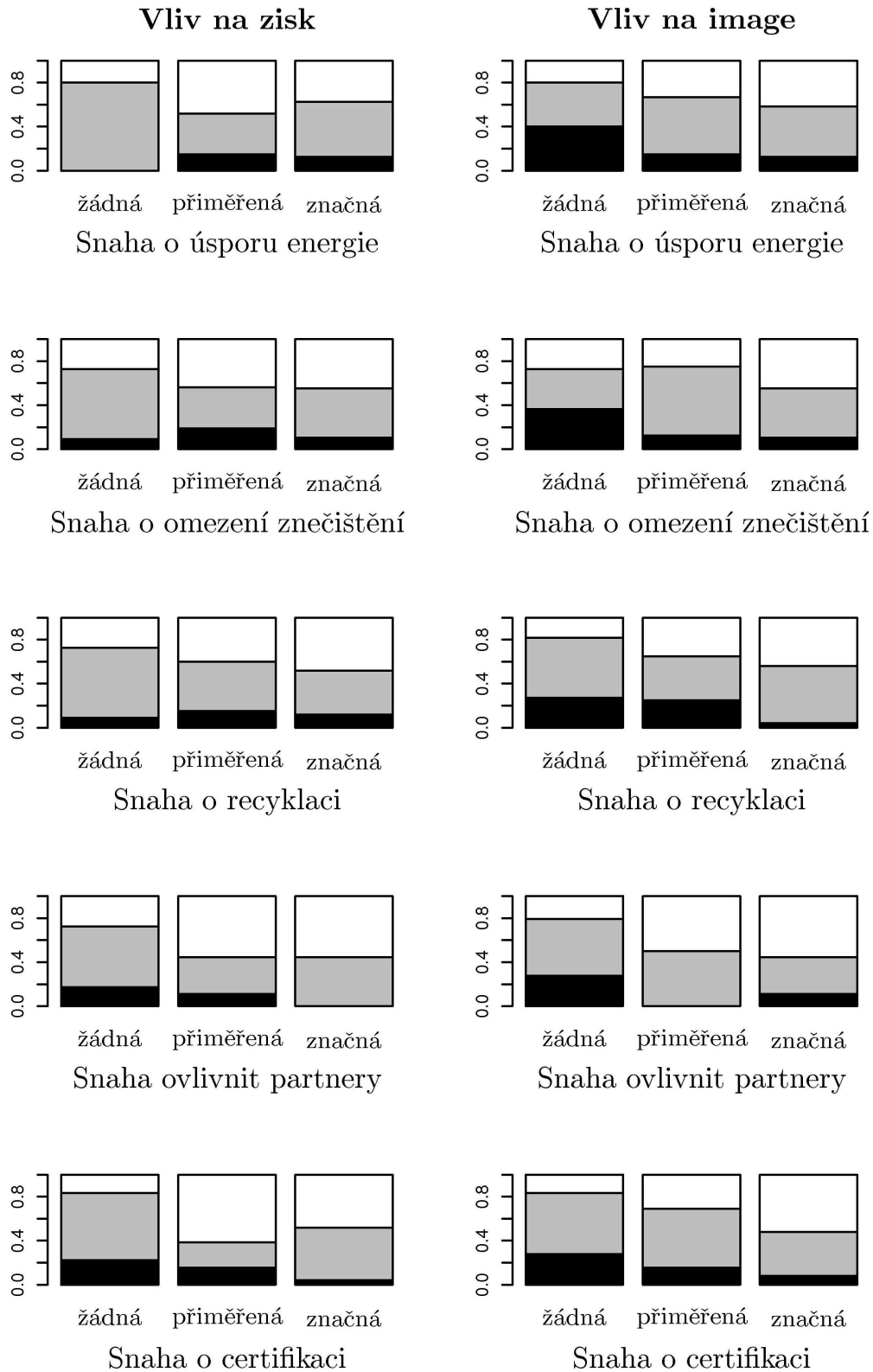
Dále firmy hodnotily mj. vliv tohoto úsilí na

1. **zisk** společnosti (*záporný* (0) / *žádný* (1) / *kladný* (2));
2. **image** společnosti (*žádný* (0) / *kladný* (1) / *velmi kladný* (2)).

Data byla získána od majitelů a vedení společností v průběhu jara 2005. Spolupracovníci z řad studentů FM VŠE Praha osobně doručili dotazníky a zajistili jejich řádné vyplnění. Podařilo se tak získat 56 použitelných odpovědí od 60 kontaktovaných společností. Je zřejmé, že data jsou povahy kategoriální, které lze seřadit podle stupně vynaloženého úsilí, resp. podle stupně vlivu tohoto úsilí. Jedná se tedy o data ordinální a dále na ně bude takto nahlíženo.

3 Metodologie

Nejprve byl vztah mezi úsilím v jednotlivých oblastech životního prostředí a ziskem, resp. image společnosti vyjádřen pomocí nástrojů popisné statistiky.



Obrázek 1: Pozorované relativní četnosti jednotlivých stupňů vlivu (0 - černá barva, 1 - šedá barva, 2 - bílá barva) na zisk, resp. image firmy v závislosti na vynaloženém úsilí ve sledovaných oblastech.

Pravděpodobnosti hodnot (0, 1, 2) výsledku firmy z hlediska zisku a image pro jednotlivé stupně úsilí ve sledovaných 5 oblastech byly odhadnuty pomocí relativních četností, jejichž grafické znázornění lze nalézt na obrázku 1.

Následně byl vztah závislosti hledán pomocí *logistické regrese s kumulativními logity a proporcionálními šancemi*:

$$\text{logit } P(Y \geq j) = \ln \left(\frac{P(Y \geq j)}{P(Y < j)} \right) = \alpha_j + \beta^T \mathbf{x}, \quad j = 1, \dots, k-1,$$

kde $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_5)^T$ a $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_5)^T$ a k značí počet obměn vysvětlované proměnné Y . Regresní parametr β_i , $i = 1, \dots, 5$, zde vyjadřuje efekt vlivu vysvětlující proměnné x_i , $i = 1, \dots, 5$, na logaritmus šance odezvy v kategorii $j = 1, \dots, k-1$ nebo vyšší. V našem případě, kdy odezva nabývá pouze tří hodnot ($k=3$), lze daný obecný model přepsat následovně:

$$\begin{aligned} \text{logit } P(Y \geq 1) &= \ln \left(\frac{P(Y \geq 1)}{P(Y = 0)} \right) = \alpha_1 + \beta^T \mathbf{x}; \\ \text{logit } P(Y = 2) &= \ln \left(\frac{P(Y = 2)}{P(Y \leq 1)} \right) = \alpha_2 + \beta^T \mathbf{x}. \end{aligned}$$

Stejně hodnoty regresních parametrů β_i , $i = 1, \dots, 5$, pro obě regresní rovnice implikují, že směrnice odpovídajících logitů pro jednotlivé prediktory za konstantních hodnot zbylých čtyř prediktorů jsou stejné. Jinými slovy předpokládáme *stejný efekt* vlivu prediktoru x_i , $i = 1, \dots, 5$, na logaritmus šance *přechodu z nejnižší hodnoty odezvy do zbylých dvou vyšších* jako na logaritmus šance *přechodu do nejvyšší hodnoty odezvy odkudkoli z nižších hodnot* škály. Vhodnost tohoto předpokladu bude diskutována v kapitole 5. Modely s proporcionálními šancemi byly odhadnuty statistickým softwarem R 2.2.1 pomocí funkce `polr` z balíku `MASS`.

4 Výsledky

Vyřazování proměnných z modelu bylo provedeno zpětnou metodou na základě *testu poměrem věrohodností*.

Zpětná eliminace proběhla v případě vysvětlované proměnné **ZISK** v tomto pořadí:

1. x_2 – znečištění (p=0,646);
2. x_3 – recyklace (p=0,551);
3. x_1 – energie (p=0,467);
4. x_4 – partneři (p=0,166).

Výsledný podmodel, který jsme získali měl následující tvar:

$$\text{logit } P(Y \geq j) = \ln \left(\frac{P(Y \geq j)}{P(Y < j)} \right) = \alpha_j + \beta_5 x_5, \quad j = 1, 2.$$

parametr	směrodatná		
	odhad	chyba odhadu	p-hodnota
α_1	0,659	0,691	
α_2	-1,817	0,731	
β_5 (certifikace)	0,665	0,305	0,025

Z výsledku logistické regrese lze vyvodit následující závěr. Pokud firma vynaloží větší úsilí k získání certifikace, konkrétně o jeden stupeň v rámci hodnocení, tak se firmě zvýší šance o 94 % ($\exp(0,665) = 1,94$) na zvýšení zisku alespoň o jeden stupeň. Pravděpodobnosti jednotlivých stupňů vlivu na zisk firmy v závislosti na vynaloženém úsilí k zisku certifikace lze určit pro nejnižší stupeň následovně:

$$\frac{1 - P(Y = 0)}{P(Y = 0)} = \exp(0,659 + 0,665 x_5)$$

$$P(Y = 0) = 1 / (1 + \exp(0,659 + 0,665 x_5)) \quad (1)$$

podobně pro nejvyšší stupeň:

$$\frac{P(Y = 2)}{1 - P(Y = 2)} = \exp(-1,817 + 0,665 x_5)$$

$$P(Y = 2) = 1 / (1 + \exp(1,817 - 0,665 x_5)) \quad (2)$$

a odečtením $P(Y = 1) = 1 - (P(Y = 0) + P(Y = 2))$ pak pro stupeň prostřední. Konkrétní hodnoty jednotlivých pravděpodobností jsou následující (graficky jsou znázorněné v levé části obrázku 2):

certifikace	$P(Y = 0)$	$P(Y = 1)$	$P(Y = 2)$
0	0,341	0,519	0,140
1	0,210	0,550	0,240
2	0,120	0,499	0,381

Zpětnou krokovací metodou v případě vysvětlované proměnné **IMAGE** byly vyřazeny následující vysvětlující proměnné:

1. x_3 – recyklace ($p=0,785$);
2. x_2 – znečištění ($p=0,739$);
3. x_1 – energie ($p=0,457$).

Podmodel, který jsme obdrželi po vyřazení výše uvedených proměnných, měl následující tvar:

$$\text{logit } P(Y \geq j) = \ln \left(\frac{P(Y \geq j)}{P(Y < j)} \right) = \alpha_j + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_5, \quad j = 1, 2.$$

parametr	směrodatná		
	odhad	chyba odhadu	p-hodnota
α_1	-0,560	0,787	
α_2	3,147	0,913	
β_4 (partneři)	0,716	0,408	0,070
β_5 (certifikace)	0,599	0,342	0,075

Z tabulky je patrné, že lze ještě vyřadit alespoň jednu vysvětlující proměnnou. Jelikož dosažené hladiny testů významnosti jednotlivých regresních koeficientů β_4 a β_5 vycházejí obdobně, lze za konečný podmodel považovat jeden z následujících modelů (tyto modely jsou téměř rovnocenné, jak je vidět z následujících výsledků):

1. Konečný podmodel vyjadřující závislost odezvy **IMAGE** na proměnné **partneři**:

parametr	směrodatná		
	odhad	chyba odhadu	p-hodnota
α_1	0,201	0,654	
α_2	-2,266	0,726	
β_4 (partneři)	0,981	0,385	0,007

2. Konečný podmodel vyjadřující závislost odezvy **IMAGE** na proměnné **certifikace**:

parametr	směrodatná		
	odhad	chyba odhadu	p-hodnota
α_1	0,098	0,681	
α_2	-2,387	0,774	
β_5 (certifikace)	0,813	0,316	0,008

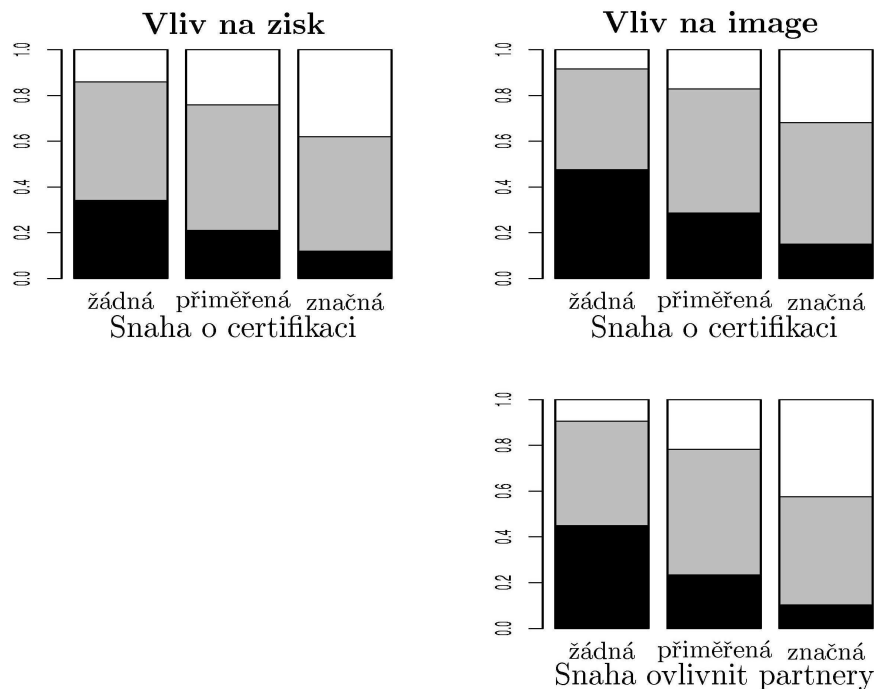
Z analýzy je vidět, že pokud firma zvýší svou snahu buďto ovlivnit partnery, nebo získat certifikaci (o jeden stupeň v rámci hodnocení), tak se firmě víc jak zdvojnásobí šance ($\exp(0,981) = 2,67$, resp. $\exp(0,813) = 2,26$) na zlepšení image alespoň o jeden hodnotící stupeň.

Pravděpodobnosti jednotlivých stupňů vlivu na image firmy v závislosti na vynaloženém úsilí ovlivnit postoj obchodních partnerů k životnímu prostředí, resp. na vynaloženém úsilí k získání certifikace, lze určit podobně jako v (1)–(2). Konkrétní hodnoty tedy jsou:

partneři	P(Y = 0)	P(Y = 1)	P(Y = 2)
0	0,450	0,456	0,094
1	0,235	0,549	0,217
2	0,103	0,472	0,425

certifikace	P(Y = 0)	P(Y = 1)	P(Y = 2)
0	0,476	0,440	0,084
1	0,287	0,542	0,172
2	0,151	0,530	0,319

Grafy k oběma tabulkám lze najít v pravé části obrázku 2. Z grafů vyplývá, že pokud obchodní společnost stupňuje snahu v dané oblasti, tak klesá pravděpodobnost, že by to na image společnosti vliv nemělo.



Obrázek 2: Pravděpodobnosti jednotlivých stupňů vlivu (0 - černá barva, 1 - šedá barva, 2 - bílá barva) na zisk, resp. image firmy v závislosti na vynaloženém úsilí v rozhodujících oblastech.

Srovnáme-li výsledné grafy z obrázku 2 získané na základě logistické regrese s jejich protějšky na obrázku 1 získané na základě popisné statistiky, vidíme obdobné proporce v jednotlivých sloupcích. Markantnější rozdíl je patrný pouze v případě vysvětlující proměnné **partneři**. Tuto odlišnost lze vysvětlit tím, že žádný respondent, který vykazoval přiměřenou snahu ovlivnit partnery, v dotazníku nevyplnil, že by to na image společnosti vliv nemělo, zatímco zvolený logistický model existenci takovéto dvojice (prediktor=1, odezva=0) automaticky předpokládá.

5 Diskuze

S ohledem na poměrně nízký počet pozorování, jsme ve snaze snížit počet parametrů na co možná nejnížší hodnotu předpokládali proporcionální šance. Splnění tohoto předpokladu jsme však ve finálních modelech ověřili pomocí testu o rovnosti příslušných regresních koeficientů v odpovídajících modelech nepředpokládajících proporcionální šance. Modely bez proporcionálních šancí byly odhadnuty v statistickém softwaru SAS 8.2 procedurou nlmixed. Výsledky testů jsou:

odezva	prediktor	odhad rozdílu koeficientů	směrodatná chyba odhadu	p-hodnota
ZISK	certifikace	0,191	0,500	0,705
IMAGE	partneři	0,315	0,742	0,673
IMAGE	certifikace	- 0,106	0,496	0,832

6 Závěr

Téma vztahu společnosti k životnímu prostředí je v české podnikatelské sféře relativně nové a místy stále přetrvává vnímání této problematiky jako něčeho navíc, případně jako nutného zla. Ze statistické analýzy vyplývá, že úsilí se odráží jak na zisku, tak rovněž na image společnosti. Výsledky průzkumu tedy nejsou v rozporu s tvrzením poslední doby, že investovat do životního prostředí se vyplatí (je zde téměř dvojnásobná šance na progres v profitu a víc jak dvojnásobná šance na vylepšení image společnosti). V našem případě se jeví jako zásadní zisk certifikace ISO 14001 a práce s obchodními partnery.

Všechny odpovědi odrážely subjektivní názory respondenta, což lze považovat za nevýhodu tohoto šetření. Úsilí je relativně obtížné objektivně posoudit, v případě vlivu máme v úmyslu při dalším šetření doplňkově vyhodnotit i některé základní ekonomické výstupy společností, například zisk a tržby s ohledem na velikost společnosti.

Důležitým předpokladem pro další zpracování je také sběr většího množství dat, aby bylo možné bez ztráty vypovídací schopnosti odpovědi členit například dle velikosti společnosti či dle oboru podnikání. Navíc díky malým četnostem pro jednotlivé kombinace proměnných bylo ve výše provedené analýze provedeno hrubší (třístupňové) škálování, než obsahoval samotný dotazník, kde se hodnotilo šestístupňově.

Reference

- [1] Agresti A. (2002). *Categorical data analysis*, 2nd edition. John Wiley & Sons., Inc., New Jersey.
- [2] Dvořák J., Komárková L. (2005). *Managers and the environment in the Czech Republic*. In: Šauer P., Ed., *Environmental Economics Policy and International Relations, Proceedings of 7th Seminar of Postgraduate Students, Young Scientists and Researches*, Praha, 102–111.
- [3] Naffziger D. W., Ahmed N. U., Montagno R. V. (2003). *Perceptions of environmental consciousness in u.s. small businesses: An empirical study*. S.A.M. *Advanced Management Journal* **68**, 23–32.

Adresa: L. Komárková, J. Dvořák, FM VŠE, Jarošovská 1117/II,
377 01 Jindřichův Hradec

E-mail: komarkol@fm.vse.cz, dvorakji@fm.vse.cz

MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ SPOTŘEBY ZEMNÍHO PLYNU DOMÁCNOSTÍ A MALOODBĚRATELŮ

Ondřej Konár

Klíčová slova: Zemní plyn, nelineární regrese.

Abstrakt: Spotřeba zemního plynu domácností a maloodběratelů je zjišťována zpravidla jednou ročně odečtením plynoměru. V každém měsíci je odečtena část (přibližně 1/12) zákazníků. V každém okamžiku proto existuje určitý objem plynu, který nebyl vyfakturován. Tento objem je třeba odhadnout pomocí vhodného matematického modelu. V příspěvku bude představen nelineární regresní model GAMMA pro odhad objemu nevyfakturovaného plynu, vyvíjený v Ústavu informatiky AV ČR. Model je využíván v rutinním provozu v Západočeské plynárenské, a.s.

1 Úvod

Pro plynárenské společnosti je důležité znát celkový objem prodaného plynu k danému datu. Tento objem však nelze v žádném okamžiku změřit, neboť narozdíl od velkoodběratelů a středních odběratelů, kteří jsou měřeni po hodinách, je spotřeba domácností a maloodběratelů odečítána z plynoměrů v intervalu přibližně jeden rok. Odečty plynoměrů probíhají cyklicky v průběhu celého roku, tzn. že je každý den v roce odečtena část zákazníků.

Důsledkem toho je fakt, že se objem prodaného plynu k danému dni dělí na část, která již byla vyfakturována, a na část, která byla odebrána zákazníky, ale vyfakturována nebyla (a tudíž není známá). Neznámou část, tzv. *nevyfakturovaný plyn* je zapotřebí odhadnout vhodným modelem. V článku bude popsán model, který zvolila řešitelská skupina Ústavu informatiky AV ČR (ÚI). Pro srovnání bude uveden též model, kterým je běžně odhadována spotřeba např. při změně ceny plynu.

2 Otopová křivka

Česká legislativa poskytuje nástroj pro modelování spotřeby zemního plynu. Spotřeba $Y(\tau)$ za období τ se odhadne vztahem

$$\hat{Y}(\tau) = Y(\tau^*) \frac{|\tau|}{|\tau^*|}, \quad (1)$$

kde $|\tau|, |\tau^*|$ je počet dní období τ (resp. τ^*) a $Y(\tau^*)$ je skutečná spotřeba (hodnota posledního odečtu) za období τ^* , jestliže je spotřeba $Y(\tau^*)$ menší než vyhláškou stanovená mez.

Je-li poslední odečtená spotřeba $Y(\tau^*)$ vyšší než vyhláškou stanovená mez (a předpokládá se tudíž vytápění zemním plynem), odhadne se spotřeba $Y(\tau)$ vztahem

$$\hat{Y}(\tau) = Y(\tau^*) \frac{|\tau|}{365 \sum_{t \in \tau^*} \xi_t}, \quad (2)$$

kde ξ_t jsou stanovené koeficienty pro jednotlivé dny roku t , přičemž platí, že koeficienty se liší pouze v jednotlivých měsících roku, pro všechny dny z daného měsíce jsou hodnoty ξ_t shodné. Dále platí $\sum_{t=1}^{365} \xi_t = 1$. Koeficienty pro zimní měsíce mají vyšší hodnotu než koeficienty pro měsíce letní. Hodnoty koeficientů ξ_t stanovené vyhláškou jsou v plynárenském slangu známy pod pojmem *otopová křivka*.

Tento přístup je pochopitelně velmi hrubý. Z analýz dodatečných dat, prováděných v ÚI, vyplývá, že existují zákazníci s nízkou spotřebou, kteří přesto mají sezónní charakter spotřeby. Hodnoty koeficientů navíc nejsou nijak aktualizovány a nevystihují proto aktuální chování zákazníků. Přes všechny nevýhody se odhady (1) a (2) používají ve většině plynáren k odhadu spotřeby při změně ceny plynu.

3 Model GAMMA

V ÚI je ve spolupráci se Západočeskou plynárenskou, a.s. (ZČP) vyvíjen model pro odhad spotřeby zemního plynu, nazvaný GAMMA. Jedná se o nelineární regresní model, jehož parametry jsou odhadovány pravidelně jednou za 3 měsíce. Oproti *otopové křivce* navíc zahrnuje korekce na odchylky od teplotního normálu. Tato korekce je důležitá s ohledem na to, že spotřeba zemního plynu zákazníků využívajících plyn k vytápění (tj. zákazníků s největší spotřebou) je silně závislá na aktuální teplotě.

3.1 Segmentace zákazníků

Sezónnost, teplotní závislost a další charakteristiky průběhu spotřeby jsou závislé na způsobu užití zemního plynu. Proto jsou zákazníci pro účely modelování rozřazeni do několika tříd. Parametry modelu se pak odhadují zvlášť pro každou třídu zákazníků. Zákazníci jsou tříděni podle tzv. *typu klienta* (domácnost nebo maloodběratel), který víceméně souvisí s výší odběru, a podle tzv. *typu smlouvy*. Ten je dán způsobem užívání zemního plynu, přičemž se uvažují kombinace těchto způsobů využití: vaření, ohřev vody (TUV), vytápění a (pouze pro maloodběr) technologie. Takto vzniká celkem 7 typů smlouvy pro domácnosti a 9 typů smlouvy pro maloodběr. Celkem je tedy uvažováno 16 tříd zákazníků podle typu klienta a typu smlouvy.

3.2 Odhad spotřeby jednotlivého zákazníka

Pro spotřebu $Y_{ik}(t)$ zákazníka i ze třídy k ve dni t uvažujeme model

$$Y_{ik}(t) = \mu_{ik}\Phi_k(t) + \varepsilon_{ikt}, \quad (3)$$

kde μ_{ik} je efekt konkrétního zákazníka, $\Phi_k(t)$ je základ modelu, specifický pro každou třídu zákazníků k a ε_{ikt} je náhodná chyba, o níž předpokládáme, že má nulovou střední hodnotu a rozptyl úměrný hodnotě parametru μ_{ik} .

Základ modelu $\Phi_k(t)$ má následující tvar:

$$\Phi_k(t) = \Psi(t)e^{-\gamma_k f(T_t, N_t)} + p_k, \quad (4)$$

kde $\Psi(t)$ je sezónní složka modelu, γ_k je parametr určující míru teplotní závislosti spotřeby ve skupině zákazníků k , p_k je stálá složka spotřeby zákazníků ze skupiny k , T_t je skutečná a N_t normálová teplota ve dni t .

Vhodnou volbou parametrů p_k a γ_k se docílí tvaru funkce $\Phi_k(t)$, který odpovídá danému segmentu zákazníků k . Zákazníci, kteří využívají plyn k vytápění mají rozdílné chování v zimě a v létě. Proto byl pro tyto zákazníky zaveden modifikovaný tvar funkce $\Phi_k(t)$:

$$\Phi_k^{otop}(t) = \begin{cases} \Psi(t)e^{-\gamma_k f(T_t, N_t)} + p_k & \text{pro } \bar{T}_t^{(3)} < 14 \\ q_k & \text{pro } \bar{T}_t^{(3)} \geq 14 \end{cases}, \quad (5)$$

kde q_k je konstanta určující průměrnou výši spotřeby v létě a $\bar{T}_t^{(3)}$ je průměrná teplota za poslední tři dny (tj. za dny $t, t-1, t-2$).

Pro odhad parametrů modelu jsou k dispozici následující data:

1. Běžné odečty všech zákazníků (tak jak jsou odečítaní, tj. za období délky přibližně jeden rok)
2. Mimořádné měsíční odečty cca 1700 zákazníků
3. Měsíční údaje o celkové spotřebě domácností a maloodběratelů v ZČP.
4. Denní měření dvou vybraných lokalit (pouze údaje o celkové spotřebě maloodběratelů a domácností v těchto lokalitách)
5. Hodinová měření cca 100 zákazníků

3.3 Odhad efektu jednotlivého zákazníka

Parametr μ_{ik} , tj. efekt jednotlivého zákazníka je odhadován při běhu modelu metodou vážených nejmenších čtverců. V modelu (3) předpokládáme, že pro střední hodnotu spotřeby $Y_{ik}(t)$ platí

$$E Y_{ik}(t) = \mu_{ik}\Phi_k(t), \quad (6)$$

rozptyl je úměrný střední hodnotě, tj.

$$\text{var } Y_{ik}(t) = \sigma^2 \mu_{ik} \Phi_k(t) = \nu_{ik} \Phi_k(t) \quad (7)$$

a dále, že náhodné chyby ε_{ikt} jsou v různých dnech nekorelované, tj.

$$\forall t_1 \neq t_2 : \text{cov}(Y_{ik}(t_1), Y_{ik}(t_2)) = 0. \quad (8)$$

Díky předpokladu (8) lze vztahy (6) a (7) rozšířit na libovolný časový interval τ :

$$\text{E } Y_{ik}(\tau) = \mu_{ik} \Phi_k(\tau), \quad (9)$$

$$\text{var } Y_{ik}(\tau) = \nu_{ik} \Phi_k(\tau), \quad (10)$$

kde $Y_{ik}(\tau) = \sum_{t \in \tau} Y_{ik}(t)$ a $\Phi_k(\tau) = \sum_{t \in \tau} \Phi_k(t)$.

Předpokládejme, že známe spotřeby $Y_{ik}(\tau_1), \dots, Y_{ik}(\tau_{n_k})$ zákazníka i ze segmentu k za období $\tau_1, \dots, \tau_{n_k}$. Z nich pak odhadneme parametr μ metodou vážených nejmenších čtverců:

$$\hat{\mu}_{ik} = \arg \min_{\mu} S^2(\mu) = \arg \min_{\mu} \sum_{j=1}^{n_k} \frac{(Y_{ik}(\tau_j) - \mu \Phi_k(\tau_j))^2}{\Phi_k(\tau_j)}, \quad (11)$$

což odpovídá řešení rovnice

$$\frac{\partial S^2(\mu)}{\partial \mu} = -2 \sum_{j=1}^{n_k} \frac{\Phi_k(\tau_j) (Y_{ik}(\tau_j) - \mu \Phi_k(\tau_j))}{\Phi_k(\tau_j)^2} = 0, \quad (12)$$

které vede na odhad

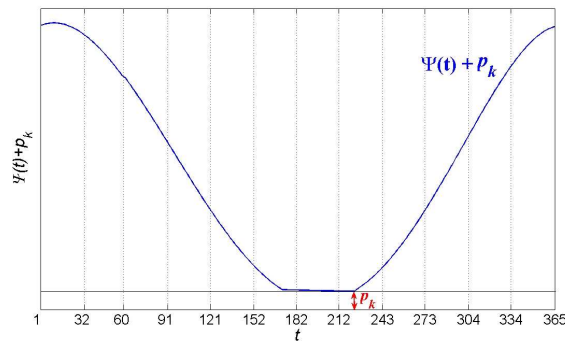
$$\hat{\mu}_{ik} = \frac{\sum_{j=1}^{n_k} Y_{ik}(\tau_j)}{\sum_{j=1}^{n_k} \Phi_k(\tau_j)}. \quad (13)$$

Počet odečtů (n_k), z nichž je odhadován parametr μ_{ik} , je závislý na segmentu k a je optimalizován čtvrtletně spolu s ostatními parametry modelu. Podrobněji viz odstavec 3.6.

3.4 Odhad sezónní složky modelu

Odhad sezónní složky modelu je problematická záležitost, neboť v odečtech za rok není dostatek informace o sezónním chování. K odhadu funkce $\Psi(t)$ byly použity měsíční údaje o celkové spotřebě ZČP. Tyto hodnoty byly proloženy polynomem pátého stupně metodou nejmenších čtverců. Později došlo z důvodu opakovaného nadhodnocování v červenci na přání ZČP k umělému navýšení letních hodnot. Z důvodu absence informace o měsíčním průběhu spotřeby v jednotlivých segmentech zákazníků je sezónní složka modelu společná pro všechny segmenty.

Průběh funkce $\Psi(t)$ je zobrazen na obrázku 1. Číselné hodnoty na ose y jsou vynechány, neboť jsou obtížně interpretovatelné a pro znázornění tvaru sezónního průběhu nemají význam.



Obrázek 1: Sezónní složka modelu.

3.5 Teplotní korekce

Teplotní korekci tvoří člen $e^{-\gamma_k f(T_t, N_t)}$ z rovnice (4). Parametr γ_k je odhadován čtvrtletně spolu s ostatními parametry (více v odstavci 3.6).

Vhodná volba funkce f se ukazuje jako klíčová pro správný chod modelu při větším časovém rozlišení (např. po dnech). V současné době je použita lineární funkce „oříznutá“ pro teploty vyšší než 14C. Z experimentů totiž vyplývá, že při teplotách nad 14C je spotřeba plynu u většiny zákazníků teplotně nezávislá.

Je tedy volena funkce

$$f(T_t, N_t) = \tilde{T}_t - \tilde{N}_t, \quad (14)$$

kde

$$\tilde{T}_t = \begin{cases} T_t & \text{pro } T_t < 14 \\ 14 & \text{pro } T_t \geq 14 \end{cases} \quad \tilde{N}_t = \begin{cases} N_t & \text{pro } N_t < 14 \\ 14 & \text{pro } N_t \geq 14 \end{cases}. \quad (15)$$

Lineární tvar funkce f však způsobuje přílišnou citlivost modelu na teplotní změny, která neodpovídá realitě. Proto se pracuje na vhodném nelineárním tvaru funkce f .

3.6 Odhad ostatních parametrů

Ostatní parametry modelu, tj. „hloubka historie“ n_k , teplotní parametr γ_k , časově nezávislá složka spotřeby p_k a letní spotřeba (pro „otopové“ segmenty) q_k jsou odhadovány jednou za tři měsíce s využitím odečtů z celého zákaznického kmene. Z učícího souboru jsou vyřazováni zákazníci s nestabilním chováním (tj. ti, co „přeskočili“ o více než jedno ceníkové pásmo), zákazníci s více plynoměry (vzhledem ke korelovanosti měřených spotřeb na těchto plynoměrech) a dále zákazníci s nestandardním chováním, vytipovaní pracovníky ZČP.

Odhad parametrů získáváme pro každý segment k minimalizací funkce

$$K(p_k, q_k, \gamma_k, n_k) = \frac{1}{N_k} \sum_{i \in k} \frac{|Y_{ik}(\tau_{ik}) - \hat{Y}_{ik}(\tau_{ik})|}{|\tau_{ik}|}, \quad (16)$$

kde $Y_{ik}(\tau_{ik})$ je poslední známý odečet zákazníka i ze segmentu k za období τ_{ik} , $\hat{Y}_{ik}(\tau_{ik})$ je odhad spotřeby za toto období modelem (3), $|\tau_{ik}|$ je počet dní období τ_{ik} a N_k je celkový počet zákazníků v segmentu k .

Optimalizace probíhá na síti parametrů metodou největšího spádu. Pracuje se na využití pokročilejších numerických metod (Newton-Raphson a jiné).

4 Problémy k řešení

Prezentovaný model je provozně využíván v ZČP, zároveň je však dále vyvíjen s podporou grantu GA AV ČR. Existuje několik problémů k řešení, které budou shrnuty v tomto odstavci.

4.1 Optimalizace parametrů

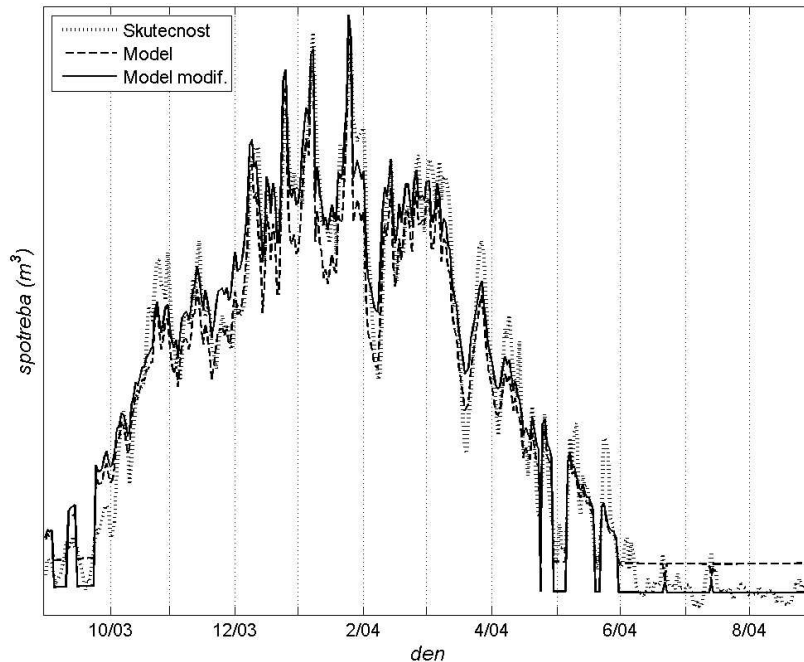
K optimalizaci parametrů se zatím využívají pravidelné odečty (téměř) všech zákazníků. Tyto odečty jsou však zpravidla roční a chybí v nich proto informace o denním průběhu spotřeb. Tento fakt se promítá do hodnot odhadů parametrů. Čištění databáze zákazníků má bohužel vedlejší efekt v podobě stabilizace odečítacího intervalu na 1 rok (a s tím související úbytek informace o průběhu spotřeby během roku).

Chyba modelu při odhadu roční spotřeby se pohybuje okolo 1-2 %. Naproti tomu při větším rozlišení (po měsících, po dnech) jsou chyby vyšší. Zpravidla dochází k nadhodnocení spotřeby v létě a podhodnocení v zimě. Pro optimalizaci parametrů je proto zapotřebí využít mimořádných měření s podrobnější informací. V současné době jsou k dispozici měsíční měření vybraných zákazníků za období přibližně 1 roku.

Nutnost využití dalších dat ilustruje i fakt, že když uměle snížíme hodnotu parametru q_k („letní spotřeba“ pro zákazníky, kteří plynem topí), chyba modelu na součtu za rok se změní minimálně (řádově setiny až desetiny procenta v závislosti na segmentu), avšak chyba v jednotlivých dnech se sníží. Na obrázku 2 je zobrazen průběh modelu s optimalizovanými parametry (čárkovaně) a modifikovaného modelu s uměle sníženým parametrem q_k (plná čára) proti naměřené skutečnosti (tečkovaně). Test byl proveden na denních datech z vybrané lokality (k dispozici jsou pouze data o celkové spotřebě v celé oblasti).

4.2 Způsob optimalizace parametrů

Kromě dat je při optimalizaci důležitý také vlastní optimalizační proces. Prvním problémem je vhodná volba kritériální funkce. Ta je do určité míry ovlivňována přáním ZČP. V průběhu dalšího vývoje však bude snaha o použití



Obrázek 2: Test modelu GAMMA na denních datech.

jednotné kritériální funkce pro odhad všech parametrů (což v současnosti neplatí).

Dalším problémem je optimalizační algoritmus. Vzhledem ke složitosti tvaru kritériální funkce (ať již používané nebo i vážených nejmenších čtverců) neexistuje vzorec pro snadný výpočet odhadu, jako např. pro odhad metodou nejmenších čtverců v lineární regresi. Z toho důvodu jsou zkoumány numerické metody, které by zrychlily optimalizační proces.

4.3 Odhad sezónní složky a teplotního korektoru

Sezónní složka modelu $\Phi_k(t)$ v některých segmentech neodpovídá zcela skutečnému průběhu spotřeby v roce. Proto je zkoumána možnost odhadu této funkce z mimořádných měření, která jsou k dispozici vhodnou parametrizací, případně využitím neparametrického přístupu.

Dále se testují různé nelineární tvary funkce f v teplotním korektoru (14).

4.4 Specifické požadavky ZČP

Kromě výše uvedených problémů spíše matematického charakteru se vyskytují i specifické problémy, plynoucí z plynárenské praxe. Například je žádoucí, aby rezidua modelu (alespoň v součtu přes segment zákazníků) byla záporná, což je fyzikálně zdůvodnitelné (ztráty v distribuční soustavě). Naproti tomu kladná rezidua jsou fyzikálně nemožná (zákazníci nemohou vyrábět plyn)

a jsou velmi špatně přijímána auditory, a tudíž i ZČP.

5 Závěr

Byl prezentován nelineární regresní model pro odhad spotřeby zemního plynu, vyvíjený v Ústavu informatiky AV ČR a využívaný v Západočeské plynárenské, a.s. Vývoj modelu je dlouhodobý proces, který bude probíhat za podpory grantu minimálně do roku 2009. V tomto příspěvku je tedy zachycen dnešní stav vývoje. Dále byly naznačeny určité směry dalšího výzkumu.

Cílem příspěvku nebylo seznámit čtenáře s nějakou novou statistickou metodou či objevem, ale spíše ukázat situaci statistika, který aplikuje známé a běžné metody, avšak je limitovaný množstvím a kvalitou dat, která jsou k dispozici (sběr dat je finančně náročný), a dále požadavky koncových uživatelů statistického modelu.

Reference

- [1] Čermáková J., Matějovic J., Naxerová O., Bečvář J., Brabec M., Brabec T., Konár O., Malý M., Pelikán E., Šimůnek M., Vondráček J. (2005). *Matematické modelování spotřeby zemního plynu zákazníků bez průběhového měření*. Plyn, č. 2/2005, ISSN 0032-1761, 34–37.
- [2] Čermáková J., Bečvář J., Naxerová O., Brabec M., Brabec T., Konár O., Malý M., Musílek P., Pelikán E., Šimůnek M. (2005). *Natural gas consumption modeling: customers without course measurement*. Proc. of the 7th SIMONE Congress (CD), Lednice, October 11-14.
- [3] Čermáková J., Volfová-Naxerová O., Bečvář J. (2005). *Stanovení objemu nevyfakturovaného plynu pomocí virtuální fakturace a matematického modelu GAMMA*. Plyn, č. 4/2005, ISSN 0032-1761, 2005, str. 76–79.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GA AV ČR č. 1ET400300513 a výzkumným záměrem ÚI AV ČR č. AV0Z10300504. Dílo je výsledkem dlouhodobé spolupráce pracovních skupin ÚI AV ČR (Marek Brabec, Tomáš Brabec, Ondřej Konár, Marek Malý, Emil Pelikán, Milan Šimůnek, Jiří Vondráček) a ZČP, a.s. (Josef Bečvář, Ladislava Blahová, Jana Čermáková, Olga Volfová-Naxerová)

Adresa: O. Konár, ÚI AV ČR, Pod vodárenskou věží 2, 182 07 Praha 8

E-mail: konar@cs.cas.cz

DISTRIBUTION OF THE DELAY IN THE CHANGE-POINT DETECTION

Alena Koubková

Keywords: Change-point, L_1 -residuals, time of detection.

Abstract: Assume sequentially coming data following a location model, such that the location parameter changes at some unknown time. In [3] an L_1 -procedure to detect the change is proposed. Here we study the distribution of the time of change detection and the order between the true time of change and its detection in some special situations.

1 Introduction

Assume sequentially coming data following a location model $Y_i = \mu_i + e_i$, $1 \leq i < \infty$, where Y_i are the observed data, μ_i are the location parameters and e_i are the random errors satisfying the condition

- (A) e_i , $1 \leq i < \infty$ are independent identically distributed (i.i.d.) random variables with distribution function F symmetric about zero, the second derivative of F in the neighborhood of zero exists and $F'(0) = f(0) > 0$.

We know that for some historical period of length m , the location parameter was constant, i.e. $\mu_1 = \dots = \mu_m = \mu_0$ and that at some unknown time $m + k^*$ its value changes. So we consider the model

$$\begin{aligned} Y_i &= \mu_0 + e_i, & 1 \leq i < m + k^* \\ Y_i &= \mu_0 + \delta_m + e_i, & m + k^* \leq i < \infty, \quad \delta_m \neq 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Such situation is studied in [3], a procedure, which detects the change with probability 1, while controlling the probability of false alarms, is proposed and its asymptotic properties are formulated. The procedure is based on cumulative sums of L_1 -residuals,

$$\tilde{Q}(m, k) = \sum_{i=m+1}^{m+k} \tilde{e}_i = \sum_{i=m+1}^{m+k} \text{sign}(Y_i - \tilde{\mu}_m), \quad (2)$$

where $\tilde{\mu}_m$ is the median of the historical data Y_1, \dots, Y_m .

The change is detected at the so called *stopping time* $\tau(m)$ defined by

$$\tau(m) = \inf\{k \geq 1 : |\tilde{Q}(m, k)|/g(m, k, \gamma) \geq c_m(\alpha)\} \quad (3)$$

with understanding that $\inf\{\emptyset\} = \infty$. The function $g(m, k, \gamma)$ is called a *stopping boundary function* and is defined as

$$g(m, k, \gamma) = \sqrt{m} \left(1 + \frac{k}{m}\right) \left(\frac{k}{m+k}\right)^\gamma, \quad k = 1, 2, \dots$$

where $\gamma \in [0, 1/2)$ is a tuning constant modifying the ability of the procedure to detect better early or late changes. The constant $c_m(\alpha)$ (latter only c) is a critical value determined via restrictions on type I and type II error rates. It ensures that the probability of false alarm is bounded with $\alpha \in (0, 1)$ and that the probability of a true change detection tends to 1, as $m \rightarrow \infty$.

The aim of the present paper is to study the distribution of the stopping time $\tau(m)$ in some special situations.

The main results are formulated in Section 2, the accompanying simulations are described in Section 3 and the proofs are sketched in Section 4. Detailed proofs will be published in [4].

2 Main results

Without loss of generality assume $\mu_0 = 0$. Next assume the amount of the change δ_m tending to zero as $m \rightarrow \infty$, but not too fast, particularly,

$$(B) \quad \delta_m \rightarrow 0, \quad \sqrt{m}|\delta_m| \rightarrow \infty.$$

Moreover, we require the change occurring not too late in time, i.e.,

$$(C) \quad k^* = k^*(m) = O(m^\theta) \text{ with some } 0 \leq \theta < \left(\frac{1-2\gamma}{2(1-\gamma)} \right)^2.$$

Under such conditions the following theorem holds.

Theorem 2.1. *Let model (1) and assumptions (A), (B) and (C) be satisfied. Let $\gamma \in [0, 1/2)$. Then*

$$\lim_{m \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{\tau(m) - a(m)}{b(m)} \leq x \right\} = \Phi(x),$$

where $\Phi(x)$ is the distribution function of the standard normal variable and

$$a(m) = \left(\frac{c_m(\alpha)m^{1/2-\gamma}}{2f(0)\delta_m} \right)^{1/(1-\gamma)}, \quad b(m) = \frac{\sqrt{a(m)}}{(1-\gamma)2f(0)\delta_m}$$

and $c_m(\alpha)$ is the critical value described in (3).

Proof. The proof is postponed to Section 4. □

Based on the length of historical data, the distribution of the random errors and the critical value $c_m(\alpha)$, one can estimate the asymptotic expectation and variance of the stopping time $\tau(m)$. Note that both tend to infinity as $m \rightarrow \infty$ at the order $O\left(m^{\frac{1-2\gamma}{2(1-\gamma)}}\right)$. Simulation study in Section 3 indicates that the convergence is quite slow.

Now assume milder conditions on the time of change k^* , but more restrictive assumption on the amount of change δ_m . Particularly, we assume

$$(D) \quad k^* = k^*(m) = dm^\beta, \quad \beta \in (0, \infty), d > 0, \quad \delta_m = \delta, \text{ for all } m.$$

In this case, the exact distribution of $\tau(m)$ is not known. Only the order of the delay between the stopping time $\tau(m)$ and the true time of change can be estimated. It depends on the true change-point, particularly on β , as follows.

Theorem 2.2. *Let the model (1) and the conditions (A) and (D) be satisfied. Then the following statements hold.*

1. If $0 < \beta < (1 - 2\gamma)/2(1 - \gamma)$ then $\tau(m) - k^* = O(m^{\frac{1-2\gamma}{2(1-\gamma)}})$,
2. if $(1 - 2\gamma)/2(1 - \gamma) \leq \beta < 1$ then $\tau(m) - k^* = O(m^{1/2+\gamma(\beta-1)})$ and
3. if $\beta \geq 1$ then $\tau(m) - k^* = O(m^{\beta-1/2})$.

Proof. The proof is postponed to Section 4. □

3 Simulations

For the situation of Theorem 2.1 a small simulation study was conducted to confirm the result. The following values of parameters were considered: $\gamma = 0, 0.25, 0.49$; $m = 50, 100, 500, 1000, 5000$; $\delta_m = 5m^{-1/4}$; $\theta = \left(\frac{1-2\gamma}{2(1-\gamma)}\right)^2 / 2$; $\alpha = 0.05$ and $k^* = 2m^\theta, 20m^\theta$. The random errors were assumed to follow the Laplace distribution. All the possible combinations, i.e., 24 different situations were studied. For each of them a sequence of length 10 000 was simulated, evaluated the test statistics and found the stopping time $\tau(m)$. Next we transformed this time to the desired form $\tau'(m) = (\tau(m) - a(m))/b(m)$. The procedure was repeated 5000 times. The resulting samples were summarized and the normality was tested with Shapiro-Wilk test.

The latter time of change, i.e., $k^* = 20m^\theta$ was found to be too large, in order the convergence to the normal distribution is reasonable fast. Therefore, we continue with the comments for $k^* = 2m^\theta$ only. The change was detected fastest with $\gamma = 0.49$, which is in accordance with the theoretical results (the considered changes occur immediately after beginning of monitoring).

The mean value converges to the desired value fastest for $\gamma = 0.49$, whereas the convergence of the standard deviation is comparable for all γ 's.

On the other hand, the shape of the distribution converges fastest for $\gamma=0$. To compare the shape of the distribution for different γ 's, Figure 1 displays the histograms of $\tau'(m)$ for $m = 5000$ and all studied values of γ . In Table 1, there are the numerical characteristics of $\tau'(m)$ for $\gamma = 0.49$ and different m 's ($m = 50$ is omitted, since it gives too large values of $\tau'(m)$).

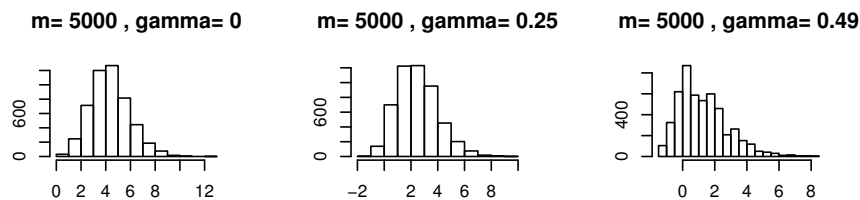


Figure 1: Histograms of $\tau'(m)$, with the parameters $m = 5000, k^* = 2m^\theta$.

	mean	std. dev.	1 st	median	3 th Q
$m = 100$	6.838	3.356	4.812	6.018	8.831
$m = 500$	3.066	2.109	1.579	2.649	4.254
$m = 1000$	2.325	1.824	1.003	2.134	3.139
$m = 5000$	1.258	1.525	0.023	0.916	2.086

Table 1: Summaries of $\tau'(m)$, with the parameters $\gamma = 0.49$, $k^* = 2m^\theta$.

The Shapiro-Wilk test reject the normal distribution of the variables $\tau'(m)$ for all of the considered m . Therefore, although the convergence of $\tau'(m)$ to $N(0, 1)$ distribution is obvious, it is quite slow.

4 Proofs

In the proof of Theorem 2.1 we proceed as [1]. Note that in our case $\sigma^2 = \text{Var}(\text{sign}(e_i)) = 1$ and $\Delta_m = 2f(0)\delta_m$. The proof is based on the relationship between the stopping time and the ratios

$$\frac{|\tilde{Q}(m, k)|}{g(m, k, \gamma)}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4)$$

At first we formulate some auxiliary lemmas.

Lemma 4.1. *Let the model (1) and the conditions (A), (B) and (C) be satisfied. Then*

$$\sup_{1 \leq k < \infty} \frac{\left| \tilde{Q}(m, k) - \sum_{i=m+1}^{m+k} \text{sign}(e_i) + \frac{k}{m} \sum_{j=1}^m \text{sign}(e_j) - (k - k^*)2f(0)\delta_m I_{\{k > k^*\}} \right|}{g(m, k, \gamma)} = o_p(1), \quad (5)$$

where $I_{\{A\}}$ denotes the indicator of a set A .

Proof. We will use the almost sure representation of the sample median (see e.g. [6, Theorem 2.5.1]),

$$\tilde{\mu}_m = \frac{\sum_{j=1}^m \text{sign}(e_j)}{2mf(0)} + R_m \quad \text{a.s.}, \quad (6)$$

where $R_m = O(m^{-3/4}(\ln m)^{3/4})$. By this representation and by the Law of iterated logarithm, we obtain $\tilde{\mu}_m = O(\sqrt{(\ln \ln m)/m})$, a.s., as $m \rightarrow \infty$ and therefore $\tilde{\mu}_m \rightarrow \mu_0$, a.s.

Define variables $Z_i = \text{sign}(Y_i - \tilde{\mu}_m) - \text{sign}(e_i)$ for $i = m + 1, m + 2, \dots$ and note that given $\tilde{\mu}_m$ these variables are i.i.d. For the first two conditional moments of $\sum_{i=m+1}^{m+k} Z_i$ given $\tilde{\mu}_m$, we get as $m \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(\sum_{i=m+1}^{m+k} Z_i \middle| \tilde{\mu}_m \right) &= \left(-\frac{k}{m} \sum_{j=1}^m \text{sign}(e_j) + (k - k^*)2f(0)\delta_m I_{\{k > k^*\}} \right) (1 + o(1)), \\ \frac{1}{k} \text{Var} \left(\sum_{i=m+1}^{m+k} Z_i \middle| \tilde{\mu}_m \right) &= O \left(\sqrt{\frac{\ln \ln m}{m}} \right). \end{aligned}$$

Both expressions hold almost surely and uniformly in k .

Note that the investigation of the left hand side of (5) reduces to study of

$$\sup_{1 \leq k < \infty} \frac{\left| \sum_{i=m+1}^{m+k} Z_i - \mathbf{E} \left(\sum_{i=m+1}^{m+k} Z_i | \tilde{\mu}_m \right) \right|}{g(m, k, \gamma)},$$

and we will show that this supremum is of order $O_p(1)$.

Note that for m large enough, there exists constant c_1 or c_2 , respectively, such that

$$g(m, k, \gamma) \leq \begin{cases} c_1 m^{1/2-\gamma} k^\gamma & \text{when } k \leq m, \\ c_2 m^{-1/2} k & \text{when } k > m. \end{cases}$$

The Kolmogorov-Hájek-Rényi-Chow theorem (see, e.g., [5]), gives (applied separately for $k < m$ and $k > m$ and calculated similarly as in [3]), as $m \rightarrow \infty$

$$P \left(\max_{1 \leq k < \infty} \frac{\left| \sum_{i=m+1}^{m+k} Z_i - \mathbf{E} \left(\sum_{i=m+1}^{m+k} Z_i | \tilde{\mu}_m \right) \right|}{g(m, k, \gamma)} > B \middle| \tilde{\mu}_m \right) = O \left(B^{-2} \sqrt{\frac{\ln \ln m}{m}} \right), \text{ a.s.,}$$

for arbitrary $B > 0$. This probability tends to zero, which finish the proof. \square

Lemma 4.2. *Let the assumptions of Theorem 2.1 be satisfied. For $x \in R$ define*

$$N = N(x, m) = \left(\frac{cm^{1/2-\gamma}}{2f(0)\delta_m} - x \left(\frac{c^{1/2-\gamma} m^{(1/2-\gamma)^2}}{(2f(0)\delta_m)^{3/2-2\gamma}} \right)^{1/(1-\gamma)} \right)^{1/(1-\gamma)}. \quad (7)$$

For such N the following statements hold as $m \rightarrow \infty$

- a) (i) $\frac{N}{m} \rightarrow 0$, (ii) $\sqrt{N}\delta_m \rightarrow \infty$, (iii) $\frac{k^*}{N} \rightarrow 0$, (iv) $\frac{k^*}{m} \rightarrow 0$,
- b) $\lim_{m \rightarrow \infty} \left(\frac{N}{m} \right)^{\gamma-1/2} \left(c - \frac{2f(0)\delta_m N}{\sqrt{m}(N/m)^\gamma} \right) = x$.

Proof. The proof can be found in [1]. \square

Lemma 4.3. *Let the assumptions of Theorem 2.1 be satisfied, then*

$$\left(\frac{N}{m} \right)^{\gamma-1/2} \left(\max_{1 \leq k < k^*} \frac{|\tilde{Q}(m, k)|}{g(m, k, \gamma)} - \frac{2f(0)\delta_m N}{\sqrt{m} \left(\frac{N}{m} \right)^\gamma} \right) \xrightarrow{P} -\infty. \quad (8)$$

Proof. Since $\gamma < 1/2$, Lemma 2 part a) (ii) gives that $(N/m)^{1/2} \rightarrow \infty$. Therefore it is enough to show that the rest of (8) is negative and of order $O_p(1)$.

First we treat the maximum, where we use the approximation of Lemma 4.1 and the [2] approximation for bounded i.i.d. random variables, which gives that

$$\sup_{1 \leq k < \infty} k^\nu \left| \sum_{i=m+1}^{m+k} \text{sign}(e_i) - W_m(k) \right| = O_p(1) \quad (9)$$

for any $\nu > 2$, where W_m denotes a Wiener process. By (9), Lemma 4.2, part (iv), the properties of Wiener process and the Central limit theorem, which gives $\sum_{i=1}^n \text{sign}(e_i) = O_p(\sqrt{n})$, we obtain as $m \rightarrow \infty$

$$\max_{1 \leq k < k^*} \frac{\left| \sum_{i=m+1}^{m+k} \text{sign}(e_i) + \frac{k}{m} \sum_{j=1}^m \text{sign}(e_j) \right|}{g(m, k, \gamma)} = o_p(1).$$

Aue and Horváth [1] proved that N behaves as $\left(\frac{cm^{1/2-\gamma}}{2f(0)\delta_m}\right)^{1/(1-\gamma)}$ when $m \rightarrow \infty$, so the latter ratio on the right hand side in (8) is in the limit equal to

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{2f(0)\delta_m N}{\sqrt{m} \left(\frac{N}{m}\right)^\gamma} = \lim_{m \rightarrow \infty} 2f(0)\delta_m N^{1-\gamma} m^{\gamma-1/2} = c,$$

where c is the critical value defined by (3). The proof is now complete. \square

Lemma 4.4. *Let the assumptions of Theorem 2.1 be satisfied, then as $m \rightarrow \infty$*

$$\left(\frac{N}{m}\right)^{\gamma-1/2} \max_{k^* \leq k \leq N} \frac{1}{g(m, k, \gamma)} \left| \tilde{Q}(m, k) - (W_m(k) + k2f(0)\delta_m) \right| = o_p(1),$$

where $W_m(k)$ denotes a Wiener process.

Proof. When treating the ratio (4), we use the approximation of Lemma 4.1 and hence study the expression

$$\max_{k^* \leq k \leq N} \frac{\left(\frac{N}{m}\right)^{\gamma-1/2}}{g(m, k, \gamma)} \left| \sum_{i=m+1}^{m+k} \text{sign}(e_i) - \frac{k}{m} \sum_{j=1}^m \text{sign}(e_j) - k^* 2f(0)\delta_m - W_m(k) \right|. \quad (10)$$

By the central limit theorem, Lemma 4.1, assumption (iii) and the expression (7) we observe that, as $m \rightarrow \infty$,

$$\left(\frac{N}{m}\right)^{\gamma-1/2} \max_{k^* \leq k \leq N} \frac{\left| \frac{k}{m} \sum_{j=1}^m \text{sign}(e_j) + k^* 2f(0)\delta_m \right|}{g(m, k, \gamma)} = o_p(1).$$

To treat the rest of (10) we use the approximation (9) and obtain

$$\left(\frac{N}{m}\right)^{\gamma-1/2} \max_{k^* \leq k \leq N} \frac{\left| \sum_{i=m+1}^{m+k} \text{sign}(e_i) - W_m(k) \right|}{\sqrt{m} \left(1 + \frac{k}{m}\right)^{1-\gamma} \left(\frac{k}{m}\right)^\gamma} = O_p((k^*)^{1/\nu-1/2}) = o_p(1).$$

Putting the three parts together gives the statement of the lemma. \square

Lemma 4.5. *Let the assumptions of Theorem 2.1 hold, then*

$$(i) \quad \left(\frac{N}{m}\right)^{\gamma-1/2} \max_{k^* \leq k \leq N} \left| \frac{W_m(k)}{g(m, k, \gamma)} - \frac{W_m(k)}{\sqrt{m} \left(\frac{k}{m}\right)^\gamma} \right| = o_p(1)$$

$$(ii) \quad P \left\{ \left(\frac{N}{m}\right)^{\gamma-1/2} \left(\max_{k^* \leq k \leq N} \frac{W(k) - 2f(0)\delta_m k}{\sqrt{m} \left(\frac{k}{m}\right)^\gamma} - \frac{2f(0)\delta_m N}{\sqrt{m} \left(\frac{N}{m}\right)^\gamma} \right) \leq \left(\frac{N}{m}\right)^{\gamma-1/2} \left(c - \frac{2f(0)\delta_m N}{\sqrt{m} \left(\frac{N}{m}\right)^\gamma} \right) \right\} \rightarrow \Phi(x),$$

where $W_m(k)$ and $W(k)$ denote Wiener processes.

Proof. The proof can be found in [1]. □

Proof of Theorem 2.1. Now it remains to connect the stopping time $\tau(m)$ and the test statistics $\tilde{Q}(m, k)$. First we show that

$$\lim_{m \rightarrow \infty} P\{\tau(m) \geq N(m, x)\} = \Phi(x). \tag{11}$$

From the definition of the stopping time $\tau(m)$ we have that

$$P\{\tau(m) \geq N(m, x)\} = P \left\{ \max_{1 \leq k \leq N} \frac{|\tilde{Q}(m, k)|}{g(m, k, \gamma)} \leq c \right\}.$$

Long, but straightforward calculation combining Lemmas 4.1, 4.3, 4.4, and 4.5 gives the statement (11).

Now, concerning the probability $P\{(\tau(m) - a(m))/b(m) \leq x\}$, we have by the mean-value theorem that

$$\frac{\tau(m) - a(m)}{b(m)} = \frac{1}{1 - \gamma} a(m)^\gamma (1 + o_p(1)) \frac{\tau(m)^{1-\gamma} - a(m)^{1-\gamma}}{b(m)}.$$

Note that $N(m, x)$ can be written as

$$N(m, x) = \left(a(m)^{1-\gamma} - \frac{x}{2f(0)\delta_m} a(m)^{1/2-\gamma} \right)^{1/(1-\gamma)}.$$

By the symmetry of standard normal distribution, Slutsky's theorem and the definition of $b(m)$, we get

$$\lim_{m \rightarrow \infty} P \left(\frac{\tau(m) - a(m)}{b(m)} \leq x \right) = \lim_{m \rightarrow \infty} P(\tau(m) \leq N(m, -x)) = 1 - \Phi(-x) = \Phi(x),$$

which completes the proof of Theorem 2.1. □

Proof of Theorem 2.2. First we study the behavior of (4) when $k > k^*$ and use the approximation of Lemma 4.1. Similarly as in the proof of Lemma 4.3 we obtain

$$\sup_{1 \leq k < \infty} \frac{\left| \sum_{i=m+1}^{m+k} \text{sign}(e_i) - \frac{k}{m} \sum_{j=1}^m \text{sign}(e_j) \right|}{g(m, k, \gamma)} = O_p(1).$$

For the last term in (5) we get

$$\frac{|(k - k^*)2f(0)\delta|}{g(m, k, \gamma)} = 2f(0)\delta \frac{(k - k^*)\sqrt{m}(m + k)^\gamma}{(m + k)k^\gamma}.$$

Since we assume $k^* = O(m^\beta)$, the asymptotic behaviour of the delay will be $\tau(m) - k^* \approx m^\xi$, as $m \rightarrow \infty$, which means that $(\tau(m) - k^*)/m^\xi \rightarrow 1$ as $m \rightarrow \infty$. Now we need to find the minimal ξ , for which (4) tends to infinity.

1. If $0 < \beta < (1 - 2\gamma)/2(1 - \gamma)$, we have $k - k^* \approx m^\xi$ and $k \approx m^\xi$, with $\xi < 1$. The ratio (4) behaves as $m^{\xi+1/2+\gamma-1-\xi\gamma}$. To find the minimal ξ , we set $\xi + 1/2 + \gamma - 1 - \xi\gamma = 0$ and get $\xi = (1 - 2\gamma)/2(1 - \gamma)$. The ratio (4) then tends to infinity at order $(\ln \ln m)^{1/2}$.
2. If $(1 - 2\gamma)/2(1 - \gamma) \leq \beta < 1$, then $k - k^* \approx m^\xi$, and $k \approx m^\beta$. The ratio (4) tends to infinity as $m^{\xi+1/2+\gamma-1-\beta\gamma}$, which implies $\xi = \frac{1}{2} + \gamma(\beta - 1)$.
3. In the last case we have $\beta \geq 1$, $k - k^* \approx m^\xi$ and $k \approx m^\beta$. The ratio (4) behaves $m^{\xi+1/2+\beta\gamma-\beta-\beta\gamma}$, and therefore $\xi = \beta - 1/2$.

□

Reference

- [1] Aue A., Horváth L. (2003). *Delay time in sequential detection of change*. Statistical and Probability Letters **3**, 5–23.
- [2] Komlós M., Major P., Tusnády G. (1975). *An approximation of partial sums of independent r.v.'s and the sample d.f. I*. Z. Wahrsch. Verw. Gebiete **34**, 33–58.
- [3] Koubková A. (2004). *Sequential change point analysis in location model*. Sborník WDS'04, 24–29.
- [4] Koubková A. (2006). *Sequential change point analysis*. PhD Thesis, probably published at the end of 2006.
- [5] Sen P. K. (1981). *Sequential nonparametrics: invariance principles and statistical inference*. John Wiley & Sons, Inc.
- [6] Serfling R.J. (1980). *Approximation theorems of mathematical statistics*. John Wiley & Sons, Inc.

Acknowledgement: This work was supported by grant GAČR 201/05/H007 and 201/06/0186.

Address: A. Koubková, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: koubkova@karlin.mff.cuni.cz

ZMĚNY DENNÍCH MAXIM A MINIM TEPLOTY VZDUCHU

Milena Kovářová

Klíčová slova: Klimatická změna, teplota vzduchu, mikroklima, mokřadní ekosystém, Mokrý Louky, Biosférická rezervace Třeboňsko, Praha Klementinum.

Abstrakt: Příspěvek porovnává změny denních maxim a minim teploty vzduchu na Mokrých Loukách u Třeboně s hodnotami těchto parametrů na několika vybraných stanicích v České republice. Ukazuje, že změna teploty se projevuje na různých stanicích různě a závisí na místních podmínkách a jejich proměnách.

1 Úvod

V souvislosti s globální změnou klimatu je třeba se zabývat jejími projevy a jejím vlivem na krajinu a naopak. Cílem tohoto příspěvku je porovnat růst teploty vzduchu pozorovaný na Mokrých Loukách u Třeboně s hodnotami naměřenými na několika jiných stanicích v České republice. Růst teploty vzduchu se může projevit růstem maximální nebo minimální teploty vzduchu, případně obou. Závisí na místních podmínkách a jejich proměnách a vykazuje variabilitu v čase a místě.

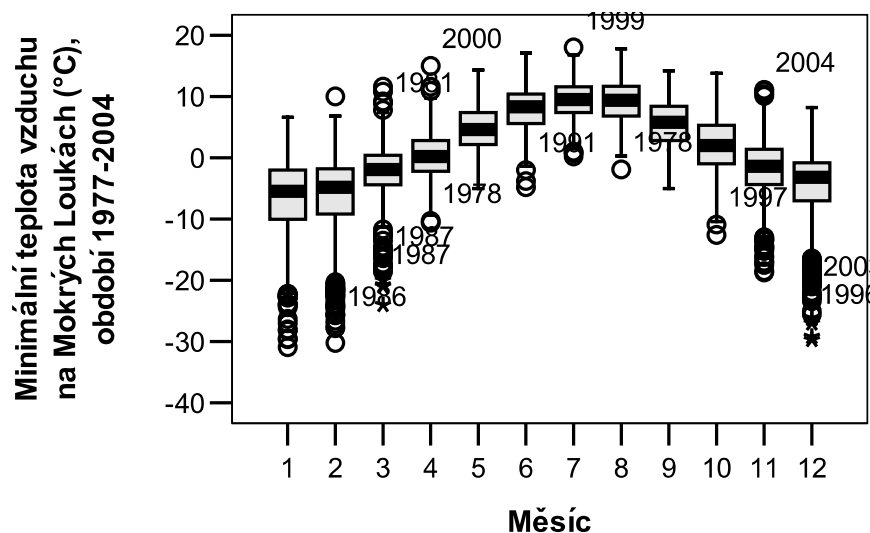
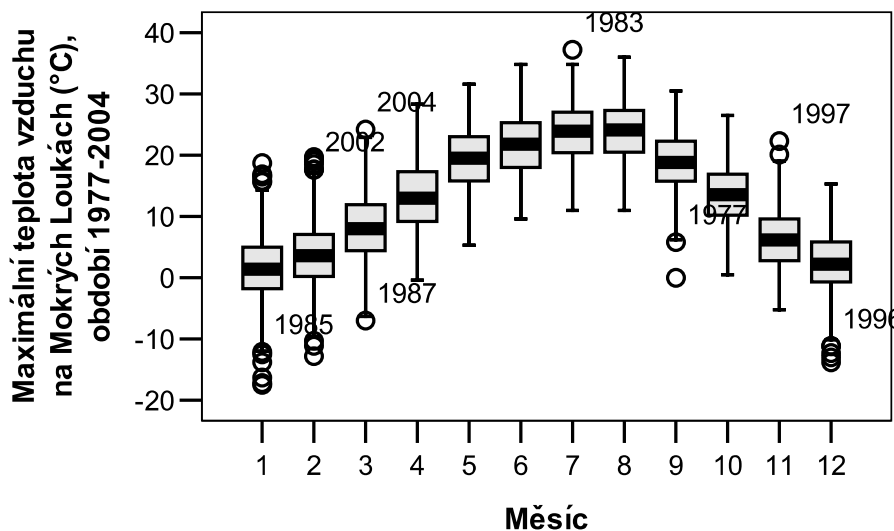
2 Mokrý Louky u Třeboně

Meteorologická stanice Mokrý Louky u Třeboně leží na 49° 01' 30" severní šířky, 14° 46' 20" východní délky v nadmořské výšce 426 metrů na levém břehu Prostřední stoky ve výtopě rybníka Rožmberk v Biosférické rezervaci



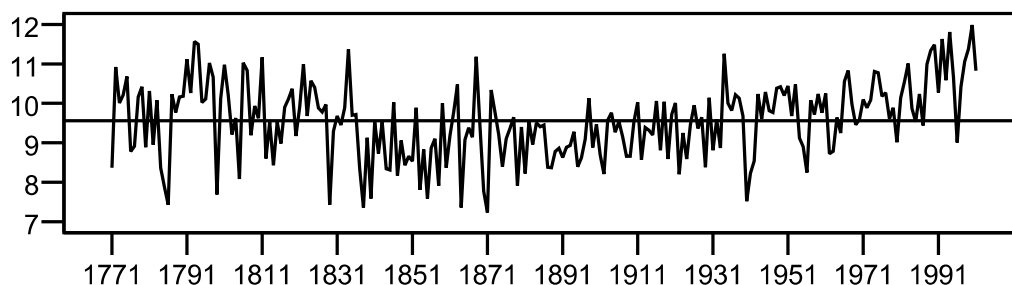
Třeboňsko. Od začátku roku 1977 jsou zde pravidelně denně měřeny základní meteorologické charakteristiky v lučním porostu vysokých ostřic (např. *Carex*

gracilis, *Carex vesicaria*, *Glyceria aquatica* a *Calamagrostis canescens*), od dubna 1978 do konce roku 1991 také v blízkém porostu vrby popelavé (*Salix cinerea*). Od roku 1983 je teplota a vlhkost měřena v hodinových intervalech [1]. Tato již téměř třicet let dlouhá řada meteorologických pozorování je ojedinělá zejména tím, že stanice je umístěna přímo v přirozeném rozsáhlém mokřadním porostu (10 km²). Měřená data tak zachycují dlouhodobé mikroklimatické podmínky v reálném mokřadním ekosystému. Celý projekt, zahájený jako část projektu Člověk a Biosféra Programu UNESCO v roce 1976 Botanickým ústavem AV ČR, převzal v roce 2003 Ústav systémové biologie a ekologie AV ČR. Získaná data byla soustavně hodnocena a publikována pro období 1977–1986 [2], a 1977–2003 [3]. Z [3] plyne, že maximální teplota stoupá v 90. letech na Mokřích Loukách více než na jiných stanicích v České republice. Teplotní poměry Mokřích Luk vidíme z následujících grafů.



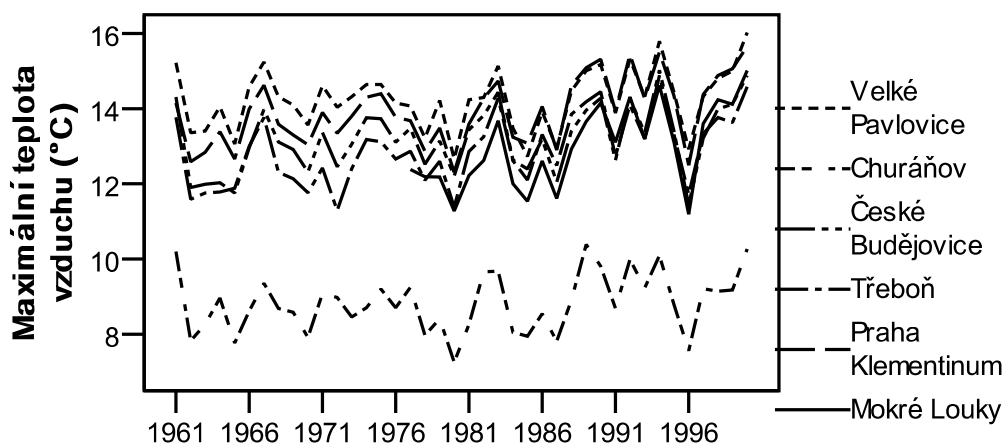
3 Porovnání s jinými stanicemi

Pro porovnání změn v hodnotách denních maxim a minim teploty vzduchu byly vybrány následující meteorologické stanice: Mokrý Louky (1977–2000), Třeboň (1961–2000), Praha Klementinum (1771–2000), Velké Pavlovice (1961–2000), Churáňov (1961–2000) a České Budějovice (1961–2000). Stanice Třeboň byla vybrána, protože leží v bezprostřední blízkosti stanice Mokrý Louky v okrajové části Mokrých Luk. Stanice Praha Klementinum představuje nejdelší zaznamenaná pozorování na území České republiky a byla vybrána pro lepší představu o dlouhodobých změnách teploty vzduchu. Graf roční průměrné teploty ze stanice Praha Klementinum z let 1771–2001 je uveden na následujícím obrázku, čára označuje dlouhodobý průměr teploty vzduchu na této stanici, který je $9,56^{\circ}\text{C}$.



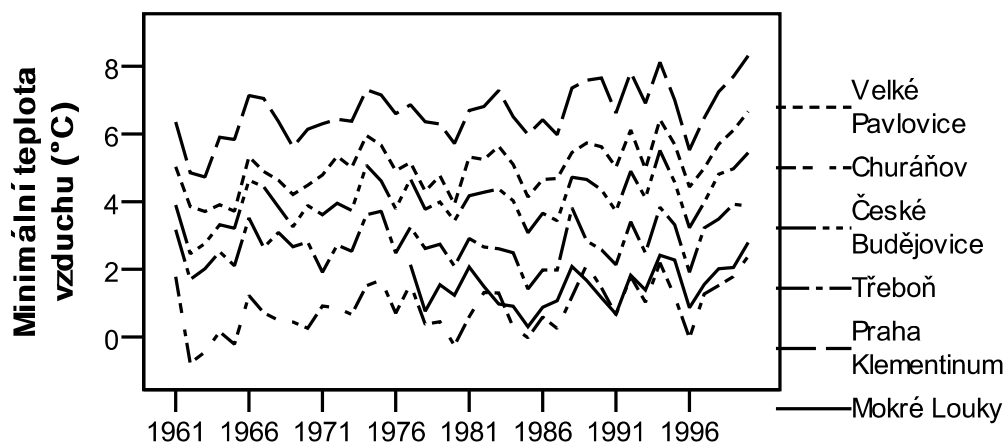
Stanice Velké Pavlovice je nejteplejší stanice na území České republiky. Stanice Churáňov je horská stanice, leží v nadmořské výšce 1122 m. Dále byla vybrána stanice České Budějovice.

Grafy průměrné roční maximální a minimální teploty vzduchu na uvedených stanicích v období 1961–2000 ukazují na podobný průběh teploty v jednotlivých letech.



Na hodnotách teplotních průměrů z jednotlivých stanic jsou vidět rozdílné trendy ve vzestupu teploty. Například roční průměr denních maxim teploty vzduchu na stanici Praha Klementinum je v 60. letech nižší v porovnání se

stanici Velké Pavlovice. V 90. letech tento rozdíl mizí. To znamená že, maximální teplota vzduchu stoupá na stanici Praha Klementinum více než na stanici Velké Pavlovice. Obdobný závěr lze učinit i o dvojici Třeboň, České Budějovice.



Na grafu ročních průměrů denních minim teploty vzduchu lze pozorovat vysoké hodnoty minimální teploty vzduchu na stanici Praha Klementinum a nízké hodnoty na stanici Mokrý Louky, které se pohybují na úrovni výše položené stanice Churáňov. Hodnoty ročních průměrů denních minim teploty vzduchu na stanici Třeboň a Mokrý Louky jsou poměrně nízké a ukazují na vysokou teplotní amplitudu na těchto stanicích.

Změny průměrné roční maximální a minimální teploty vzduchu mezi 6. a 9. desetiletím testované pro jednotlivé stanice dvouvýběrovým t testem jsou uvedeny v následující tabulce. Hodnoty kvadrátu t statistiky s 7303 stupni volnosti ukazují rozdíly vzestupu maximální a minimální teploty vzduchu na uvedených stanicích.

místo		1961–1970	1991–2000	t	Sig.
Velké Pavlovice	max. teplota	14,1	14,7	6,3	,012
	min. teplota	4,4	5,6	48,3	,000
Churáňov	max. teplota	8,6	9,2	8,4	,004
	min. teplota	0,4	1,4	37,2	,000
České Budějovice	max. teplota	12,7	13,6	16,3	,000
	min. teplota	3,6	4,5	29,9	,000
Třeboň	max. teplota	12,4	13,5	26,0	,000
	min. teplota	2,6	3,2	9,4	,002
Praha Klementinum	max. teplota	13,4	14,6	28,9	,000
	min. teplota	6,0	7,2	48,1	,000

4 Závěr

Změna teploty se projevuje na různých stanicích různě a závisí na místních podmínkách a jejich proměnách. Oteplení, které se začíná výrazně projevovat od počátku devadesátých let, známé pod pojmen změna klimatu či globální změna, může být do velké míry způsobeno vysycháním a změnami ve vodním režimu krajiny. Studium těchto změn, to znamená změn v hodnotách teplotních charakteristik v závislosti na změnách ve vodním režimu krajiny, budou věnovány další práce.

Reference

- [1] Klimadata Bot. Inst. Ac. Sci. (2003). *Klimatologická data Mokré Louky u Třeboně*. Botanický ústav AVČR, hydrobotanické oddělení 1977–2002.
- [2] Příbáň K. a kol. (1992). *Analysis and modeling of wetland microclimate. The case study Třeboň Biosphere Reserve*. Studie Československé Akademie Věd 1992/2., Academia, Praha.
- [3] Kovářová M., Pokorný J. (2005). *Hodnocení dlouhodobých dat teploty, vlhkosti vzduchu a srážek z Mokřých Luk u Třeboně*. Meteorologické Zprávy **58**, 51–60.

Adresa: M. Kovářová, Ústav fyzikální biologie Jihočeské univerzity,
Zámek 136, 373 33 Nové Hrady *E-mail:* kovarova@greentech.cz

ZOBEČNĚNÉ LINEÁRNÍ MODELY PRO ZNAČKOVANÉ BODOVÉ PROCESY

David Kraus

Klíčová slova: Značkovaný bodový proces, zobecněný lineární model, iterativně vážené nejmenší čtverce.

Abstrakt: Značkovaný bodový proces v čase je modelem pro pozorování událostí v náhodných časech, jsou-li tyto události charakterisovány nějakými hodnotami (značkami). V příspěvku uvažujeme regresní modely s časově proměnnými koeficienty pro intenzitu výskytu událostí (Aalenova aditivní regrese) a pro podmíněné rozdělení značek (zobecněný lineární model). Odvozeny jsou odhadovací rovnice a představen algoritmus odhadu spočívající v kombinaci iterativně vážených nejmenších čtverců a jádrového vyhlazování.

1 Úvod

Uvažujme n jedinců pozorovaných v časovém intervalu $[0, \tau]$. Každý z těchto n objektů zažívá konečný počet událostí přicházejících v náhodných časech

$$0 < T_{i,1} < T_{i,2} < \dots < \tau.$$

Nadto je v každém okamžiku $T_{i,k}$ události i -tého jedince zaznamenána číselná charakteristika události, tedy náhodná veličina $Z_{i,k}$ zvaná značka. Takže i -té pozorování sestává z dvojic

$$(T_{i,1}, Z_{i,1}), (T_{i,2}, Z_{i,2}), \dots \quad (1)$$

Tyto páry tvoří značkovaný bodový proces (*marked point process*, MPP), jehož chování je řízeno jednak intenzitou výskytu událostí v čase, a jednak podmíněným rozdělením značek.

Kromě dvojic $(T_{i,k}, Z_{i,k})$, $k = 1, 2, \dots$ pozorujeme kovariáty, které slouží jako vysvětlující proměnné v regresních modelech pro intenzitu a pro podmíněné rozdělení značek. V tomto příspěvku se věnujeme rozdělení značek, které je modelováno zobecněným lineárním modelem (*generalized linear model*, GLM). Tím rozšiřujeme výsledky Martinussena a Scheikeho [6], kteří studovali lineární modely.

Sekce 2 podává přehled základních faktů o stochastické struktuře značkovaných bodových procesů. V sekci 3 formulujeme regresní modely pro rozdělení značek a pro intenzitu časového procesu. Další část se věnuje věrohodnosti značkovaného bodového procesu a odhadovací rovnici. Algoritmus pro výpočet odhadů je pojednán v sekci 5. V závěrečné části stručně diskutujeme navazující témata.

2 Značkování bodové procesy

Značkování bodový proces je množina značkových bodů (1). Časové okamžiky leží v intervalu $[0, \tau]$, značky nabývají hodnot z prostoru (E, \mathcal{E}) . Je výhodné dívat se na značkování bodový proces jako na míru. Podle Brémauda [2] budeme značkování bodový proces zapisovat jako $p_i(dt \times dz_i)$. Objekt $p_i(dt \times dz_i)$ je náhodná čítací míra na součinu $[0, \tau] \times E$ taková, že proces

$$N_i(t, A) = \int_0^t p_i(ds \times A) = \int_0^t \int_A p_i(ds \times dz_i)$$

je čítací proces adaptovaný na nějakou danou filtraci $(\mathcal{F}_t, t \in [0, \tau])$. Proces $N_i(t, A)$ počítá události, jejichž značky leží v množině $A \in \mathcal{E}$.

Jestliže pro každou množinu $A \in \mathcal{E}$ je intenzita čítacího procesu $N_i(t, A)$ ve tvaru

$$\lambda_i(t, A) = \int_A \lambda_i(t, dz_i),$$

nazývá se $\lambda_i(t, dz_i)$ jádrem intenzity. Předpokládejme, že je lze psát jako

$$\lambda_i(t, dz_i) = \lambda_i(t) \Phi_i(t, dz_i),$$

kde $\lambda_i(t) = \lambda_i(t, E)$ je intenzita procesu $N_i(t, E)$ počítajícího všechny události bez ohledu na jejich značky a $\Phi_i(t, dz_i)$ je podmíněné rozdělení značek při dané historii do času t a za podmínky, že t je okamžikem události. Dvojice $(\lambda_i(t), \Phi_i(t, dz_i))$ se nazývají lokální charakteristiky.

Další potřebné detaily o značkových bodových procesech na reálné přímce (tedy v čase) lze nalézt v Brémaudově knize [2, kapitola VIII] nebo v knize [4] od Lasta a Brandta.

3 Regresní modely

Řekněme, že jak intenzitu $\lambda_i(t)$ tak podmíněné rozdělení značek $\Phi_i(t, dz_i)$ lze popsat regresními modely. Modelujme tedy závislost obou složek značkování bodového procesu na vektoru kovariát (vysvětlujících proměnných). Označme kovariáty pro $\lambda_i(t)$ jako $U_i(t) = (U_{i1}(t), \dots, U_{ir}(t))^T$ a pro $\Phi_i(t, dz_i)$ jako $X_i(t) = (X_{i1}(t), \dots, X_{ip}(t))^T$. Kovariáty mohou záviset na čase, čili mohou to být predikovatelné procesy.

3.1 Zobecněný lineární model pro značky

Předpokládejme, že rozdělení značek $\Phi_i(t, dz_i)$ splňuje zobecněný lineární model. Od klasických zobecněných lineárních modelů (viz [8]) se naše situace liší tím, že koeficienty, kovariáty, lineární prediktor, střední hodnota, kanonický parametr a disperse mohou záviset na čase.

Ve stručnosti vysvětleme, jak v tomto případě GLM vypadá. Předpokládáme, že rozdělení $\Phi_i(t, dz_i)$ má vzhledem k nějaké dominující míře hustotu exponenciálního typu

$$\phi_i(t, z_i) = \exp \left\{ \frac{z_i \theta_i(t) - b(\theta_i(t))}{\psi(t)} + c(z_i, \psi(t)) \right\}.$$

Zde b je známá dvakrát spojitě diferencovatelná funkce. $\theta_i(t)$ je kanonický parametr závisující na vektoru kovariát $X_i(t)$ a vektoru koeficientů $\beta(t)$ skrze lineární prediktor $\eta_i(t) = X_i(t)^\top \beta(t)$. Střední hodnota $\mu_i(t) = b'(\theta_i(t))$ závisí na lineárním prediktoru $\eta_i(t)$ prostřednictvím ryze monotonní dvakrát spojitě diferencovatelné linkové funkce g vztahem

$$g(\mu_i(t)) = \eta_i(t) = X_i(t)^\top \beta(t).$$

Připomeňme, že potom rozptyl je roven $\psi(t)b''((b')^{-1}(\mu_i(t))) = \psi(t)V(\mu_i(t))$, přičemž $\psi(t)$ se nazývá dispersní parametr a V varianční funkce. Dispersní parametr je buďto určen rodinou rozdělení nebo je to neznámý (rušivý) parametr. Je-li $g = (b')^{-1}$, nazývá se g přirozená (kanonická) linková funkce a platí $g'V = 1$.

Například pro poissonovskou regresi je kanonickým linkem $g(\mu) = \log \mu$, varianční funkce je $V(\mu) = \mu$ a dispersní parametr $\psi(t) = 1$. Pro gaussovský lineární model je kanonická $g(\mu) = \mu$, $V(\mu) = 1$ a $\psi(t) = \sigma^2(t)$. Lineárním modelem se zabývali Martinussen a Scheike [6].

Hlavním předmětem tohoto příspěvku je odhad kumulativních koeficientů $B(t) = \int_0^t \beta(s) ds$. Kumulativní funkce místo původních $\beta(t)$ odhadujeme proto, že na nich je možné založit inferenci o vlivu kovariát (například testovat konstantnost efektů).

3.2 Aalenova aditivní regrese pro intenzitu

Stejně jako Martinussen a Scheike [6] budeme modelovat intenzity $\lambda_i(t)$ čítacích procesů $p_i(dt \times E)$ Aalenovým aditivním regresním modelem

$$\lambda_i(t) = Y_i(t)U_i(t)^\top \alpha(t),$$

kde $U_i(t)$ je již výše zmíněný r -vektor predikovatelných kovariát, $\alpha(t)$ jejich efekty a $Y_i(t)$ indikátor rizika události (pozorovatelný predikovatelný proces s hodnotami 0 nebo 1). Standardním odkazem k Aalenovu modelu je [1, kapitola VII.4].

4 Věrohodnost, odhadovací rovnice

4.1 Věrohodnost

Logaritmická věrohodnost založená na výběru o rozsahu n pozorování značkováného bodového procesu je rovna

$$\begin{aligned} \ell(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^n \int_0^\tau \{ \log[\lambda_i(t)] p_i(dt \times E) - \lambda_i(t) dt \} \\ + \sum_{i=1}^n \int_0^\tau \int_E \log[\phi_i(t, z_i)] p_i(dt \times dz_i). \end{aligned}$$

Pokud je dispersní parametr neznámý, měli bychom psát $\ell(\alpha, \beta, \psi)$ místo $\ell(\alpha, \beta)$. V dalším ovšem budeme ψ vynechávat, jelikož nám jde především o odhad β . Pro odhad β není znalost ψ potřebná a můžeme zde provádět skórové kalkulace jako bychom ψ znali.

4.2 Skórová funkce

Odhadem (α, β) jsou takové funkce, pro něž je skórová funkce $\dot{\ell}_{(\alpha, \beta)}$ nulová. Skórovou funkci pro nekonečně rozměrný parametr (α, β) nalezneme tak, že uvažujeme jednorozměrné parametrické podmodely procházející původním modelem (α, β) . Uvažujme podmodely dané $(\alpha_h^\gamma, \beta_h^\delta)$ pro

$$\alpha_h^\gamma(t) = \alpha(t) \odot (1 + h\gamma(t)), \quad \beta_h^\delta(t) = \beta(t) \odot (1 + h\delta(t)),$$

kde $h \in \mathbb{R}$ je parametr a funkce γ a δ mají stejné vlastnosti jako α a β . (Znak \odot používáme pro násobení vektorů po složkách, tedy výsledek je opět vektor.) Pak skórová funkce $\dot{\ell}_{(\alpha, \beta)}(\gamma, \delta)$ je dána jako derivace logaritmické věrohodnosti $\ell(\alpha, \beta)$ v bodě (α, β) ve směru (γ, δ) (podél cesty $(\alpha_h^\gamma, \beta_h^\delta)$), čili jako derivace logvěrohodnosti $\ell(\alpha_h^\gamma, \beta_h^\delta)$ jednorozměrného parametrického podmodelu. Tedy

$$\dot{\ell}_{(\alpha, \beta)}(\gamma, \delta) = \frac{d}{dh} \ell(\alpha_h^\gamma, \beta_h^\delta) \Big|_{h=0}.$$

Nyní vyjádřeme skórovou funkci explicitně. Jednoduchým počítáním dostáváme

$$\begin{aligned} \dot{\ell}_{(\alpha, \beta)}(\gamma, \delta) = \\ \int_0^\tau (\alpha(t) \odot \gamma(t))^\top [U(t)^\top Q(t) p(dt \times E) - U(t)^\top Q(t) U(t) dA(t)] \\ + \sum_{i=1}^n \int_0^\tau \frac{(\beta(t) \odot \delta(t))^\top X_i(t)}{g'(\mu_i(t)) \psi(t) V(\mu_i(t))} \left[\int_E z_i p_i(dt \times dz_i) - \mu_i(t) p_i(dt \times E) \right], \quad (2) \end{aligned}$$

kde $Q(t) = \text{diag}[Y_i(t)\{U_i(t)^\top \alpha(t)\}^{-1}]$ a $A(t) = \int_0^t \alpha(s) ds$. První člen na pravé straně je skór pro Aalenův model (viz například Huffer a McKeague [3], Sasieni [9]). Tvar druhého členu vyplývá z toho, že $\phi_i(t, z_i)$ splňuje zobecněný lineární model.

4.3 Rovnice odhadu

Rovnici odhadu získáme z požadavku, aby skórová funkce (2) byla nulová. Tedy chceme najít taková (α, β) , že

$$\dot{\ell}_{(\alpha, \beta)}(\gamma, \delta) = 0$$

pro všechny funkce (γ, δ) . První sčítanec v (2) vede na známý odhad přírůstků dA pomocí vážených nejmenších čtverců, který je založen na rovnici

$$U(t)^\top Q(t)p(dt \times E) - U(t)^\top Q(t)U(t)dA(t) = 0 \quad (3)$$

(viz [3, 9]). Vidíme, že odhad $d\hat{A}$ přírůstků dA můžeme vypočítat standardní procedurou pro Aalenův aditivní model, aniž bychom znali β . Úloha odhadu α a β proto může být řešena postupně.

Odhadovací rovnice pro β je

$$\sum_{i=1}^n \frac{X_i(t)}{g'(\mu_i(t))\psi(t)V(\mu_i(t))} \left[\int_E z_i p_i(dt \times dz_i) - \mu_i(t)p_i(dt \times E) \right] = 0.$$

Zřejmě dispersní parametr ψ nemá na odhad β vliv a můžeme jej zkrátit. Jelikož naším záměrem je odhadnout kumulativní funkce $B(t) = \int_0^t \beta(s)ds$, využijeme martingalové struktury značkového bodového procesu k aproximaci $p_i(dt \times E) \doteq \lambda_i(t)dt$. Místo neznámých intenzit $\lambda_i(t)$ jednotlivých procesů $p_i(dt \times E)$ v této rovnici použijeme odhady $\hat{\lambda}_i(t)$, které získáme vyhlazením \hat{A} na $\hat{\alpha}$. Dostáváme tak rovnici

$$\sum_{i=1}^n \frac{X_i(t)}{g'(\mu_i(t))V(\mu_i(t))} \left[\int_E z_i p_i(dt \times dz_i) - \mu_i(t)\hat{\lambda}_i(t)dt \right] = 0, \quad (4)$$

jež má platit pro ty časy t , které odpovídají okamžikům událostí (tedy splňují $\sum_{i=1}^n p_i(dt \times E) > 0$).

Povšimněme si (podobně jako Martinussen, Scheike a Skovgaard v [7] při odhadu v jiném modelu), že v rovnici (4) je první člen skokový proces, zatímco druhý spojitý, a tedy rovnice nemá řešení. Ovšem vede nás k iteračnímu algoritmu, který dává konsistentní odhad B .

5 Algoritmus: IRLS s vyhlazováním

Odhadovací procedura je kombinací algoritmu iterativně vážených nejmenších čtverců (*iteratively reweighted least squares*, IRLS) a jádrového vyhlazování mezi kroky iterace.

Myšlenka vyhlazování mezi iteračními kroky je inspirována již zmíněným článkem [7] od Martinussena, Scheikeho a Skovgaard. V něm autoři používají Newton–Raphsonův algoritmus v kombinaci s vyhlazováním pro odhad v Coxově modelu s časově proměnnými koeficienty. Vyhlazování je zde i v citovaném článku potřebné kvůli tomu, že informace dostupná v každém čase

je omezená, poněvadž v každém čase dochází nejvýše k jedné události. Není tudíž možné iterativně řešit rovnici (4) pro jednotlivé časy událostí zvlášť. Krom toho v rovnici odhadu vystupuje člen $\mu_i(t)$ závisející na $\beta(t)$, proto je nutné vyhlazení přírůstků $d\hat{B}$ odhadu \hat{B} kumulativních funkcí B .

(0) Vstupní hodnoty: odhad intenzit $\hat{\lambda}_i(t)$; počáteční odhad $\hat{\beta}^{(0)}(t)$; $k = 0$.

(1) $k := k + 1$.

(2) Proveď jeden krok IRLS pro všechny časy událostí $t \in [0, \tau]$:

(2i) Spočti ‘pracovní odezvu’ (*working response*)

$$\hat{r}_i(t)dt = \hat{\eta}_i(t)dt + \frac{g'(\hat{\mu}_i(t))}{\hat{\lambda}_i(t)} \left[\int_E z_i p_i(dt \times dz_i) - \hat{\lambda}_i(t) \hat{\mu}_i(t) dt \right].$$

(Zde $\hat{\eta}_i(t)$ a $\hat{\mu}_i(t)$ značí $\eta_i(t)$ a $\mu_i(t)$ s $\hat{\beta}^{(k-1)}(t)$ na místě $\beta(t)$.)

(2ii) Spočti váhy

$$W_i(t) = \frac{\hat{\lambda}_i(t)}{g'(\hat{\mu}_i(t))^2 V(\hat{\mu}_i(t))}.$$

Polož $W(t) = \text{diag}[W_i(t)]$.

(2iii) Proveď regresi $\hat{r}(t)dt$ na $X(t)$: získej novou iteraci $d\hat{B}^{(k)}(t)$ váženými nejmenšími čtverci

$$\begin{aligned} d\hat{B}^{(k)}(t) &= [X(t)^\top W(t)X(t)]^{-1} X(t)^\top W(t) \hat{r}(t)dt \\ &= \hat{\beta}^{(k-1)}(t)dt + [X(t)^\top W(t)X(t)]^{-1} X(t)^\top W(t) \\ &\quad \times \text{diag} \left[\frac{g'(\hat{\mu}_i(t))}{\hat{\lambda}_i(t)} \right] \left[\int_E z p(dt \times dz) - \hat{\lambda}(t) \odot \hat{\mu}(t) dt \right]. \end{aligned}$$

(3) Pokud je splněna ukončovací podmínka, jdi na (6).

(4) Vyhleď $\hat{B}^{(k)}(t)$ na $\hat{\beta}^{(k)}(t)$.

(5) Jdi na (1).

(6) Vrať $\hat{B} = \hat{B}^{(k)}$. Konec.

K algoritmu je třeba doplnit několik informací a poznámek.

Zprvée, jako počáteční odhad $\hat{\beta}^{(0)}(t)$ se osvědčil lokálně polynomiální odhad zobecněného lineárního modelu. Experimenty se simulovanými daty ukázaly, že algoritmus není příliš citlivý na volbu počátečního odhadu. I jen lokálně konstantní počáteční odhad prokázal dobré služby.

Zadruhé, krok (4), vyhlazení mezi kroky IRLS, provádíme následujícím způsobem. Z po částech konstantních funkcí $\hat{B}^{(k)}(t)$ získáme $\hat{\beta}^{(k)}(t)$ jako

$$\hat{\beta}^{(k)}(t) = \int_0^\tau \frac{1}{b_\beta} K\left(\frac{s-t}{b_\beta}\right) d\hat{B}^{(k)}(s),$$

kde K je jádrová funkce a b_β je šířka vyhlazovacího okénka.

Pokud jde o ukončovací podmínku, je obtížné stanovit nějakou, která by odrážela, jak blízko už jsme správným hodnotám. Jednodušší je předepsat pevný počet kroků. Volba 15 až 20 iterací nám při simulacích vždy bohatě stačila.

Poznamenejme k uvedenému algoritmu, že pokud je použita kanonická linková funkce (čili $g'(\mu)V(\mu) = 1$), kroky algoritmu jsou shodné s kroky Newtonovy metody.

6 Závěrečné poznámky

Na závěr krátce zmiňme některé vlastnosti odhadů získaných zde popsáním postupem, možnosti statistické inference a případná rozšíření modelu.

6.1 Asymptotické vlastnosti

Za určitých předpokladů můžeme ukázat, že odhad \hat{B} je stejnoměrně konsistentní a konverguje v distribuci k nějakému centrovanému gaussovskému procesu. Z podmínek, za kterých to platí, jsou zajímavé ty na vyhlazovací parametry. Parametr pro vyhlazování \hat{B} je potřeba brát jako $b_\beta \sim n^{-c}$ pro $1/8 < c < 1/4$. Šířka vyhlazovacího okna pro \hat{A} musí splňovat $b_\alpha = o(n^{-1/4})$. Tedy b_α musí konvergovat k 0 rychleji než obvyklé $n^{-1/5}$.

6.2 Testování

Mohlo by nás zajímat, zda efekt $\beta_j(t)$ významně závisí na čase. Testování tohoto je ekvivalentní s testováním linearity $B_j(t)$. Test lze založit na procesu $\hat{B}_j(t) - \hat{B}_j(\tau)t/\tau$. Například můžeme použít testovou statistiku typu Kolmogorov–Smirnov tvaru

$$\sup_{t \in [0, \tau]} |\hat{B}_j(t) - \hat{B}_j(\tau)t/\tau|,$$

nebo integrální statistiky typu Anderson–Darling či Cramér–von Mises.

K aproximaci kritických hodnot se díky martingalové struktuře modelu hodí simulační metoda, kterou pro Coxův model navrhli Lin, Wei a Ying v [5].

6.3 Semiparametrické modely

Zobecněním našeho neparametrického modelu je semiparametrický model, v němž některé koeficienty jsou závislé na čase a některé konstantní. Takový model má tvar lineárního prediktoru

$$\eta_i(t) = X_i(t)^\top \beta(t) + Z_i(t)^\top \gamma,$$

přičemž $X_i(t) = (X_{i1}(t), \dots, X_{ip}(t))^\top$, $\beta(t) = (\beta_1(t), \dots, \beta_p(t))^\top$, $Z_i(t) = (Z_{i1}(t), \dots, Z_{iq}(t))^\top$, $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_q)^\top$.

Reference

- [1] Andersen P.K., Borgan \emptyset ., Gill R.D., Keiding N. (1993). *Statistical models based on counting processes*. Springer, New York.
- [2] Brémaud P. (1981). *Point processes and queues. Martingale dynamics*. Springer, New York.
- [3] Huffer F.W., McKeague I.W. (1991). *Weighted least squares estimation for Aalen's additive risk model*. J. Amer. Statist. Assoc. **86**, 114–129.
- [4] Last G., Brandt A. (1995). *Marked point processes on the real line. The dynamic approach*. Springer, New York.
- [5] Lin D.Y., Wei L.J., Ying Z. (1993). *Checking the Cox model with cumulative sums of martingale-based residuals*. Biometrika **80**, 557–572.
- [6] Martinussen T., Scheike T.H. (2001). *Sampling adjusted analysis of dynamic additive regression models for longitudinal data*. Scand. J. Statist. **28**, 303–323.
- [7] Martinussen T., Scheike T.H., Skovgaard I.M. (2002). *Efficient estimation of fixed and time-varying covariate effects in multiplicative intensity models*. Scand. J. Statist. **29**, 57–74.
- [8] McCullagh P., Nelder J.A. (1989). *Generalized linear models, second edition*. Chapman & Hall, London–NewYork.
- [9] Sasieni P.D. (1992). *Information bounds for the additive and multiplicative intensity models*. In *Survival Analysis: State of the Art*. Kluwer Acad. Press, Dordrecht.

Poděkování: Děkuji za podporu, jíž se mi dostalo prostřednictvím grantů GA ČR 201/05/H007 a 402/04/1294.

Adresa: D. Kraus, Ústav teorie informace a automatizace AV ČR, Pod Vodárenskou věží 4, 182 08 Praha 8

E-mail: kraus@karlin.mff.cuni.cz

ODHADOVÁNÍ PERCENTILOVÝCH KŘIVEK PLICNÍ FUNKCE POMOCÍ KVANTILOVÉ REGRESE

Michal Kulich

Klíčová slova: Regresní kvantil, růstová křivka, splinová báze.

Abstrakt: Plicní funkce, zejména objem vydechnutého vzduchu za 1 sekundu (FEV_1), je důležitým ukazatelem stavu plic u nemocných s dědičnou metabolickou poruchou zvanou cystická fibróza (CF). Plicní funkce závisí na pohlaví, věku a výšce a její standartisace není snadná. Cílem našeho projektu bylo vyvinout percentilové křivky pro FEV_1 u nemocných s CF jako funkce pohlaví, věku a výšky. Použili jsme kvantilovou regresi a společný vliv věku a výšky jsme modelovali pomocí součinnové B-splinové báze obou proměnných. Tento článek popisuje a diskutuje detaily aplikace kvantilové regrese na daný problém.

1 Úvod

Tento článek se zabývá konstrukcí percentilových (kvantilových) křivek pro plicní funkci u pacientů postižených cystickou fibrózou. Jakkoli se jedná o specifický problém týkající se jedné relativně řídké nemoci, zvolená metodika by mohla být použita i pro řešení podobných problémů vyskytujících se v jiných aplikačních oblastech. Než však přistoupíme k popisu metodiky odhadování percentilových křivek, uveďme aspoň základní fakta o problému, na nějž jsme tuto metodiku aplikovali.

Cystická fibróza je dědičné metabolické onemocnění spočívající v poruše genu CFTR, jenž reguluje funkci chloridových kanálků v membránách epitelálních buněk. Jedná se o recesivní poruchu, tj. člověk musí mít poškozené obě kopie CFTR genu, aby choroba propukla. Zhruba 3–5% lidí bílé rasy je nosičem mutace genu CFTR. Tato nemoc postihuje přibližně jedno z 3000 narozených dětí. Nesprávně fungující CFTR gen vede k tvorbě hustých hlenových výměšků, které vadí normální funkci orgánů. Nejhůře jsou postiženy dýchací cesty. Chronické zahlenění plic vede k zánětům a infekcím, obstrukci dýchacích cest a patologickým změnám, které často končí selháním plic a smrtí. Cystická fibróza také ovlivňuje funkci trávicí soustavy, zejména způsobuje nedostatečnou funkci slinivky břišní. Prognóza nemoci záleží zejména na typu mutace CFTR genu, přičemž nejčastější typ mutace je zároveň ten nejzávažnější. Nemoc často končí postupným zhoršováním stavu plic až do jejich úplného selhání, běžné jsou i jiné komplikace (cukrovka). Medián přežití pacientů při dnešním standartu zdravotní péče je 30–40 let.

Jelikož k nejzávažnějším patologickým projevům CF dochází na plicích, je důležité pravidelně měřit a vyhodnocovat stav plic pacienta. Plicní funkce

je nejsledovanější charakteristikou pacienta, významným prediktorem morbidity a mortality a nejpoužívanějším ukazatelem účinnosti nových terapií. Plicní funkce se měří spirometrem, jenž zaznamenává zvětšující se objem vzduchu při prudkém výdechu ze zcela naplněných plic. Objem vzduchu se vyjádří jako křivka v závislosti na čase, z níž se počítá řada různých číselných charakteristik. Nejpoužívanější charakteristikou funkce plic je FEV_1 , objem vzduchu (měřený v litrech) vydechnutého během první sekundy. Vzhledem k obtížnosti správného provedení výdechu se spirometrické měření většinou neprovádí u dětí do 6 let.

FEV_1 dobře zachycuje obstrukci plic, ale jeho hodnota závisí na pohlaví, věku a výšce. Proto se hodnota FEV_1 přepočítává na tzv. procento náležitých hodnot, přičemž 100% odpovídá průměrnému FEV_1 u zdravého jedince daného věku, výšky a pohlaví. Existuje řada různých metod pro výpočet náležitých hodnot, většinou založených na lineární regresi s parametrickou transformací věku a výšky. Procenta náležitých hodnot ukazují relativní úbytek plicní funkce pacienta ve srovnání se zdravým jedincem.

Cílem naší práce [7] bylo získat nástroj který by sloužil: (1) pro porovnávání plicní funkce pacientů s CF mezi sebou; (2) pro přesnější sledování vývoje plicní funkce v čase a (3) pro zkoumání rozdělení plicní funkce v populaci pacientů. Tento úkol jsme převedli na problém odhadu podmíněných kvantilů FEV_1 pro pacienty s CF v závislosti na pohlaví, věku a výšce. Data, která jsme měli k dispozici, pocházela z národního registru pacientů v USA. Zachycovala téměř 300 tisíc měření plicní funkce z období 1994–2001 v populaci přesahující 28 tisíc pacientů.

2 Metody pro odhadování kvantilů

Uvažujme pozorování (Y_i, \mathbf{X}_i) , kde Y_i je veličina, jejíž kvantily chceme počítat, a \mathbf{X}_i jsou p -rozměrné prediktory, jimiž budeme podmiňovat. Index $i = 1, \dots, n$ probíhá sledovanou populaci. Zajímají nás kvantily $Q_Y(\alpha | \mathbf{X}_i = \mathbf{x})$ podmíněného rozdělení Y_i , je-li dáno $\mathbf{X}_i = \mathbf{x}$, pro dané $\alpha \in (0, 1)$.

V medicíně se k odhadování kvantilových křivek v závislosti na jediném prediktoru nejčastěji používá tzv. LMS metoda [3]. Tato metoda je založena na předpokladu podmíněného normálního rozdělení Y_i po provedení Boxovy-Coxovy transformace. Přesněji řečeno, pro každé $x \in \mathbb{R}$ existují hodnoty $L(x)$, $M(x)$ a $S(x)$ takové, že transformovaná náhodná veličina

$$Z_i = \begin{cases} \frac{[Y_i/M(x)]^{L(x)} - 1}{L(x)S(x)} & \text{pro } L(x) \neq 0, \\ \frac{\log Y_i - \log M(x)}{S(x)} & \text{pro } L(x) = 0 \end{cases}$$

má normované normální rozdělení. Funkce $L(x)$ je vlastně parametr Boxovy-Coxovy transformace, $M(x)$ je podmíněný medián $Q_Y(0.5 | X_i = x)$ a $S(x)$ je směrodatná odchylka. Transformace na normalitu tedy může záviset na hodnotě prediktoru. Podmíněný kvantil $Q_Y(\alpha | X_i = x)$ je jednoznačně určen funkcemi $L(x)$, $M(x)$ a $S(x)$:

$$Q_Y(\alpha | x) = \begin{cases} M(x)[1 + L(x)S(x)u_\alpha]^{1/L(x)} & \text{pro } L(x) \neq 0, \\ M(x) \exp\{S(x)u_\alpha\} & \text{pro } L(x) = 0, \end{cases}$$

kde u_α je kvantil normovaného normálního rozdělení. Odhady funkcí $L(x)$, $M(x)$ a $S(x)$ lze získat metodou penalizované maximální věrohodnosti [4]. Řešením jsou kubické spliny s uzly v každém pozorování x_i . Nevýhodou LMS metody je předpoklad normality, který je sice zeslaben zavedením adaptivní Boxovy-Coxovy transformace, ale přesto obecně nemusí platit, a citlivost na chyby v měřeních Y_i . LMS metoda také předpokládá jednorozměrné X_i ; lze ji sice zobecnit na vícerozměrné prediktory, ale maximalizování penalizované věrohodnosti je pak daleko obtížnější.

Alternativní metodou pro odhadování podmíněných kvantilů je kvantilová regrese [1], [6]. Tato metoda je v medicíně poněkud opomíjena; možná i proto, že byla původně publikována v ekonometrické literatuře. Kvantilová regrese vychází z poznatku, že α -tý kvantil rozdělení Y lze vyjádřit jako

$$\arg \min_{u \in \mathbb{R}} E \varrho_\alpha(Y - u),$$

kde $\varrho_\alpha(t) = t(\alpha - I(t < 0))$. Odtud získáme vyjádření pro empirický α -tý kvantil (z náhodného výběru Y_1, \dots, Y_n) jako řešení minimalizačního problému

$$\arg \min_{u \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n \varrho_\alpha(Y_i - u). \quad (1)$$

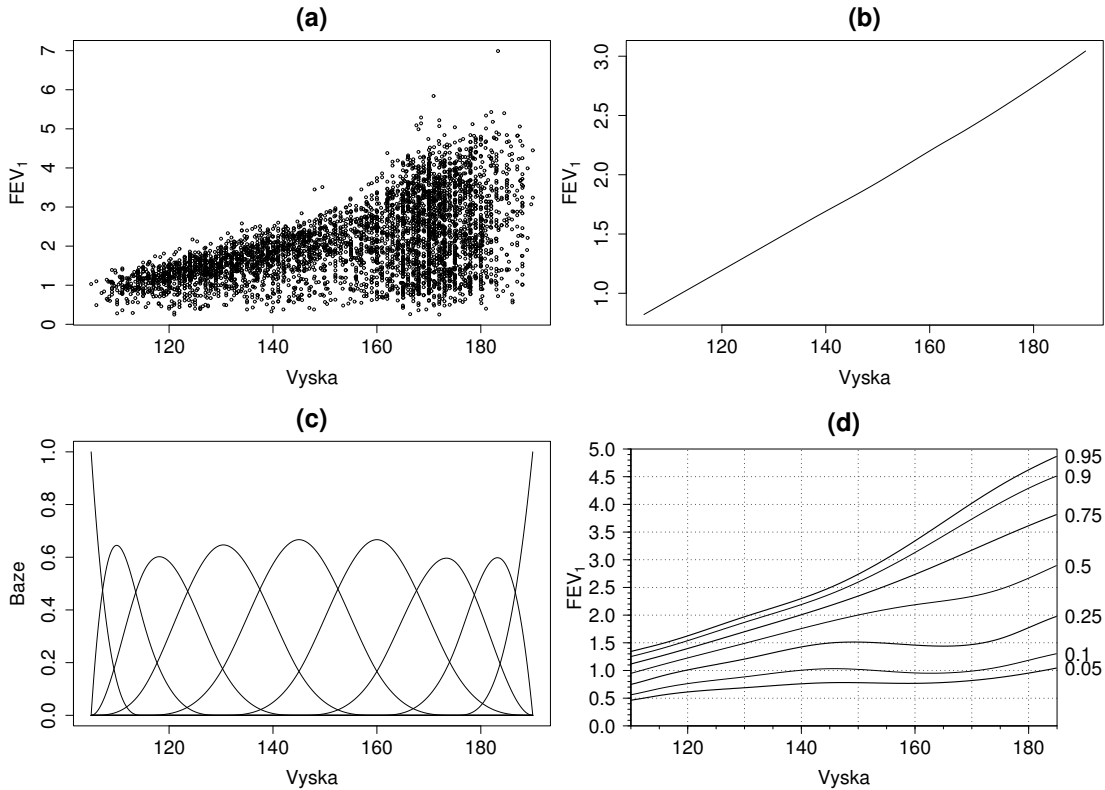
Uvažujeme-li lineární model pro α -tý podmíněný kvantil

$$Q_Y(\alpha | \mathbf{X}_i = \mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \boldsymbol{\beta}_\alpha, \quad (2)$$

nahradíme obecné u v (1) lineárním prediktorem $\mathbf{X}_i^T \boldsymbol{\beta}_\alpha$ a odhad parametrů $\boldsymbol{\beta}_\alpha$ najdeme minimalizací přes $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p$:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_\alpha = \arg \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \sum_{i=1}^n \varrho_\alpha(Y_i - \mathbf{X}_i^T \boldsymbol{\beta}).$$

Asymptotická teorie kvantilové regrese (neboli regresních kvantilů) je zpracována např. v [5]. Kvantilová regrese má nezanedbatelné výhody proti LMS metodě: je zcela neparametrická vzhledem k rozdělení Y , je robustní vzhledem ke kontaminaci Y , řeší přímo problém, který chceme řešit, a výpočetní software je snadno dostupný (R, S-plus). Nesmíme také zapomenout, že pracujeme s korelovanými daty, do nichž jeden pacient přispívá v průměru přes 10 měření. Odhady parametrů kvantilové regrese ovšem zůstávají konsistentní i v situaci, kdy se data skládají z velkého počtu nezávislých skupin (viz [2]), takže pro odhadování kvantilových křivek nám závislosti v datech nevadí.



Obrázek 1: Závislost FEV_1 na výšce u mužů. (a) diagram části dat; (b) vyhlazená střední hodnota; (c) B-splínová báze pro výšku; (d) výsledné kvantilové křivky.

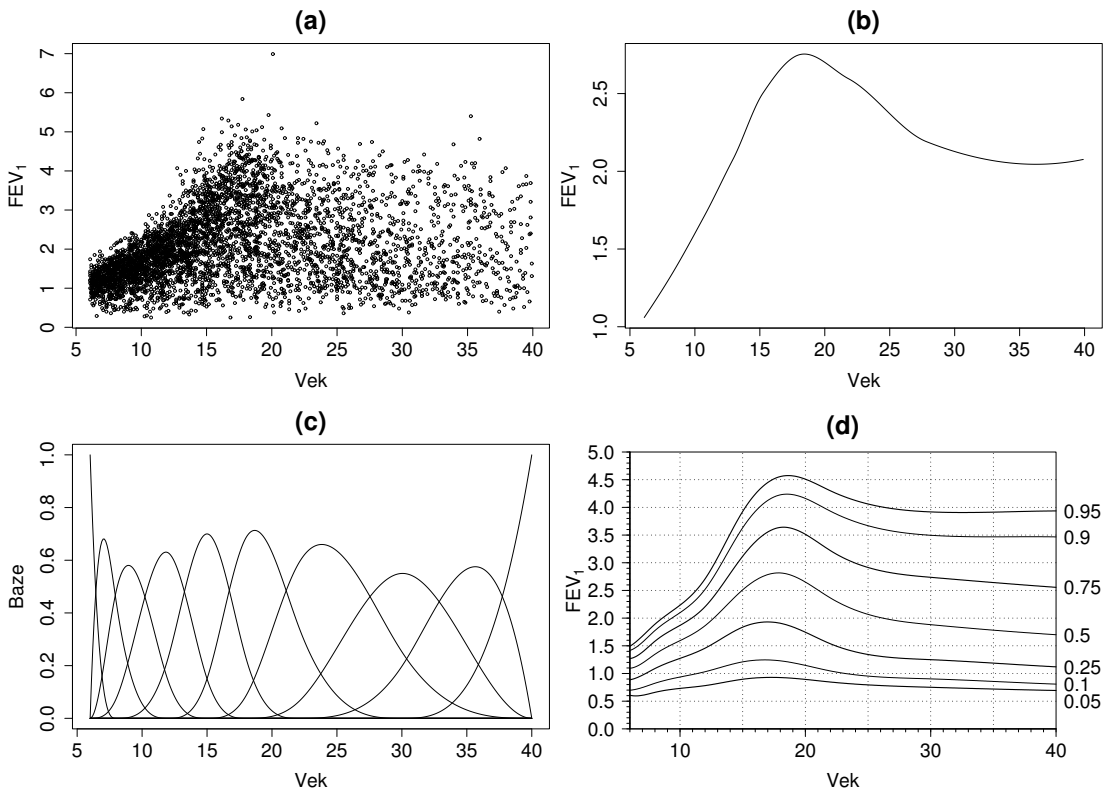
3 Modely a výsledky

Budeme tedy modelovat vliv výšky a věku na kvantily FEV_1 pomocí kvantilové regrese. Protože máme dostatek pozorování, sestavíme zvláštní modely pro muže a pro ženy. Kvantilová regrese předpokládá lineární model (2), ale vztah mezi \mathbf{X}_i (věk, výška) a kvantily odezvy Y_i (FEV_1) není lineární. Zvolíme tedy nějakou vhodnou transformaci prediktorů $\mathbf{g} : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^q$ a budeme uvažovat model

$$Q_Y(\alpha \mid \mathbf{X}_i = \mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\beta}_\alpha.$$

Transformace \mathbf{g} by měla být dostatečně flexibilní, aby umožňovala odhadnout kvantilové křivky různého tvaru a průběhu, ale zároveň by neměla mít příliš mnoho složek, aby se regresní parametry daly na velkých datech snadno odhadnout a aby výsledná křivka příliš neoscillovala. Rozhodli jsme se vyjádřit vliv výšky a věku pomocí kubické B-splínové báze s nevelkým počtem vhodně rozmístěných uzlů. Parametry modelu budeme odhadovat zvlášť pro $\alpha = 0.01, 0.02, \dots, 0.99$.

Nejprve se zabývejme závislostí kvantilů FEV_1 na výšce. Na obrázku 1(a) vidíme diagram pozorování výšky a FEV_1 (jen pro muže). Vyhlazená střední hodnota je vykreslena na panelu (b). Pro výšku jsme zvolili splínovou bázi



Obrázek 2: Závislost FEV₁ na věku u mužů. (a) diagram části dat; (b) vyhlazená střední hodnota; (c) B-splínová báze pro věk; (d) výsledné kvantilové křivky.

se sedmi rovnoměrně rozmístěnými uzly pokrývajícími rozmezí 105–190 cm. Nevelký počet pozorování, která padla mimo tento interval, byl z analýzy vyloučen. Počet a rozmístění uzlů jsme zvolili víceméně zkusmo pomocí vizuální inspekce výsledných křivek. Devět funkcí, které tvoří B-splínovou bázi s těmito uzly, je zobrazeno na panelu (c) obrázku 1. Každá báze je nenulová na nejvýše 4 sousedních meziuzlových intervalech. Naopak, v každé výšce, která není uzlem, jsou právě 4 báze nenulové. Součet všech bází v každém bodě je 1. Zařadíme-li do modelu absolutní člen, musíme zabránit singularitě regresní matice, např. vynecháním první báze. Náš model tedy je

$$Q_Y(\alpha \mid X_H = x) = \beta_{\alpha,1} + \sum_{j=2}^9 f_j^H(x) \beta_{\alpha,j}$$

kde $f_j^H(x)$ je j -tá B-splínová báze pro výšku. Nyní stačí spočítat odhady $\beta_{\alpha,j}$ pro $j = 1, \dots, 9$ a $\alpha = 0.01, 0.02, \dots, 0.99$, pro muže i pro ženy. Odhady vybraných kvantilových křivek pro muže jsou ukázány na panelu (d) obrázku 1.

Podobnou metodikou dostaneme odhady kvantilů FEV₁ v závislosti na věku. Jak vidíme na panelech (a) a (b) obrázku 2, tato závislost je u mužů nemonotónní s maximem okolo 18 let. Průběh u žen je podobný. Proto uzly

pro věk umístíme nerovnoměrně: od 6 do 22 let dáváme uzly v intervalech 2–4 roky, od 22 let výše v intervalech 8–10 let. Poslední uzel je ve 40 letech, neboť starších pacientů je relativně málo a kvantily jejich plicní funkce stejně nemůžeme dobře odhadnout. Z analýzy je vyloučíme. B-splínové báze pro věk vidíme na panelu (c) obrázku 2. Máme 8 uzlů, tudíž 10 bází. Výsledný model je

$$Q_Y(\alpha \mid X_A = x) = \gamma_{\alpha,1} + \sum_{j=2}^{10} f_j^A(x) \gamma_{\alpha,j}$$

kde $f_j^A(x)$ je j -tá B-splínová báze pro věk.

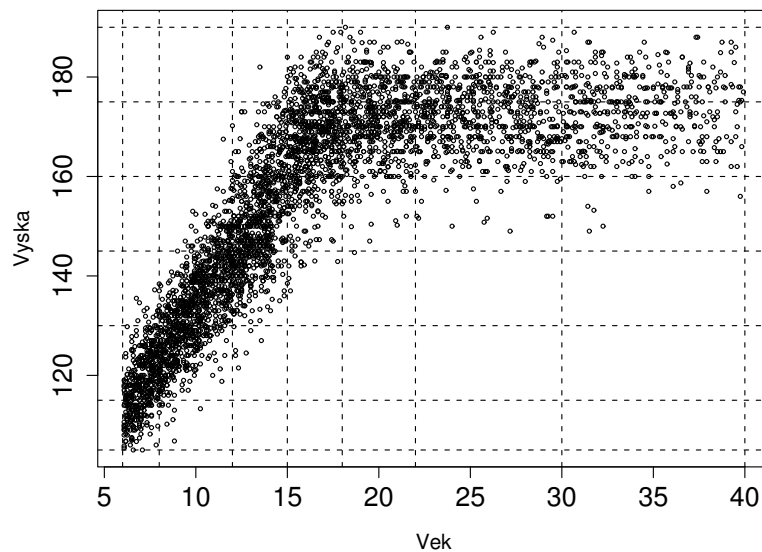
Věnujme se nyní závislosti kvantilů FEV₁ na věku a výšce zároveň. Můžeme uvažovat například model, který obsahuje splínové báze pro věk a výšku jako hlavní efekty a navíc všechny možné interakce (součiny) mezi bázemi pro věk a výšku. Tento model lze zapsat jako

$$\begin{aligned} Q_Y(\alpha \mid X_A = x, X_H = y) &= \eta_{\alpha,1} + \sum_{j=2}^{10} f_j^A(x) \gamma_{\alpha,j} + \sum_{j=2}^9 f_j^H(y) \beta_{\alpha,j} \\ &+ \sum_{i=2}^{10} \sum_{j=2}^9 f_i^A(x) f_j^H(y) \delta_{\alpha,i,j}. \end{aligned}$$

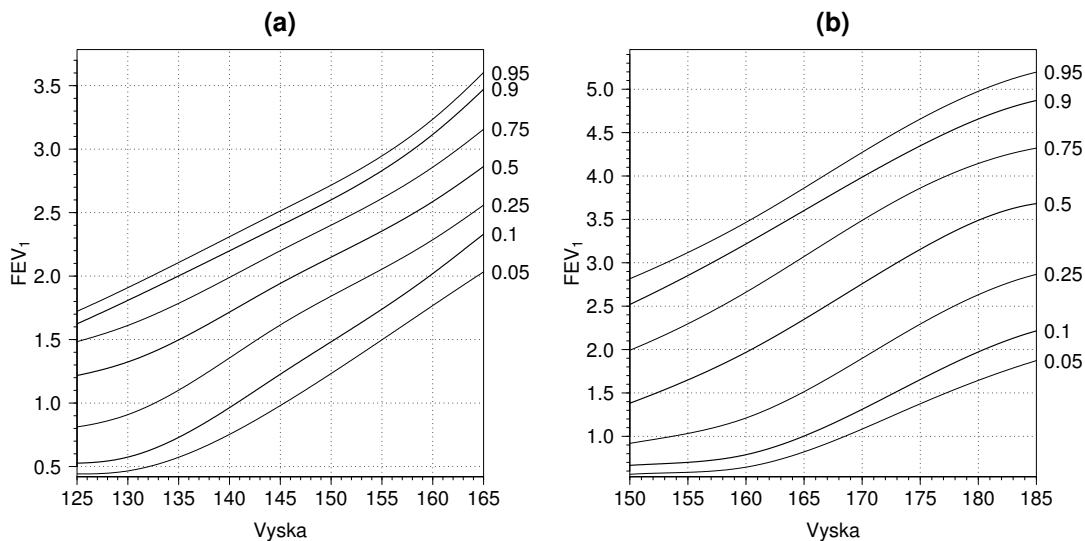
Takový model by měl 90 parametrů, z toho 72 interakčních. To je příliš mnoho. Hypotézy o nulovosti parametrů nemůžeme testovat standartními testy, protože pracujeme s korelovanými daty. Proto musíme eliminovat přebytečné interakce jiným způsobem. Stačí si uvědomit, že věk a výška jsou závislé veličiny, jejichž hodnoty se většinou objevují jen v úzkém pásu kolem pomyslné křivky (viz obrázek 3). Báze pro věk i výšku jsou nenulové pouze na části rozmezí možných hodnot, takže mezi všemi možnými součiny bázových funkcí bude řada takových, které dají nulové nebo téměř nulové hodnoty pro naprostou většinu pozorování. Jejich interakční členy způsobí singularitu regresní matice a mají beztak jen minimální vliv na odhadnuté regresní funkce. Proto jsme prozkoumali všechny možné součiny bázových funkcí pro věk a výšku a v modelu ponechali pouze takové, pro něž jsme v datech našli dostatečné množství dostatečně kladných hodnot. Konkrétní kritérium pro zařazení interakcí do modelu stanovilo, že interakce $f_i^A(x) f_j^H(y)$ zůstává v modelu právě když

$$\sum_{k=1}^n I\{f_i^A(X_k^A) \geq 0.25\} I\{f_j^H(X_k^H) \geq 0.25\} \geq 4500,$$

kde X_k^A je věk a X_k^H je výška u k -tého měření (celkový počet měření u mužů byl $n \approx 140000$). Po aplikaci tohoto čistě empiricky zvoleného pravidla zůstalo v modelu 25 z původních 72 interakcí a celkový počet parametrů byl $1 + 9 + 8 + 25 = 43$. U žen jsme postupovali podobně.



Obrázek 3: Diagram výšky proti věku (muži). Přerušované čáry vyznačují uzly splinových bází.



Obrázek 4: Věkově specifické kvantily FEV_1 v závislosti na výšce: (a) věk 12 let; (b) věk 18 let (muži).

Příklady výsledných kvantilových křivek jsou vykresleny na obrázku 4. Kreslíme je jako křivky kvantilů versus výšky pro pevný věk a pohlaví (obrázek 4 se týká chlapců starých 12 a 18 let). Aby bylo možné pohodlně pracovat s kvantily FEV_1 jako funkcemi věku a výšky, naprogramovali jsme vzájemnou konverzi mezi kvantily FEV_1 a hodnotami FEV_1 v litrech jako funkce v R a ve fortranu. Do výpočtů vstupuje několik tisíc koeficientů, což ale nečiní žádné praktické problémy. Jelikož máme odhadnuty koeficienty modelů pro

α -kvantily jen v 99 různých hodnotách α , používáme lineární interpolaci pro odhad libovolného kvantilu mezi $\alpha = 0.01$ a 0.99 . Lékaři mohou počítat kvantily vyplněním dat pro jednoho pacienta do formuláře umístěného na webové stránce <http://www.karlin.mff.cuni.cz/~kulich/fevref/cfref.html>.

Kvantily FEV₁ mají řadu aplikací při léčebné péči o pacienty a při výzkumu cystické fibrózy, například jako odezva v klinických zkouškách nových terapií. Jejich publikace vyvolala zájem odborné veřejnosti. Snad přispěje i k většímu prosazení kvantilové regrese v lékařských a přírodních vědách.

Reference

- [1] Bassett G., Koenker R. (1982). *An empirical quantile function for linear models with iid errors*. J. Amer. Statist. Assoc. **77**, 407–415.
- [2] Chen L., Wei L.J., Parzen M.I. (2004). *Quantile regression for correlated observations*. In: Lin, D.Y. and Heagerty, P.J., eds. Proceedings of the 2nd Seattle symposium in Biostatistics, Springer: New York, 51–69.
- [3] Cole T.J. (1988). *Fitting smoothed centile curves to reference data*. Journal of the Royal Statistical Society, Ser. A, **151**, 385–418.
- [4] Cole T.J., Green P.J. (1992). *Smoothing reference centile curves: the LMS method and penalized likelihood*. Stat. in Med. **11**, 1305–1319.
- [5] Gutenbrunner C., Jurečková J. (1992). *Regression rank scores and regression quantiles*. Ann. Statist. **20**, 305–330.
- [6] Koenker R.W., Bassett G.W. (1978). *Regression quantiles*. Econometrica **46**, 33–50.
- [7] Kulich M., Rosenfeld M., Campbell J., Kronmal R., Gibson R.G., Goss C.H., Ramsey B. (2005). *Disease-specific reference equations for lung function in patients with cystic fibrosis*. American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine **172**, 885–891.

Poděkování: Tato práce byla laskavě podporována výzkumným záměrem MSM 0021620839 financovaným MŠMT ČR.

Adresa: M. Kulich, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: kulich@karlin.mff.cuni.cz

STATISTIKA A SPOTŘEBITELSKÉ ÚVĚRY

David Legát

Klíčová slova: Credit scoring, klasifikace, logistická regrese, reject inference.

Abstrakt: V mnoha oblastech prodeje se využívají statistické modely pro předpovídání chování klientů. Nejinak je tomu v případě poskytování spotřebitelských úvěrů, kde tyto modely slouží jak pro řízení rizika v podobě velkého množství nesplacených úvěrů, tak pro různé marketingové kampaně. Tento příspěvek obsahuje popis několika vybraných problémů, které se opakovaně vyskytují při vytváření požadovaných modelů, spolu s doporučeními, jak tyto problémy řešit.

1 Úvod

V současné době existuje v České republice několik společností, které poskytují spotřebitelské úvěry. Tyto společnosti „rozdávají“ peníze buď prostřednictvím obchodníků a obchodních řetězců, např. GE Money Multiservis v obchodech Tesco a nebo společnost Cetelem v prodejnách Ikea či Globus, nebo přímou komunikací s klienty.

Rozhodne-li se zákazník v obchodě, že si koupí nějaké zboží na splátky, je potřeba o přidělení (nebo zamítnutí) úvěru rozhodnout co nejrychleji, pokud možno v několika málo minutách, aby zákazník neodešel do jiného obchodu. Tento požadavek vede ke snaze zautomatizovat aspoň částečně proces posuzování. Jedním z nástrojů, které pomáhají tomuto zautomatizování, jsou tzv. rizikové skórovací modely, které na základě osobních údajů žadatele odhadují pravděpodobnost, že úvěr nebude řádně splacen.

Obdobné modely se také uplatňují pro účely marketingu a přímé komunikace s klienty, kde slouží nejenom k odhadování rizikovosti nabízených úvěrů, ale také k odhadování pravděpodobností, že klient bude reagovat na nějaký typ nabídky, popřípadě k predikci odchodu klienta. Tyto modely budou dále nazývat jako obchodní skóre.

Pro vývoj a použití zmíněných modelů je potřeba vykonat několik kroků, jako je sběr a čištění dat, vytvoření statistického modelu, implementace modelu do systému a v neposlední řadě také sledování výkonnosti výsledného modelu v průběhu jeho používání. V tomto příspěvku se pokusím zmínit několik problémů, spojených s vytvářením požadovaných modelů.

Ze statistického hlediska jde ve všech zmíněných aplikacích o klasifikační úlohu, kde je snahou zařadit klienta do jedné ze dvou skupin (neplatič–dobrý klient; bude–nebude reagovat na nabídku nějakého produktu; odejde–neodejde). Mezi nejčastěji používané metody pro tyto úlohy patří logistická regrese a klasifikační stromy.

2 Definice cílové proměnné

První úkol, který je potřeba vykonat při vytváření skórovacích modelů, je upřesnění definice modelované události. V případě rizikového skóre musíme definovat, co vlastně myslíme špatným splácením. V případě obchodních skóre musíme určit dobu od odeslání nabídky, po které lze prohlásit, že daný klient na nabídku nereagoval. Při predikci odchodu klienta je potřebné nejenom určit jak dlouho musí být klient „neaktivní“, aby bylo zřejmé, že odešel, ale také to, co se vlastně jeho „aktivitou“ myslí.

V praxi se používají především dvě varianty definic špatného splácení úvěru, přičemž doporučována je druhá z nich:

- **Momentálně špatný:** Klient je po M měsících po poskytnutí úvěru ve zpoždění se splácením aspoň o K měsíců.
- **Někdy špatný:** Klient se někdy v průběhu prvních M měsíců po poskytnutí úvěru dostal do zpoždění se splácením aspoň o K měsíců.

Příklad:

Zvolíme konstanty $M = 12$ a $K = 4$. Potom klient, který zaplatí první tři splátky, pak pět měsíců vynechá, avšak v devátém měsíci vše doplatí a dále pokračuje ve splácení dle splátkového kalendáře, je podle první definice považován za dobrého, zatímco podle druhé je již špatný.

měsíc	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
zpoždění	0	0	0	1	2	3	4	5	0	0	0	0

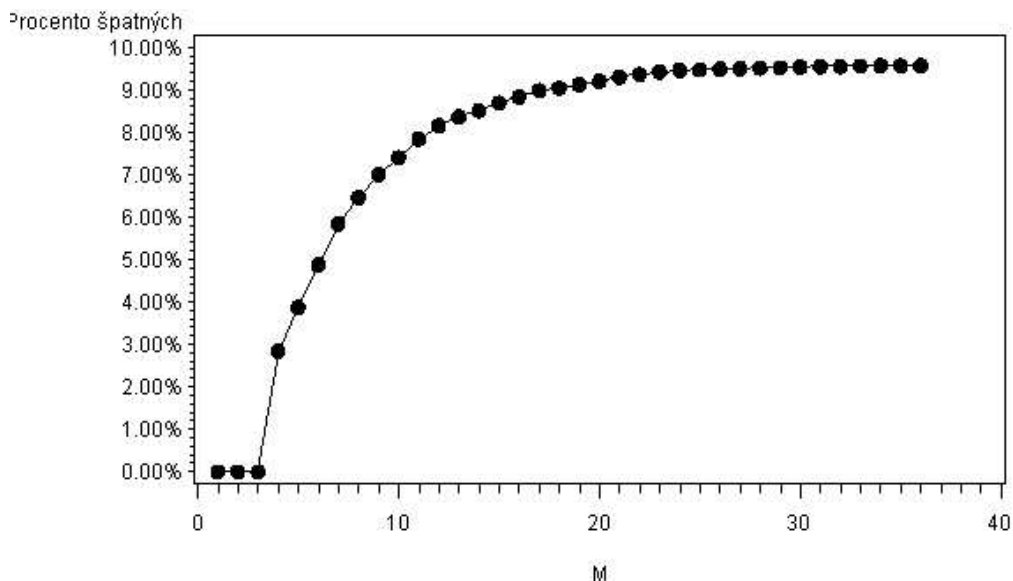
Tabulka 1: Zpoždění ve splácení „ukázkového“ klienta.

□

Konstanta K v uvedených definicích se volí především ve spolupráci se specialisty na vymáhání. S rostoucím zpožděním ve splácení se totiž mění i postupy vymáhání pohledávek a pro některé kritické hodnoty K může změna postupů vést ke zvýšené finanční náročnosti vymáhání. Období M se snažíme zvolit co nejkratší, protože čím nižší M zvolíme, tím čerstvější úvěry můžeme použít pro konstrukci modelu. Na druhou stranu M musíme zvolit dostatečně velké na to, aby se za tuto dobu odhalila většina úvěrů, které se dostanou za svůj život do zpoždění K měsíců.

Příklad:

Na Obrázku 1 je uveden graf závislosti procenta „někdy špatných“ úvěrů na volbě parametru M při pevné volbě $K = 4$. Z grafu je vidět, že při volbě $M = 36$ bychom měli 9.6% špatných úvěrů a tedy ke konstrukci modelu bychom mohli použít úvěry, které byly poskytnuty před třemi lety a dříve. Při volbě $M = 18$ bude stále ještě 9.1% špatných úvěrů. Neboli, pro obě uvedené možnosti je množina špatných úvěrů téměř stejná, nicméně pro $M = 18$ budeme moci použít mnohem mladší úvěry pro vytvoření modelu. □



Obrázek 1: Závislost procenta špatných úvěrů na volbě parametru M .

Podobným způsobem se volí i definice cílové proměnné v modelech vytvářených pro účely marketingu. Čas potřebný ke zjištění toho, zda došlo k modelované události, bývá v těchto případech výrazně kratší.

3 Výběr vysvětlujících proměnných

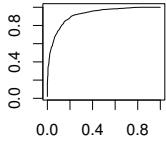
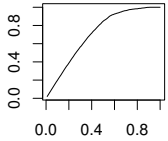
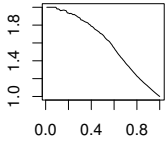
Vzhledem k tomu, že ke zjištění modelované události je většinou potřeba relativně dlouhé časové období, je potřeba, aby vytvořené modely byly nejenom co nejvíce výkonné, ale také aby jejich prediktivní síla byla stabilní v čase.

Výkonnost modelu se většinou měří pomocí tzv. ROC křivky (resp. Lorenzovy křivky nebo Lift křivky). Předpokládejme, že výsledný klasifikátor je následujícího tvaru:

$$\begin{aligned}\widehat{Y}_i = 1 &\Leftrightarrow f(x_i) < c \\ \widehat{Y}_i = 0 &\Leftrightarrow f(x_i) \geq c\end{aligned}$$

kde $f(x)$ je klasifikační funkce a c je tzv. prahová hodnota (cut off). V případě logistické regrese je tato funkce lineární, v případě klasifikačních stromů je po částech konstantní. Výkonnost daného klasifikátoru se pak většinou hodnotí pomocí tzv. matice nepodobností (confusion matrix), což je v podstatě následující kontingenční tabulka

	$Y_i = 0$	$Y_i = 1$	
$\widehat{Y}_i = 0$	$n_{00}(c)$	$n_{01}(c)$	$n_{0.}(c)$
$\widehat{Y}_i = 1$	$n_{10}(c)$	$n_{11}(c)$	$n_{1.}(c)$
	$n_{.0}$	$n_{.1}$	n

Název	ROC	Lorenz	Lift
Definice	$\left(\frac{n_{10}(c)}{n_{\cdot 0}}; \frac{n_{11}(c)}{n_{\cdot 1}}\right)$	$\left(\frac{n_{1\cdot}(c)}{n}; \frac{n_{11}(c)}{n_{\cdot 1}}\right)$	$\left(\frac{n_{1\cdot}(c)}{n}; \frac{n_{11}(c)}{n_{\cdot 1}} / \frac{n_{1\cdot}(c)}{n}\right)$
			

Tabulka 2: ROC, Lorenzova a Lift křivka.

Zmíněné tři křivky jsou zavedeny v Tabulce 2, kde jsou také uvedeny jejich příklady.

Většinou máme k vytvoření modelu velký výběr vysvětlujících proměnných. Proto se nejdříve vyloučí ty, které mají buď malou prediktivní sílu nebo jsou nestabilní v čase, přičemž se můžeme setkat se dvěma druhy nestability.

- Rozdělení dané vysvětlující proměnné je v současné době jiné než v době, kdy jsme sbírali data.
- Tvar závislosti vysvětlované proměnné na dané vysvětlující proměnné se v čase mění.

Po vyloučení nepotřebných prediktorů se většinou užívají různé alternativy dopředných (forward) nebo krokových (stepwise) algoritmů. Zpětný (backward) algoritmus je mnohdy nepoužitelný, protože i po vyloučení „zbytečných“ prediktorů zbude příliš velké množství proměnných na to, aby nebylo možné odhadnout parametry v plném modelu. Za účelem zvýšení časové stability modelu se při vytváření také dbá na to, aby byly prediktory s vysokou prediktivní silou nahrazeny větším množstvím prediktorů s nižší prediktivní silou.

4 Transformace proměnných

Při použití logistické regrese se implicitně předpokládá závislost cílové proměnné na vysvětlujících proměnných ve tvaru

$$p = \frac{1}{1 + \gamma e^{-\beta x}}.$$

Což mimo jiné znamená, že uvedená závislost predikované pravděpodobnosti je monotónní. Často se ovšem stává že tento předpoklad není splněn. Například riziko nesplacení úvěru bývá zvýšené jak pro mladší žadatele, tak pro

žadatele, kteří mají blízko do důchodu, zatímco úvěry pro klienty středního věku jsou málo rizikové.

V těchto případech je možné použít různé transformace vysvětlujících proměnných, avšak i slavná Boxova–Coxova transformace včetně logaritmické transformace jsou monotónní. (To znamená, že neřeší výše uvedený příklad.)

Častěji se používá tzv. diskretizace spojitých proměnných. Například místo proměnné AGE (věk žadatele) použijeme kategoriální proměnnou KAT_AGE, která má následující 3 úrovně:

$$\begin{aligned} \text{KAT_AGE} = 1 &\Leftrightarrow \text{AGE} \leq 30 \\ \text{KAT_AGE} = 2 &\Leftrightarrow 30 < \text{AGE} \leq 50 \\ \text{KAT_AGE} = 3 &\Leftrightarrow 50 < \text{AGE} \end{aligned}$$

Tento přístup vyřeší problém s nemonotónní závislostí, na druhou stranu v modelu vzroste počet parametrů, čímž se sníží přesnost jejich odhadů. Navíc při použití tohoto postupu vyvstávají další dvě otázky:

- Kolik úrovní zvolit pro nově vytvořenou proměnnou?
- Jak nastavit mezní hodnoty pro rozdělení objektů do kategorií?

Jedno možné řešení k odpovězení na tyto otázky využívá klasifikační stromy.

Jako poslední možnost uvedu použití tzv. vah zřejmosti (weights of evidence). Mějme nějakou kategoriální proměnnou PROM jejíž úrovně jsou označeny čísly $1, \dots, k$ (kde k je počet úrovní) a cílovou proměnnou TARGET, která nabývá hodnot 0 a 1. Pak pro každou úroveň PROM vypočteme váhu zřejmosti následujícím způsobem:

$$WOE_i(\text{PROM}) = \log\left(\frac{N_i^1(\text{PROM})}{N^1}\right) - \log\left(\frac{N_i^0(\text{PROM})}{N^0}\right),$$

N^0 je počet pozorování kde TARGET = 0

N^1 je počet pozorování kde TARGET = 1

$N_i^0(\text{PROM})$ je počet pozorování kde TARGET = 0 a PROM = i

$N_i^1(\text{PROM})$ je počet pozorování kde TARGET = 1 a PROM = i

Vrátíme-li se k našemu oblíbenému příkladu, tak použitím vah zřejmosti myslíme nahrazení vysvětlující proměnné AGE proměnnou WOE_AGE, kde

$$\text{WOE_AGE} = \text{WOE}_1(\text{KAT_AGE}) \Leftrightarrow \text{KAT_AGE} = 1,$$

$$\text{WOE_AGE} = \text{WOE}_2(\text{KAT_AGE}) \Leftrightarrow \text{KAT_AGE} = 2,$$

$$\text{WOE_AGE} = \text{WOE}_3(\text{KAT_AGE}) \Leftrightarrow \text{KAT_AGE} = 3,$$

čímž v podstatě dostaneme nemonotónní po částech konstantní transformaci proměnné AGE. Tím vyřešíme problém zmíněný na začátku sekce a nezvýšíme počet odhadovaných parametrů. Problém s volbou počtu úrovní a mezních hodnot zůstává.

5 Úvaha o zamítnutých (reject inference)

V případě klasifikační úlohy většinou předpokládáme, že máme k dispozici N pozorování, která obsahují jak vysvětlující proměnné \mathbf{X}_i tak cílovou proměnnou Y_i , která specifikuje, do které kategorie daný objekt skutečně patří. V případě rizikového skóre je však situace trochu jiná. U žadatelů, kterým byla žádost o úvěr zamítnuta totiž nevíme jestli by patřili mezi klienty, kteří by dobře spláceli nebo ne. To znamená, že vysvětlovanou proměnnou Y_i známe jen u některých žadatelů, avšak vytvořený model chceme v budoucnosti používat k posouzení všech nových žádostí (nejenom těch, které jsme akceptovali v minulosti). Předpokládejme tedy, že máme $N + M$ pozorování, kde

$$\begin{aligned} Y_i \text{ jsou známé} & & 1 \leq i \leq N, \\ Y_i \text{ jsou neznámé} & & N < i \leq N + M. \end{aligned}$$

Chybějící informaci můžeme doplnit tím, že uděláme náhodný výběr ze zamítnutých úvěrů. U vybraných záznamů zjistíme hodnotu proměnné Y_i . To v praxi odpovídá tomu, že každý úvěr, který by v normálním posuzovacím procesu neprošel, ještě s nějakou předem zvolenou pravděpodobností p přijmeme. Těmto pozorováním se při modelování nastaví vyšší váha (například $1/p$).

Uvažujme proměnnou `ACCEPTED`, která bude nabývat hodnoty 1 pro prvních N pozorování a 0 pro zbývajících M žádostí. Pomocí této proměnné můžeme vytvořit model, který bude pro každé pozorování $i \in \{1, \dots, N\}$ odhadovat pravděpodobnost přijetí P_i úvěru s charakteristikami danými hodnotami \mathbf{X}_i . Výsledný model pro predikci nesplacení úvěru dostaneme pomocí pozorování $i \in \{1, \dots, N\}$ s použitím vah $W_i = 1/P_i$.

Často se také používá postup, ve kterém nasimulujeme chybějící hodnoty $Y_i; i \in \{N + 1, \dots, N + M\}$ pomocí předběžného modelu. V takovém případě musíme vykonat 3 kroky:

1. Vytvořit předběžný model. K tomuto účelu použijeme prvních N pozorování $i \in \{1, \dots, N\}$. Modeluje se cílová proměnná Y_i v závislosti na vysvětlujících proměnných \mathbf{X}_i .
2. Na základě předběžného modelu odhadneme pravděpodobnost špatného splácení \hat{P}_i pro pozorování $i \in \{N + 1, \dots, N + M\}$ a nasimulujeme odpovídající hodnoty Y_i tak, aby

$$\begin{aligned} Y_i = 1 & & \text{s pravděpodobností } \hat{P}_i, \\ Y_i = 0 & & \text{s pravděpodobností } 1 - \hat{P}_i. \end{aligned}$$

3. Vytvoříme finální model ze všech pozorování $i \in \{1, \dots, N + M\}$. Opět modelujeme cílovou proměnnou Y_i v závislosti na vysvětlujících proměnných \mathbf{X}_i .

6 Závěr

V mnoha oblastech prodeje se firmy snaží co nejlépe předpovídat chování svých klientů. K tomuto účelu se často používají základní statistické postupy jako jsou lineární a zobecněné lineární modely, případně klasifikační a regresní stromy. Přestože jak o těchto metodách, tak o regresi a klasifikaci samotné bylo napsáno mnoho knih a článků, při jejich aplikaci vyvstává mnoho nových a zajímavých problémů k řešení. Několik z nich jsem se pokusil předvést v tomto příspěvku.

Reference

- [1] McCullagh P., Nelder J. (1989). *Generalized linear models*. 2nd Edition. Chapman & Hall, London.
- [2] Fahrmeir L., Tutz G. (1994). *Multivariate statistical modelling based on generalized linear models*. Springer, New York.
- [3] Antoch J., Gregoire G., Jarušková D. (2004). *Detection of structural changes in generalized linear models*. *Statistics & Probability Letters* **69**, 315–332.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GAČR č. 201/06/0186.

Adresa: D. Legát, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: david.legat@gmail.com

DOBYTÍ JIŽNÍHO PÓLU

(příběh z cyklu „Statistický pohled na měření v české a světové literatuře“)

Jaroslav Marek

Klíčová slova: Dvouetapový regresní model, podmínka typu I, BLUE.

Abstrakt: Příspěvek je věnován statistické analýze připojovacích měření. U konkrétní úlohy je vytvořen dvouetapový model s podmínkou typu I na parametry obou etap a je proveden výpočet odhadu parametrů. Cílem této práce demonstrovat možné použití teorie odhadu. Práce je věnována úloze, ve které jsou použita skutečná data, ale pro určení odhadu parametrů jsou použity smyšlené kovarianční matice.

1 Z historie

Večer dne 14. prosince je ve stanu nálada jako v předvečer slavnosti. Zítřa — zítřa budou u cíle — a nikde se neukázalo nic, co by jim mohlo věc pokazit. Ráno dne 15. prosince se začíná překrásnou pohodou. Sotva si dopřejí času k snídani, sáně snad ještě nikdy nebyly tak rychle naloženy, 25 stupňů mrazu, slunce pozakryto závojem mraků, sáňová dráha místy skvělá, psi pádí jako šípy, poslední věže jsou postaveny jen v poloviční výšce a jen tak halabala, stejně brzy učiní své povinnosti zadost. V poledne propočítávají, kde jsou — ještě 13 kilometrů!

Nikdo téměř nemluví, rozčilením mají všichni hrdlo přiškrceno. Řidiči saní nespouštějí oči s měřicího kolečka, zdali vypočtená vzdálenost dosud není ujeta. A měřiče kilometrů fungují tak přesně, že se o 3. hodině odpolední všechny troje sáně na témž místě zastavují. Divoká štvance je rázem skončena. Cíle je dosaženo! Silný stisk ruky vůdci a všem kamarádům, krátké blahopřání — ven s vlajkou!

A patero rukou, zle pořízených mrazem, chápe se tyče, zdvihnou vlající prapor, první a jediný na zeměpisném jižním pólu, a Amundsen pronáší tato prostá slova: „Vztyčujeme tě, milá vlajko, na jižním pólu a dáváme plošně, na níž leží, jméno země Krále Haakona VII.“ Vlajka je zaražena do země a připevněna. Je po obřadu.

Zářící oči, radost na všech tvářích, hrdý smích: Norsko je pánem jižního pólu, Amundsen se čtyřmi muži dobyl této pevnosti.

Slavný je večer těch pěti mužů ve stanu! Jako slavnostní pečeni kousek tuleního masa, a poněvadž zde, na této nejjižnější výspě světa, nelze ještě obdržeti štítky na hůl, vyryjí do saní a do všeho, co mají u sebe, nápisy:

„Jižní pól, 15. prosince 1911.“



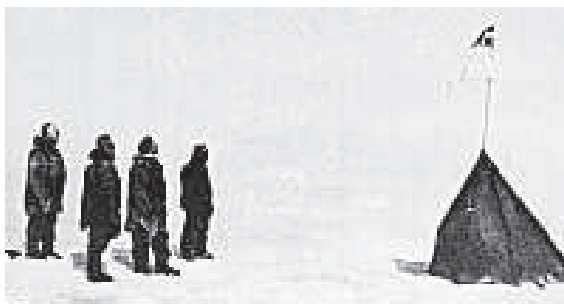
Ale jsou opravdu na pólu? Poněvadž se slunce skrylo, nemohli zjistit v poledne jeho výšku; ale výpočet z půlnoci udává $89^{\circ}56'$; to by znamenalo ještě šest nebo sedm kilometrů k rozhodujícímu místu, i když přístroje, které má Amundsen s sebou, nečiní měření možné na centimetr. Ale nikdo nesmí v budoucnosti kritisovati a říci, že skutečného pólu nebylo dosaženo. Na zítřek zbývá tedy ještě úkol, pól „obkroužití“; tři muži, každý jiným směrem půjdou ještě asi 20 kilometrů dále, takže i malé omyly ve výpočtu budou vyrovnány.

Každý dobře ví, že touto výpravou dává v sázku svůj život — ještě nyní, v posledním okamžiku, kdy výprava vlastně již dosáhla svého cíle. Kdyby však přišli Angličané a svými dozajista jemnějšími přístroji prokázali, že skutečný pól ležel o několik mizerných kilometrů jižněji, východněji nebo západněji, ti by se smáli pod vousy! To se nesmí stát!

Nejméně osm hodin, nepříhodí-li se jim nehoda, které se nenadáli. Hodinu co hodinu měří Amundsen výšku slunce, jako by sám sebe chtěl ujistit, že slunce tu ještě je, a tato rozhodující, poněvadž souvislá řada jeho výpočtů praví, že opravdu je ještě kus cesty vzdálen od pólu: za posledního denního pochodu vybočily sáně trochu ze směru přesně jižního a stojí nyní na $89^{\circ}54'32''$ jižní zeměpisné šířky.

Záhy odpoledne dne 15. prosince nastává opravdu poslední pochod desíti kilometrů. Mají potravin ještě na osmnáct dní; svých šestnáct psů — jednoho zabili, druhý úplně zubožený, odplížil se kamsi stranou, aby v klidu zašel — rozdělí do dvou sání, rovněž tak zavazadla; třetí sáně postaví kolmo na sních, ať zde zůstanou vedle několika prázdných beden. Pak našich pět mužů zamíří přesně jižním směrem, Amundsen jako poslední přísně dbá, aby stopa byla přímá jako napjatá šňůra. Tak pochodují husím pochodem 10 kilometrů, pak nejprve postaví stan a připraví se na příští den jež věnují přesnému, každou hodinu opakovanému měření. Jsou nyní tak blízko pólu, jak se mu podle svých přístrojů mohli přiblížiti. Pro všechny případy postoupí Bjaaland a Hanssen ještě o 7 kilometrů, stále po přímé linii. Tím je věc dovršena a na oběd tohoto 18. prosince nezapomene ani jeden z nich, co živ bude. Bjaaland povstane,

aby pronesl slavnostní řeč. Doutník na pólu! První posel onoho vzdáleného lepšího světa, do něhož budou ode dneška zase spěchat. Pak přinesou se saní malý stan, jež vezli s sebou. Postaví jej na pólu — pevně, aby jej bouře nepřekotila — nad ním se třepotá norská vlajka.



Ráno dne 26. ledna 1912 zastavují dvoje sáně se 12 psy (z původních 52) před táborem. Cesta trvala 99 dní, urazili celkem asi 3000 km.

z knihy H. H. Houden, Útok na jižní pól, KMa, Praha, 2001

2 Numerická část – zadání úlohy

Naším cílem bude pokusit se odhadnout, co bylo příčinou první mylné oslavy dobytí jižního pólu. Amundsen uvádí že důvodem bylo to, že se mírně odchyli-li od jižního směru. Jak velkou odchylkou můžeme vysvětlit mylnou oslavu? Pokusíme se odhadnout (zpětně rekonstruovat) polohu z poledne 15. prosince (bod označíme P).

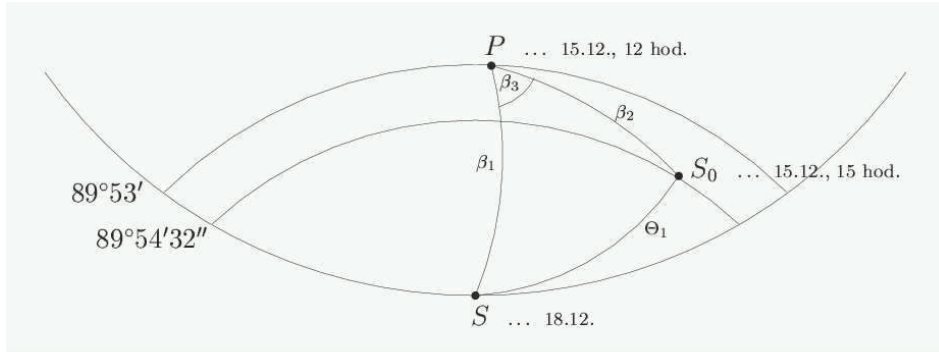
Amundsenem určenou polohu jižního pólu ze dne 18. prosince budeme považovat za přesnou (bod označíme S). Jeho poloha byla ověřena Scottem 17. 1. 1912, stan se na místě dochoval a byla zde vybudována polární stanice. Polohu prvně oslavovaného pólu dosaženou 15. 12. 1911 v 15 hodin, která byla nakonec určena jako $89^{\circ}54'32''$ budeme také považovat za přesnou (bod označíme S_0). Tato poloha byla určena Amundsenem opakovaným měřením. Vzdálenost těchto bodů budeme považovat za měření z první etapy (připojovací) a označíme ji jako Θ_1 .

Oblouk, který měli urazit mezi bodem P a skutečným jižním pólem S označíme jako β_1 , vzdálenost kterou urazili mezi bodem P a mylně určeným jižním pólem S_0 označíme jako β_2 . Odchylku od jižního směru ($\angle SPS_0$) označíme jako β_3 . Parametry $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ budeme považovat za body z druhé etapy (připojované).

Z textu máme k dispozici oblouk β_1 změřený hodnotou $y_1 = 7'$, vzdálenost β_2 změřenou hodnotou $y_2 = 13$ km. Hodnotu parametru β_3 můžeme vypočítat z hodnot ostatních parametrů.

Pro výpočet zvolíme takový typ odhadů, kdy nelze měření z první etapy opravit na základě měření z druhé etapy.

V části 4 na str. 210 sestavíme model úlohy a provedeme korekce měřených údajů.



V našem sférickém trojúhelníku použijeme kosinovou větu pro strany:

$$\cos(\Theta_1) = \cos(\beta_2) \cos(\beta_1) + \sin(\beta_2) \sin(\beta_1) \cos(\beta_3),$$

$$\cos(\beta_3) = \frac{\cos(\Theta_1) - \cos(\beta_2) \cos(\beta_1)}{\sin(\beta_2) \sin(\beta_1)}$$

a po dosazení měřených hodnot (v obloukové míře) $\Theta_1 = \frac{5 \times 60 + 28}{206265}$,

$$\beta_1 = \frac{13}{6380}, \beta_2 = \frac{7 \times 60}{206265} \text{ určíme hodnotu } \tilde{\beta}_3 = 0,8017144 \text{ rad} = 45^\circ 56' 05''.$$

Při převodu do obloukové míry jsme použili vztah $1'' = \frac{\pi}{180 \cdot 60 \cdot 60} \doteq \frac{1}{206265}$, dále jsme uvažovali poloměr Země jako 6380 km.

Vypočtená hodnota $\tilde{\beta}_3 = 45^\circ 56' 05''$ ale reprezentuje velkou odchylku vytyčeného jižního směru pochodu z bodu P . Položme si otázku, zda mohla být tato odchylka menší, pokud připustíme nepřesnost měřených údajů. Mohli by pochodovat jižním směrem přesněji a bylo by možné mylnou oslavu vysvětlit při těchto disperzích chybami při určení ostatních parametrů? Nebo je nepochybné, že se opravdu tak moc odchýlili? To jsou otázky, na které se pokusíme ve čtvrté části odpovědět. V numerické části se na str. 210 pokusíme odhadnout parametry druhé etapy za předpokladu, že se odchýlili od jižního směru pro různé hodnoty y_3 z intervalu $(20^\circ, 55^\circ)$.

3 Teoretická část – model připojovacího měření

V této části se budeme zabývat modelem dvouetapového měření, kde vzniká podmínka typu I na parametry obou etap a kde nejde na základě měření ve druhé etapě opravit měření první etapy. Tento typ úloh se typicky vyskytuje v geodézii, kdy nové měření navazuje na stávající geodetickou síť. Odhady v takovém modelu jsou studovány např. v článcích [2], [3], [4], [5] a [6].

Definice 3.1. *Modelem připojovacího měření budeme nazývat náhodný vektor $\mathbf{Y} = (\mathbf{Y}'_1, \mathbf{Y}'_2)$, jehož střední hodnota a kovarianční matice má následující strukturu:*

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \end{pmatrix} \sim \left[\begin{pmatrix} \mathbf{X}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{D} & \mathbf{X}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta \\ \beta \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \right],$$

kde $\mathbf{X}_1, \mathbf{D}, \mathbf{X}_2$ jsou známé matice typu $n_1 \times k_1$, $n_2 \times k_1$, $n_2 \times k_2$, vyhovující podmínce $\mathcal{M}(\mathbf{D}') \subset \mathcal{M}(\mathbf{X}'_1)$; Θ, β jsou neznámé k_1 a k_2 dimenzionální vektory; Σ_{11} a Σ_{22} jsou známé kovarianční matice vektorů \mathbf{Y}_1 a \mathbf{Y}_2 .

V tomto modelu se parametr Θ odhaduje na bázi vektoru \mathbf{Y}_1 první etapy a parametr β na bázi vektoru $\mathbf{Y}_2 - \mathbf{D}\hat{\Theta}$ a $\hat{\Theta}$. Výsledky měření ve druhé etapě (tzn. \mathbf{Y}_2) už nelze použít pro změnu odhadu $\hat{\Theta}$.

Parametrický prostor modelu připojovacího měření \mathbf{Y} z této definice uvažujeme ve tvaru $\underline{\Theta} = \{(\Theta', \beta') : \mathbf{B}\beta + \mathbf{C}\Theta + \mathbf{a} = \mathbf{0}\}$, kde \mathbf{B}, \mathbf{C} jsou matice typu $q \times k_2, q \times k_1$ a kde \mathbf{a} je vektor délky q , pro které platí $r(\mathbf{B}) = q < k_2$. Vektor Θ je parametr I. etapy (připojovací), vektor β je parametr II. etapy (připojované).

Definice 3.2. Model z definice 3.1 s daným parametrickým prostorem $\underline{\Theta}$ je regulární, jestliže $r(\mathbf{X}_1) = k_1, r(\mathbf{X}_2) = k_2$ a Σ_{11}, Σ_{22} jsou pozitivně definitní a $r(\mathbf{B}) = q$.

Definice 3.3. Budeme uvažovat model připojovacího měření uvedený v definici 3.1. Odhad $\mathbf{L}'\mathbf{Y} + \mathbf{d}$ funkce $\mathbf{f}(\beta) = \mathbf{f}'\beta$, kde existuje Θ tak, že $(\Theta', \beta')' \in \underline{\Theta}$, kde \mathbf{f} je daný vektor z \mathcal{R}^k nazýváme nejlepší nestranný odhad, nejlepší ve smyslu variance, jestliže je

(i) nestranný: pro všechny $(\Theta', \beta') \in \underline{\Theta}$ platí $E(\mathbf{L}'\mathbf{Y} + \mathbf{d}) = \mathbf{f}'\beta$,

(ii) eficientní: $\text{Var}(\mathbf{L}'\mathbf{Y} + \mathbf{d}) \leq \text{Var}(\tilde{\mathbf{L}}'\mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{d}})$, kde $\tilde{\mathbf{L}}'\mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{d}}$ je libovolný jiný nestranný odhad funkce $\mathbf{f}(\beta)$.

Při určení odhadu $\hat{\beta}$ se v praxi obvykle zanedbává nepřesnost v určení odhadu parametru Θ , tj. předpokládá se, že $\text{Var}(\hat{\Theta}) = \mathbf{0}$. Proto nejlepší nestranný odhad (standardní odhad) je dán následující větou.

Věta 3.1. Standardní odhad $\hat{\beta}$ parametru β v modelu z definice 3.1 je dán vztahem

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} (\mathbf{Y}_2 - \mathbf{D}\hat{\Theta}) - (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}' \times \\ \times [\mathbf{B}(\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}']^{-1} \left\{ \mathbf{a} + \mathbf{C}\hat{\Theta} + \mathbf{B}(\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} (\mathbf{Y}_2 - \mathbf{D}\hat{\Theta}) \right\},$$

přičemž tento odhad je nestranný, tzn. $E(\hat{\beta}) = \beta$.

Důkaz: viz [6], str. 72 – 73.

Věta 3.2. Jestliže $\text{Var}(\hat{\Theta}) \neq \mathbf{0}$ potom kovarianční matice standardního odhadu $\hat{\beta}$ je tvořena „nejistotou typu A“ a „nejistotou typu B“:

$$\text{Var}(\hat{\beta}) = \text{Var}_0(\hat{\beta}) + \underbrace{\langle \mathbf{I} - (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}' (\mathbf{B} (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}')^{-1} \mathbf{B} \rangle}_{\text{nejistota typu A}} \times \\ \times (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{D} - (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \times \\ \times \mathbf{B}' [\mathbf{B} (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}']^{-1} \mathbf{C} \rangle \times \\ \times \text{Var}(\hat{\Theta}) \times \\ \times \underbrace{\langle \mathbf{I} - (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}' (\mathbf{B} (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}')^{-1} \mathbf{B} \rangle}_{\text{nejistota typu B}} \times \\ \times (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{D} - (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \times \\ \times \mathbf{B}' [\mathbf{B} (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}']^{-1} \mathbf{C} \rangle'$$

nejistota
typu A

nejistota
typu B

$$\text{kde } \text{Var}_0(\hat{\beta}) = (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} - (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}' \times \\ \times [\mathbf{B} (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{B}']^{-1} \mathbf{B} (\mathbf{X}'_2 \Sigma_{22}^{-1} \mathbf{X}_2)^{-1}.$$

Důkaz: viz [6], str. 73 – 74.

Předchozí věta je formulována z potřeby znát při užití standardního odhadu $\hat{\beta}$ skutečnou varianční matici $\text{Var}(\hat{\beta})$, ve které budou respektovány i nejistoty v odhadu parametru Θ . Vliv těchto nejistot se označuje jako nejistota typu B. Nejistota typu A je důsledkem měření ve druhé etapě.

4 Numerická část – výpočet

Úlohou je odhadnout hodnotu parametru β_1 rozdílu zeměpisné šířky bodu P a skutečného jižního pólu S parametru β_2 vzdálenosti mezi bodem P a mylně určeným jižním pólem S_0 a hodnotu parametru β_3 odchylky od jižního směru, (viz obrázek na str. 208) změřených ve druhé etapě hodnotami y_1 , y_2 a y_3 .

K dispozici máme dále z první etapy (připojovací) odhad rozdílu zeměpisných šířek mylně oslavovaného pólu S_0 a skutečného pólu S , označený jako Θ_1 , změřený hodnotou $\hat{\Theta}_1$.

Přesnost v určení hodnoty $\hat{\Theta}_1$ souřadnice Θ_1 je charakterizována směrodatnou odchylkou, resp. kovarianční maticí (viz v dalším) a analogicky to platí pro změřené hodnoty y_1 , y_2 a y_3 veličin β_1 , β_2 a β_3 .

V dalších numerických výpočtech budeme uvažovat pro vzdálenost Θ_1 mezi pólem S a falešným pólem S_0 přesnost měření $\tau_1^0 = 10''$. Pro zeměpisnou šířku bodu P popsanou hodnotou $90^\circ - \beta_1$ budeme uvažovat přesnost měření $\sigma_1^0 = 1,0'$. Pro vzdálenost β_2 mezi bodem P a falešným pólem S_0 , změřenou kolečkem na saních ($3 \times$ opakované měření), budeme uvažovat přesnost měřícího kolečka $\sigma_2^0 = 0,5$ km. Přesnost vytyčeného jižního směru pochodu z bodu P budeme uvažovat jako $\sigma_3^0 = 0,349 = 20^\circ$.

Na základě těchto úvah sestavíme model připojovacího měření podle definice 3.1. Nechť $\hat{\Theta}_1$ je náhodná proměnná se střední hodnotou Θ_1 a s disperzí τ_1^2 .

$$\mathbf{Y}_1 = (\hat{\Theta}_1) \sim N_1 [X_1(\Theta_1); \Sigma_{11}].$$

V našem případě uvažujeme $X_1 = I_{1,1}$ a $\Sigma_{11} = (\tau_1^2) = (10^2/206265^2)$. Nechť y_1, y_2, y_3 jsou stochasticky nezávislé náhodné proměnné se středními hodnotami β_1, β_2 a β_3 s disperzemi $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \sigma_3^2$.

$$\mathbf{Y}_2 = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} \sim N_3 \left[X_2 \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix}; \Sigma_{22} \right].$$

V našem případě uvažujeme $X_2 = I_{3,3}$ a

$$\Sigma_{22} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 \times 60)^2/206265^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5^2/6380^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0,349^2 \end{pmatrix}.$$

Z obrázku na str. 208 vyplývá pro parametr I. etapy Θ_1 a parametry II. etapy $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ podmínka $g(\Theta_1, \beta) = 0$, kde

$$g(\Theta_1, \beta) = \cos(\beta_2) \cos(\beta_1) + \sin(\beta_2) \sin(\beta_1) \cos(\beta_3) - \cos(\Theta_1).$$

Nyní použijeme Taylorův rozvoj — lineární verze podmínky $g(\Theta_1, \beta) = 0$ je $\mathbf{B}\delta\beta + C\delta\Theta_1 + a = 0$, kde $\mathbf{B} = \frac{\partial g(\Theta_1^0, \beta^0)}{\partial \beta'}$, $C = \frac{\partial g(\Theta_1^0, \beta^0)}{\partial \Theta_1}$, $a = g(\Theta_1^0, \beta^0)$ v přibližném bodě (Θ_1^0, β^0) . V našem případě $\mathbf{B} = (B_1, B_2, B_3)$, kde

$$B_1 = \frac{\partial g(\Theta_1^0, \beta^0)}{\partial \beta_1} = -\cos \beta_2^0 \sin \beta_1^0 + \sin \beta_2^0 \cos \beta_1^0 \cos \beta_3^0,$$

$$B_2 = \frac{\partial g(\Theta_1^0, \beta^0)}{\partial \beta_2} = -\sin \beta_2^0 \cos \beta_1^0 + \cos \beta_2^0 \sin \beta_1^0 \cos \beta_3^0,$$

$$B_3 = \frac{\partial g(\Theta_1^0, \beta^0)}{\partial \beta_3} = -\sin \beta_2^0 \sin \beta_1^0 \sin \beta_3^0,$$

$$C = \frac{\partial g(\Theta_1^0, \beta^0)}{\partial \Theta_1} = \sin \Theta_1^0,$$

$$a = g(\Theta_1^0, \beta^0) = \cos(\beta_2^0) \cos(\beta_1^0) + \sin(\beta_2^0) \sin(\beta_1^0) \cos(\beta_3^0) - \cos(\Theta_1^0).$$

Z přibližných (měřených) hodnot $\Theta_1^0 = \frac{5 \times 60 + 28}{206265}$, $\beta_1^0 = \frac{7 \times 60}{206265}$, $\beta_2^0 = 13/6380$ a ze zvolené odchylky $\beta_3^0 = 0,5236$ rad = 40° určíme uvedené matice a v našem linearizovaném modelu numericky vypočítáme podle věty 3.1 a věty 3.2

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} 2,0495 \cdot 10^{-3} \\ 2,0386 \cdot 10^{-3} \\ 8,0570 \cdot 10^{-1} \end{pmatrix},$$

$$\text{Var}(\hat{\beta}) = \begin{pmatrix} 8,2805 \cdot 10^{-8} & -1,3212 \cdot 10^{-10} & -1,4633 \cdot 10^{-5} \\ -1,3212 \cdot 10^{-10} & 6,1322 \cdot 10^{-9} & -1,0677 \cdot 10^{-6} \\ -1,4633 \cdot 10^{-5} & -1,0677 \cdot 10^{-6} & 3,6155 \cdot 10^{-3} \end{pmatrix}.$$

Zeměpisná šířka bodu P je $90^\circ - \hat{\beta}_1 = 90^\circ - \frac{0,0020495 \times 180}{\pi} = 89^\circ 52' 57''$, odhad ujeté vzdálenosti $\hat{\beta}_2 = 0,0020386 \cdot 6380 = 13,006$ km, odhad odchylky od jižního směru je $\hat{\beta}_3 = \frac{0,80570 \times 180}{\pi} = 46^\circ 09' 47''$.

V tabulce použijeme označení $\hat{\sigma}_1 = \sqrt{\text{Var}(\hat{\beta})_{1,1}}$, $\hat{\sigma}_2 = \sqrt{\text{Var}(\hat{\beta})_{2,2}}$,

$$\hat{\sigma}_3 = \sqrt{\text{Var}(\hat{\beta})_{3,3}}, \Delta_1 = \hat{\beta}_1 - \beta_1^0, \Delta_2 = \hat{\beta}_2 - \beta_2^0, \Delta_3 = \hat{\beta}_3 - \beta_3^0.$$

Získané odhady a jejich přesnost můžeme srovnat s hodnotami použitými pro výpočet: $\beta_1^0 = 7'$, $\beta_2^0 = 13$ km, $\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta})_{1,1}} = 1,0'$, $\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta})_{2,2}} = 0,5$ km, $\sqrt{\text{Var}(\hat{\beta})_{3,3}} = 20^\circ$ (viz kovarianční matice Σ_{11} , Σ_{22}).

V tabulce je vidět, že při žádné volbě β_3^0 nedošlo při výpočtu odhadu $\hat{\beta}$ k velké korekci hodnoty β_1^0 (poloha bodu P) ani β_2^0 (ujetá vzdálenost). Mylná oslava dobytí jižního pólu je vysvětlena jen hodnotou $\hat{\beta}_3$ (odchylka od jižního směru pochodu).

β_3^0	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\sigma}_1$	$\hat{\sigma}_2$	$\hat{\sigma}_3$	Δ_1	Δ_2	Δ_3
20°	7'09''	13,020km	60°43'	1'	0,50km	3°26'	9''	0,020km	40°43'
25°	7'08''	13,017km	53°22'	1'	0,50km	3°07'	8''	0,017km	28°22'
30°	7'06''	13,014km	49°19'	1'	0,50km	3°04'	6''	0,014km	19°19'
35°	7'05''	13,011km	47°10'	1'	0,50km	3°13'	5''	0,011km	12°10'
40°	7'03''	13,006km	46°10'	1'	0,50km	3°27'	3''	0,006km	06°10'
44°	7'00''	13,002km	45°56'	1'	0,50km	3°41'	1''	0,002km	01°56'
45°	7'00''	13,001km	45°56'	1'	0,50km	3°45'	0''	0,001km	00°56'
46°	7'00''	13,000km	45°57'	1'	0,50km	3°49'	0''	0,000km	-00°03'
47°	6'59''	12,999km	46°00'	1'	0,50km	3°53'	-1''	-0,001km	-01°00'
48°	6'59''	12,998km	46°03'	1'	0,50km	4°57'	-1''	-0,002km	-01°57'
50°	6'58''	12,995km	46°13'	1'	0,50km	4°06'	-2''	-0,005km	-03°47'
55°	6'55''	12,988km	46°53'	1'	0,50km	4°29'	-5''	-0,012km	-08°07'

5 Závěr

Ze získaných výsledků je zřejmé, že není možné vysvětlit předčasnou oslavu dobytí jižního pólu jinak než obrovskou odchylkou od jižního směru pochodu v průběhu 15. prosince 1912. Při zvolených (ale smyšlených) kovariančních maticích popisujících možné chyby souřadnic bodu P a S_0 a chybu změřené délky pomocí měřícího kolečka na saních lze konstatovat, že odchylka od jižního směru nemohla být menší než cca 46°. Pokud nepřipustíme větší chyby při určení polohy z poledne 15. prosince — je nepochybné, že důvodem předčasné oslavy byl špatný směr pochodu. To je i v souladu s Amundsenovou krátkou poznámkou, že se mírně odchýlili od jižního směru.

Reference

- [1] Houden H.H. (2001). *Útok na jižní pól*. KMa, Praha.
- [2] Kubáček L. (1988). *Two stage regression model*. Math Slovaca **38**, 383–393.
- [3] Kubáček L. (1993). *Two stage regression models with constraints*. Math. Slovaca **43**, 643–658.
- [4] Kubáček L., Kubáčková L. (2002). *Dvouetapové sítě s podmínkami typu I a II*. Sborník příspěvků a spolupracovníků k devadesátinám pana profesora Josefa Vykutíla. (Ed. D. Dušátko), Praha – Brno, Vojenský zeměpisný ústav Praha, 58–72.
- [5] Kubáček L., Marek J. (2005). *Partial optimum estimator in two stage regression model with constraints and a problem of equivalence*. Math. Slovaca **55**, 477–494.
- [6] Marek J. (2003). *Estimation in connecting measurements*. Acta Universitatis Palackianae Olomucensis, Fac. rer. nat., Mathematica **42**, 69–86.

Poděkování: Článek byl podpořen výzkumným záměrem MSM 6198959214.

Adresa: J. Marek, PŘF UP, KMAaAM, Tomkova 40, 779 00 Olomouc

E-mail: marek@inf.upol.cz

APPLICATION OF PERMUTATION PRINCIPLE IN MULTIPLE STRUCTURAL CHANGE TEST

Miriam Marušiaková

Keywords: Change point, permutation principle, F type test.

Abstract: We consider multiple linear regression models with structural changes. We describe F type tests for detection of changes, namely tests for the null hypothesis of no change against the alternative with k changes. Approximations to the corresponding critical values are usually obtained through the limit distribution of the test statistic under the null hypothesis. Here we propose another possibility - a method based on the application of the permutation principle. We present a number of simulation results and show that the permutation arguments provide satisfactory approximations to the critical values.

1 Introduction

In practical situations we often face a problem where a data sample cannot be well described by one relatively simple statistical model during the entire observational period. Various economic factors or human activities (e.g. deforestation, urbanisation) may cause that the relationships among the variables change over time. In this case some of the parameters of the statistical model are subject to shifts. Time moments where a change occurs are usually called change points.

The change point problem has attracted attention of many researchers in recent years. This topic offers interesting theoretical problems and has many applications in economics, meteorology, hydrology, environmental studies, biology and many other disciplines. The literature addressing the issue of multiple change points is rich. We mention e.g. [1], [3], [7], [10], [11], among many others.

In this work we consider the problem of testing for structural changes in multiple linear regression models. We deal with an F type test of no change versus k changes where k is arbitrary but fixed. We treat both known and unknown change points under the alternative hypothesis. Approximations to the corresponding critical values are usually derived from the limit distribution of the test statistic under the null hypothesis, see [3]. Here we explore another possibility how to obtain them - we use the approximations based on the application of the permutation principle. We present a number of simulation results and show that the permutation arguments provide satisfactory approximations to the critical values.

2 Model and assumptions

We consider the following linear regression model

$$y_t = \mathbf{z}'_t \boldsymbol{\delta}_j + e_t \quad t = t_{j-1} + 1, \dots, t_j \quad (1)$$

for the j -th segment, $j = 1, \dots, m+1$, where t_j , $j = 1, \dots, m$, are the change points. We adopt the convention $t_0 = 1$ and $t_{m+1} = n$. In this model, y_t is the observed dependent variable, \mathbf{z}_t ($q \times 1$) the vector of regressors, $\boldsymbol{\delta}_j$ is the corresponding vector of regression coefficients in the j -th segment and e_t is the error at time t .

The change points t_j , $j = 1, \dots, m$, are in practice mostly unknown. The purpose is to estimate them together with the regression coefficients $\boldsymbol{\delta}_j$, $j = 1, \dots, m+1$, given the observations (y_t, \mathbf{z}_t) , $t = 1, \dots, n$. We do not impose any continuity constraint on the segmented regression model and so the change points are supposed to coincide with the observational times. The number of changes m is also treated as unknown and has to be estimated.

The regressors may be fixed or random in repeated samples. Since these variables are often not perfectly controlled in economics, we will assume the random design in this work. Non-random regressors (the fixed design) are covered by the theory as well.

We impose the following assumptions on the errors, regressors and change points:

Assumption 2.1. *The errors are independent and identically distributed (hereafter i.i.d.) with zero mean, nonzero finite variance σ^2 and finite moment $E|e_t|^{2+\Delta}$, with some $\Delta > 0$, $t = 1, \dots, n$.*

Assumption 2.2. *The errors e_t are independent of the regressors \mathbf{z}_s for all t and s .*

Assumption 2.3. *The regressors \mathbf{z}_t , $t = 1, \dots, n$ are nontrending, i.e.*

$$\frac{\mathbf{C}_{(t_{j-1}+1, t_j)}}{t_j - t_{j-1}} \xrightarrow{P} \mathbf{C} > 0 \quad \text{as } t_j - t_{j-1} \rightarrow \infty, \quad \text{for each } j = 1, \dots, m+1,$$

where $\mathbf{C}_{(i,j)} = \sum_{t=i}^j \mathbf{z}_t \mathbf{z}'_t$, $1 \leq i < j \leq n$, the letter P means convergence in probability and \mathbf{C} is a finite positive definite matrix.

Assumption 2.4.

$$t_j = [n\lambda_j], \quad 0 = \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_{m+1} = 1, \quad \text{for each } j = 1, \dots, m,$$

where $[x]$ is the integer part of x .

Assumption 2.1 does not allow correlated errors or heteroscedasticity in the model. For simplicity we also assume independence of errors and regressors (Assumption 2.2). Assumption 2.3 is satisfied, e.g., by i.i.d. regressors

having a positive definite variance matrix. It rules out the presence of trending regressors, e.g., $z_t = t$. Note, that the limit matrix \mathbf{C} in Assumption 2.3 is the same for all indices j . Assumption 2.4 is needed for the asymptotic purposes. It assumes the change points are asymptotically distinct.

The estimation of the regression coefficients is based on the least squares (*LS*) principle. We assume the distance between the change points is at least h , where the quantity h has to be chosen such that $h \geq q$. For this purpose we define a set of partitions

$$T_h = \{(t_1, \dots, t_m) : t_{j+1} - t_j \geq h, \forall j = 0, \dots, m, t_0 = 1, t_{m+1} = n\}. \quad (2)$$

For each such m -partition (t_1, \dots, t_m) the associated *LS* estimates of the regression parameters $\boldsymbol{\delta}_j$ are obtained by minimising the sum of squared residuals (hereafter *SSR*) $\sum_{j=1}^{m+1} \sum_{t=t_{j-1}+1}^{t_j} (y_t - \mathbf{z}'_t \boldsymbol{\delta}_j)^2$. We denote the minimum of this sum by $S_n(t_1, \dots, t_m)$ and the resulting *LS* estimates as $\hat{\boldsymbol{\delta}}_j(t_1, \dots, t_m)$, $j = 1, \dots, m + 1$. The estimated change points $(\hat{t}_1, \dots, \hat{t}_m)$ are such that $(\hat{t}_1, \dots, \hat{t}_m) = \arg \min_{t_1, \dots, t_m} S_n(t_1, \dots, t_m)$, where the minimisation is taken over all m -partitions from (2). We find the estimates of $\boldsymbol{\delta}_j$ as the *LS* estimates $\hat{\boldsymbol{\delta}}_j \equiv \hat{\boldsymbol{\delta}}_j(\hat{t}_1, \dots, \hat{t}_m)$, $j = 1, \dots, m + 1$, associated with the best partition.

3 F type test for multiple changes

We introduce a test that helps us to decide whether structural changes in linear regression occurred or not. The test is based on an F type test statistic for the null hypothesis of no change ($H_0 : m = 0$) against k changes ($H_A : m = k$) where k is considered to be some fixed number. In Subsection 3.1 we assume known change points, whereas in Subsection 3.2 they are unknown.

3.1 Test with known change points

We assume that the change points t_1, \dots, t_k are known under the alternative hypothesis and satisfy Assumption 2.4 for $m = k$. The *F* type test statistic is then defined as

$$F_n(k; q) \equiv F_n(\lambda_1, \dots, \lambda_k; q) = \frac{SSR_0 - SSR_k}{kq \hat{\sigma}_k^2}, \quad (3)$$

where $SSR_0 = \sum_{t=1}^n \hat{e}_t^2$, $SSR_k = S_n(t_1, \dots, t_k)$ are the minimal *SSR* under H_0 , H_A , respectively,

$$\hat{e}_t = y_t - \mathbf{z}'_t \hat{\boldsymbol{\delta}}, \quad t = 1, \dots, n, \quad (4)$$

are the residuals, $\hat{\boldsymbol{\delta}} = \mathbf{C}_{(1,n)}^{-1} \sum_{t=1}^n \mathbf{z}_t y_t$ is the *LS* estimator of $\boldsymbol{\delta}$ in the null hypothesis model and $\hat{\sigma}_k^2 = SSR_k / (n - (k + 1)q)$ is a consistent estimator of the error variance σ^2 under H_A and H_0 (see Appendix in [3] or proof of

Lemma 3 in [14] for a location model). Note that SSR_k can also be written as

$$SSR_k = \sum_{j=1}^{k+1} \sum_{t=t_{j-1}+1}^{t_j} \left(\hat{\epsilon}_t - \mathbf{z}'_t \mathbf{C}_{(t_{j-1}+1, t_j)}^{-1} \sum_{t=t_{j-1}+1}^{t_j} \mathbf{z}_t \hat{\epsilon}_t \right)^2,$$

which we will need in the following section. There are $(k+1)q$ unknown regression parameters in the model under H_A and q parameters under H_0 . A large value of the test statistic (3) indicates that the null hypothesis of no change is violated. The limit distribution of (3) under H_0 is formulated in [12], considering Assumptions 2.1-2.4.

3.2 Test with unknown change points

Now we assume the change points t_1, \dots, t_k are unknown. The sup F type test statistic is defined as

$$\sup F_n^\varepsilon(k; q) \equiv F_n(\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_k; q) \quad (5)$$

where $\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_k$ minimise the global SSR under H_A and $\hat{\lambda}_j = \hat{t}_j/n$, $j = 1, \dots, k+1$. Quantity ε is a small positive number and $\varepsilon = h/n$, where h is the minimal possible length of a segment.

The limit distribution of the test statistic (5) under H_0 is specified in Proposition 6 of [3] under quite general assumptions on errors and regressors. It depends on the values of k , q and on the quantity ε : as $\varepsilon \rightarrow 0$, the critical values of the test statistic diverge to infinity. Asymptotic critical values for $\varepsilon = 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$, for up to 9 changes ($1 \leq k \leq 9$) and for maximum of 10 changing regressors ($q \leq 10$) can be found in [3], [5].

4 Permutation test procedures

In this section we deal with approximations to the critical values of the studied test. The authors in [3] use approximations based on the limit distribution of the test statistic (5) under H_0 . Here we describe another possible approach based on the application of the permutation principle. In Subsection 4.1 we briefly explain the principle of the permutation test procedures. In Subsection 4.2 we conduct various simulation experiments.

4.1 Principle of permutation tests

We were inspired by [2], [8], [9], where the permutation arguments were used for the approximations to the critical values of maximum type statistics based on partial weighted sums of residuals. The authors showed that the approximations based on the permutation principle were better than the asymptotic critical values.

Here we apply the permutation principle to the F type test statistic. For simplicity we explain our approach considering the case with known change

points under H_A . Under H_0 the errors $e_t = y_t - \mathbf{z}'_t \boldsymbol{\delta}$ are i.i.d. random variables. Thus (e_1, \dots, e_n) has the same distribution as $(e_{R_1}, \dots, e_{R_n})$, where $\mathbf{R} = (R_1, \dots, R_n)$ is a random permutation of $(1, \dots, n)$. Since the errors e_t are unknown, we replace them by their estimators under H_0 , i.e. the residuals \hat{e}_t defined by (4). The main idea is to permute randomly the residuals and apply them repeatedly when calculating $F_n(k; q)$, where we replace \hat{e}_t by \hat{e}_{R_t} . The permutational version of $F_n(k; q)$ has the form

$$F_n(k; q; \mathbf{R}) = \frac{SSR_0(\mathbf{R}) - SSR_k(\mathbf{R})}{kq \hat{\sigma}_k^2(\mathbf{R})}$$

with $SSR_k(\mathbf{R}) = \sum_{j=1}^{k+1} \sum_{t=t_{j-1}+1}^{t_j} \left(\hat{e}_{R_t} - \mathbf{z}'_t \mathbf{C}_{(t_{j-1}+1, t_j)}^{-1} \sum_{t=t_{j-1}+1}^{t_j} \mathbf{z}_t \hat{e}_{R_t} \right)^2$, $SSR_0(\mathbf{R}) = \sum_{t=1}^n \hat{e}_{R_t}^2 = SSR_0$ and $\hat{\sigma}_k^2(\mathbf{R}) = SSR_k(\mathbf{R}) / (n - (k + 1)q)$. Notice that under H_0 we also have

$$SSR_k = \sum_{j=1}^{k+1} \sum_{t=t_{j-1}+1}^{t_j} \left(e_t - \mathbf{z}'_t \mathbf{C}_{(t_{j-1}+1, t_j)}^{-1} \sum_{t=t_{j-1}+1}^{t_j} \mathbf{z}_t e_t \right)^2.$$

The residuals \hat{e}_t depend on the original observations y_t . We study the conditional distribution of $F_n(k; q; \mathbf{R})$, given y_1, \dots, y_n . Its exact form is known because the distribution of random permutations \mathbf{R} is known. However, it is computationally demanding to compute $F_n(k; q; \mathbf{r})$ for all $n!$ permutations \mathbf{r} . We independently and randomly select N permutations where $N \ll n!$ is a reasonably large number to get satisfactory approximations. We obtain the empirical distribution of $F_n(k; q; \mathbf{R})$ and compute its corresponding empirical quantiles which can serve as the approximations to the critical values of the test $F_n(k; q)$, cf (3), as we will see later.

Let the observations y_t , $t = 1, \dots, n$, follow the model (1) with $m \geq 0$ changes. Under Assumptions 2.1-2.4 and the additional assumption $z_{t1} \equiv 1$ for all t , the conditional limit distribution of $F_n(k; q; \mathbf{R})$, given y_1, \dots, y_n , coincides with the limit distribution of the test statistic $F_n(k; q)$ under the null hypothesis (the proof is sketched in [12]). Therefore the quantiles corresponding to the empirical conditional distribution of $F_n(k; q; \mathbf{R})$, given \mathbf{y} , can be good approximations to the critical values corresponding to the test based on the statistic $F_n(k; q)$.

4.2 Simulated critical values

Here we conduct various simulation experiments and apply the permutation arguments to the test statistic $\sup F_n^\varepsilon(k; q)$, cf (5), assuming unknown change points under H_A . We want to illustrate on the finite sample that the approximations to the critical values obtained through the permutation principle are quite stable whether the data follow the null hypothesis or the alternatives. We compare the empirical critical values with the asymptotic ones calculated in [3], [5].

We denote the permutational version of the test statistic $\sup F_n^\varepsilon(k; q)$ by $\sup F_n^\varepsilon(k; q; \mathbf{R})$. In our simulation experiments we used the parameter $\varepsilon = 0.15$ which is also the default value in the function `breakpoints` in the environment `R`, see [15].

We generate data from the model (1) considering

- sample size $n = 120$;
- i.i.d. errors with normal or Laplace distribution with variance equal to one;
- $q = 2$; $\mathbf{z}_t = (z_{t1}, z_{t2})$, where $z_{t1} = 1$, $t = 1, \dots, n$ and regressors z_{t2} are generated from the normal distribution with mean equal to one and standard deviation equal to 2;
- up to 2 change points ($m = 0, 1, 2$) with timing $t_j = j \frac{n}{m+1}$;
- regression coefficients $\boldsymbol{\delta}'_1 = (0, 1)$; all considered values of $\boldsymbol{\delta}_2, \boldsymbol{\delta}_3$ can be seen in Table 1.

The value of the regression coefficients in the first segment is always $\boldsymbol{\delta}'_1 = (0, 1)$. In the second and third segment either the value of the intercept or the slope or both may change. We consider models with no change ($\boldsymbol{\delta}_1 = \boldsymbol{\delta}_2 = \boldsymbol{\delta}_3$) or changes of sizes 0.5 and 1. Changes of greater size than 1 are easy to detect and there is no need to test whether they have occurred or not.

We proceed as follows. First we generate n independent errors e_t and regressors z_{t2} . For particular values of the coefficients $\boldsymbol{\delta}_j$, $j = 1, \dots, m + 1$, we evaluate y_t . Having y_t and \mathbf{z}_t we calculate the residuals \hat{e}_t , cf (4), from the null hypothesis model. We apply the permutation principle to these residuals: we independently generate $N = 10\,000$ random permutations $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N$ and calculate $\sup F_n^\varepsilon(k; q; \mathbf{R}_1), \dots, \sup F_n^\varepsilon(k; q; \mathbf{R}_N)$. We obtain the empirical distribution of $\sup F_n^\varepsilon(k; q; \mathbf{R})$ and compute its corresponding empirical quantiles.

In Table 1 we present our simulation results. The table shows approximations to the critical values of the test of no change versus $k = 2$ changes. We obtained quite satisfactory results: the 90 %, 95 % and 99 % empirical quantiles calculated from samples with $m = 1, 2$ changes are similar to those which were computed from samples following the null hypothesis ($m = 0$). The values are also close to the asymptotic critical values of the test $\sup F_n^\varepsilon(k; q)$ calculated in [3], [5].

Conclusion

In this work we studied the F type test of no change against k changes where k was arbitrary but fixed. We calculated approximations to the critical values of the considered test using procedures based on the permutation principle. The simulation results were satisfactory and the obtained approximations were close to the asymptotic critical values calculated in [3], [5].

m	δ'_1	δ'_2	δ'_3	Normal errors			Laplace errors		
				0.10	0.05	0.01	0.10	0.05	0.01
0	(0,1)	(0,1)	(0,1)	8.49	9.61	12.11	8.43	9.61	12.67
1	(0,1)	($\frac{1}{2}$,1)	($\frac{1}{2}$,1)	8.53	9.77	12.24	8.71	9.94	12.60
1	(0,1)	(1,1)	(1,1)	8.47	9.68	12.33	8.44	9.73	12.27
1	(0,1)	(0, $\frac{3}{2}$)	(0, $\frac{3}{2}$)	8.47	9.68	12.25	8.69	9.86	12.62
1	(0,1)	(0,2)	(0,2)	8.59	9.79	12.46	8.48	9.68	12.43
1	(0,1)	($\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$)	($\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$)	8.44	9.68	12.40	8.30	9.44	11.86
1	(0,1)	(1,2)	(1,2)	8.47	9.65	12.20	8.42	9.59	12.23
1	(0,1)	($\frac{1}{2}$,2)	($\frac{1}{2}$,2)	8.59	9.85	12.48	8.53	9.81	12.65
1	(0,1)	(1, $\frac{3}{2}$)	(1, $\frac{3}{2}$)	8.52	9.79	12.26	8.58	9.78	12.34
2	(0,1)	($\frac{1}{2}$,1)	(0,1)	8.53	9.78	12.57	8.76	10.16	13.33
2	(0,1)	(1,1)	(0,1)	8.50	9.57	11.86	8.69	9.97	12.71
2	(0,1)	($\frac{1}{2}$,1)	(1,1)	8.65	9.74	12.62	8.73	10.07	12.97
2	(0,1)	(1,1)	(2,1)	8.47	9.73	12.09	8.62	9.73	12.44
2	(0,1)	(-1,1)	(- $\frac{1}{2}$,1)	8.45	9.61	12.14	8.67	9.89	12.75
2	(0,1)	($\frac{1}{2}$,1)	(- $\frac{1}{2}$,1)	8.54	9.72	12.54	8.53	9.72	12.26
2	(0,1)	(0, $\frac{3}{2}$)	(0,1)	8.60	9.69	12.21	8.75	10.15	13.22
2	(0,1)	(0,2)	(0,1)	8.56	9.66	12.42	8.66	9.94	12.56
2	(0,1)	(0, $\frac{3}{2}$)	(0,2)	8.49	9.63	12.20	8.58	9.82	12.57
2	(0,1)	(0,2)	(0,3)	8.60	9.79	12.67	8.56	9.76	12.29
2	(0,1)	(0, $\frac{1}{2}$)	(0,1)	8.45	9.66	12.04	8.59	9.89	12.83
2	(0,1)	(0, $\frac{1}{2}$)	(0,- $\frac{1}{2}$)	8.58	9.78	12.40	8.58	9.81	12.50
2	(0,1)	($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$)	(0,1)	8.59	9.80	12.44	8.63	9.86	12.51
2	(0,1)	(1,2)	(0,1)	8.57	9.75	12.21	8.64	9.93	12.34
2	(0,1)	($\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$)	(1,2)	8.55	9.70	12.10	8.54	9.74	12.28
2	(0,1)	(1, $\frac{3}{2}$)	(2,2)	8.47	9.60	12.33	8.54	9.82	12.67
2	(0,1)	($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$)	(1,1)	8.47	9.62	12.29	8.56	9.72	12.32
2	(0,1)	(1, $\frac{3}{2}$)	(1,2)	8.60	9.70	12.54	8.48	9.74	12.31
2	(0,1)	(1, $\frac{1}{2}$)	($\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$)	8.46	9.53	12.00	8.46	9.65	12.10
2	(0,1)	(-1,1)	(- $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$)	8.47	9.59	11.96	8.71	10.01	13.01
BP ACV				8.63	9.75	12.15	8.63	9.75	12.15

Table 1: Approximations to critical values of the test $\sup F_n^\varepsilon(k; q)$ for $k = 2$, $q = 2$, $\varepsilon = 0.15$. The entries are quantiles x such that $P(\sup F_n^\varepsilon(k; q) \leq x/q) = 1 - \alpha$ ($\alpha = 0.10, 0.05, 0.01$). Below are the asymptotic critical values calculated in [3].

Reference

- [1] Antoch J., Hušková M. (1998). *Estimators of changes*. Asymptotics, Nonparametrics, and Time Series **158**, Dekker, New York, 533–577.
- [2] Antoch J., Hušková M. (2001). *Permutation tests in change point analysis*. Statistics and Probability Letters **53**, 37–46.
- [3] Bai J., Perron P. (1998). *Estimating and testing linear models with multiple structural changes*. Econometrica **66**, 47–78.
- [4] Bai J., Perron P. (2003). *Computation and analysis of multiple structural change models*. Journal of Applied Econometrics **18**, 1–22.
- [5] Bai J., Perron P. (2003). *Critical values for multiple structural change tests*. The Econometrics Journal **6**, 72–78.
- [6] Bai J., Perron P. (2004). *Multiple structural change models: a simulation analysis*. Submitted to Econometric Essays.
- [7] Chen J., Gupta A.K. (2000). *Parametric statistical change point analysis*. Birkhäuser, Boston.
- [8] Hušková M. (2004). *Permutation principle and bootstrap in change point analysis*. Asymptotic Methods in Stochastics **44**, 273–291.
- [9] Hušková M., Antoch J. (2003). *Detection of structural changes in regression*. Tatra Mountains Mathematical Publications **26**, 201–216.
- [10] Kim H.-J., Fay M.P., Feuer E.J., Midthune D.N. (2000). *Permutation tests for joinpoint regression with applications to cancer rates*. Statistics in Medicine **19**, 335–351.
- [11] Liu J., Wu S., Zidek J.V. (1997). *On segmented multivariate regression*. Statistica Sinica **7**, 497–525.
- [12] Marušiaková M. (2005). *Vícefázová regrese (Multiphase regression)*. Master's thesis, Charles University, Prague.
- [13] R Development Core Team (2005). *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, ISBN 3-900051-07-0, URL <http://www.R-project.org>.
- [14] Yao Y.-Ch. (1988). *Estimating the number of change-points via Schwarz' criterion*. Statistics & Probability Letters **6**, 181–189.
- [15] Zeileis A., Leisch F., Hornik K., Kleiber C. (2002). *Strucchange: An R package for testing for structural change in linear regression models*. Journal of Statistical Software **7**, 1–38.

Acknowledgement: This work was partially supported by GAČR 201/06/0186 and 201/05/H007. The author would like to thank Prof. Marie Hušková for valuable comments which helped to improve the manuscript.

Address: M. Marušiaková, Faculty of Mathematics and Physics, Department of Probability and Mathematical Statistics, Sokolovská 83, 186 75 Prague 8 – Karlín

E-mail: marusiak@csmat.karlin.mff.cuni.cz

ZPRACOVÁNÍ A ANALÝZA OBZVLÁŠTĚ VELKÝCH REÁLNÝCH DAT

Petr Máša

Klíčová slova: Rozsáhlá data, aplikace analýzy dat, příprava dat.

Abstrakt: Tento příspěvek se zabývá problémy při zpracování a analýze velkých dat v praxi. Uvádí typické aplikace analýzy dat v komerčních firmách, jejich základní východiska a jednotlivé fáze projektu analýzy dat od získání dat, přes jejich přípravu a vlastní analýzu až po využití výsledků.

1 Úvod

Proces analýzy dat zahrnuje široké spektrum činností. Ukazuje se, že drtivou většinu času při analýze dat zabírá především příprava dat (odhaduje se na 60-90% času). Tyto činnosti se mohou zdát jako méně významné, avšak zpravidla nejsou tak triviální a bez nich není možné analýzu provádět. Řeší se zejména problémy se získáním dat, integritou a kvalitou dat. Tím se stává každá analýza náročnější na zdroje IT i analytiky. Proto je třeba na začátku vyhodnotit, zdali přínosy dané analýzy alespoň pokryjí náklady, tedy zdali má smysl tuto analýzu provádět. Celou analýzu bychom pak měli provádět s cílem co nejlépe splnit původní cíl analýzy a zajistit co nejvyšší přínosy. Proto bychom měli nejprve pečlivě určit, co je řešený problém. To není triviální úloha. Vlastní příprava dat se pak zpravidla realizuje v databázi pomocí databázového jazyka SQL, případně jiného (velmi silného) nástroje na přípravu dat. Samotná analýza dat také není jednoduchá. Je potřeba zvolit vhodný software, který by byl schopen naše (často velmi rozsáhlá) data rozumně zpracovat, tzn. data ve vhodné formě načíst, připravit pro statistickou proceduru a spustit analýzu na těchto datech. To nás limituje ve výběru metod, které použijeme. Také je třeba vyrovnat se s předpoklady statistických metod při jejich použití. V praxi je z časových důvodů obtížné zafixovat data a řešit problém neúměrně dlouhou dobu. Přínosy řešení s časem obvykle velmi rychle klesají. Samozřejmě záleží na řešené úloze.

Pojďme se blíže podívat na zákaznický orientovanou firmu. Ta se zpravidla nachází v prostředí, kde se odehrává velmi tvrdý konkurenční boj. Firmy mají data, ve kterých je obsažena obrovská hodnota. Identifikace zajímavých a zejména použitelných vztahů v datech pak vede ke konkurenční výhodě. Naopak, nevyužití hodnoty z dat může znamenat ztrátu klíčových nebo profitabilních zákazníků. Typické oblasti podnikání, kde se používá pokročilá analýza dat v České republice, jsou banky, pojišťovny a další finanční instituce, telekomunikační operátoři a obchodní řetězce.

2 Analýza dat v zákaznický orientovaných firmách

Analýza dat v obrovských firmách není jednoduchá. Data jsou uložena v různých systémech a jejich spojení bývá obtížné. Navíc, některé údaje jsou v různých systémech duplicitně (tzn. tentýž údaj se uchovává na dvou místech nezávisle, například adresa) a tyto údaje se mohou v různých systémech rozcházet. Proto je důležitá integrace dat na jedno místo a určení té „správné hodnoty“. Tím správným místem, kde by měla vyčištěná a opravená data být, je datový sklad. Pod pojmem datový sklad si však nesmíme představovat sklad DVDček s daty, ale jednu obrovskou databázi, kde jsou k dispozici všechna klíčová data o firmě.

Data jsou do datového skladu plněna pravidelně, uživatelé tedy vědí, jaká data mají kdy k dispozici. Dalším důvodem pro zavedení datových skladů je „odlehčení“ zátěži provozních systémů (někdy též primárních systémů). Pokud bychom například dělali analýzu dat používání platebních karet přímo nad provozním systémem, mohlo by se stát, že ho naše analýza zahltí na několik dní a díky tomu nebudou fungovat transakce platebními kartami.

Data se do datového skladu přenášejí v předem definované okamžiky (např. jednou měsíčně) a analytici pak získávají data z datového skladu, tedy zátěž provozních systémů je „pod kontrolou“.

Datový sklad však obsahuje obrovské množství dat o klíčových oblastech procesů firmy. Převod dat do formy vhodné pro jednu konkrétní analýzu je také velmi náročný krok. Získání dat pro analýzu je velmi náročné na zdroje – na čas lidí připravující data a na výkon strojů. Proto je nutné pečlivě promyslet, jakou analýzu dat dělat a jaký to bude mít pro firmu přínos (proč ji dělat). Jedině tak lze obhájit „investice“ do této analýzy (např. ve formě platů analytiků a databázových specialistů, jejich zázemí a umoření nákladů na hardware).

V následujících odstavcích jsou pro ilustraci uvedeny některé typické úlohy z výše zmíněných oblastí podnikání.

Podívejme se nejprve na banky a finanční instituce. Typickou aplikací analýzy dat je **kreditní skóring**. Tento pojem znamená predikční úlohu, která pro každého klienta či žadatele o půjčku odhaduje, zdali daný klient půjčku splatí či nikoliv. Tato úloha je velmi specifická, neboť v historických datech nemáme úplnou informaci o splácení. Některým lidem totiž banka zamítla žádost o půjčku. Další úlohou jsou tzv. **propensity to buy** modely. Tyto modely predikují, zdali bude mít klient zájem koupit daný produkt. Obvyklou úlohou je také **analýza zneužití platebních karet**. To je klasifikační úloha, která pro každou transakci odhaduje, zdali se jedná o podvod (zneužití karty). Často řešenou úlohou je též „**praní špinavých peněz**“. Tato úloha odhaduje, zdali se daný klient nepodílí na praní špinavých peněz.

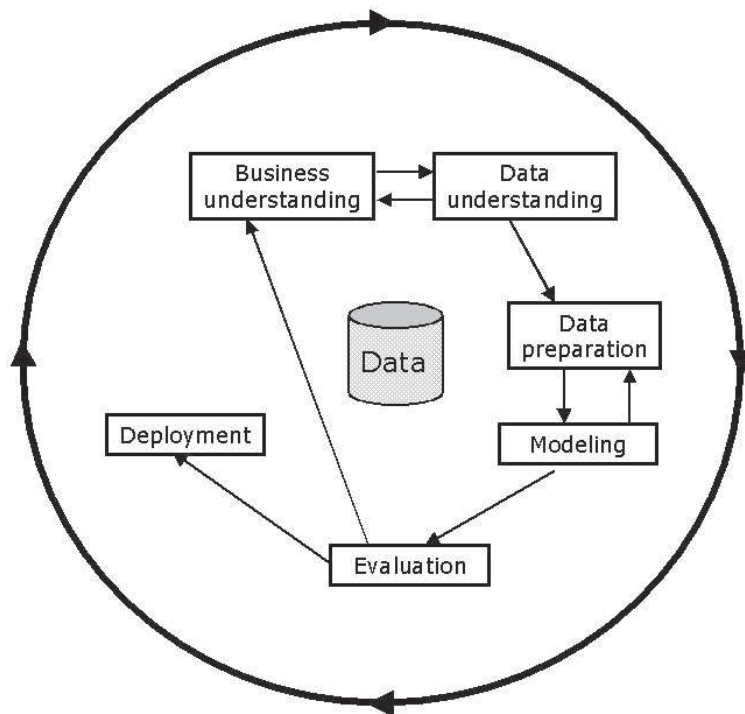
Dalším odvětvím, kterým se zde budeme zabývat, jsou pojišťovny. Jednou z klíčových úloh jsou tzv. **propensity to buy** modely, které byly již zmíněny v aplikacích v bankách. Jedná se opět o odhad zájmu o koupi daného produktu. Další úlohou je **analýza podvodů**. Zde se pokoušíme pro

každou pojistnou událost odhadnout, zdali se jedná o podvod či nikoliv. Důležitou analýzou je také **analýza rizikivosti smluv**. Úlohou je odhad rizika pro každou smlouvu z důvodu řízení pojistných rezerv. Strategickou úlohou v pojišťovnictví je **nastavení sazeb**. Při této úloze se dle jistých proměnných na smlouvě odhaduje škodovost a na základě toho se stanovuje sazba pojistného.

Podívejme se na typické úlohy řešené v odvětví telekomunikačních operátorů. Typickou úlohou je **analýza odchodu zákazníků**. Zpravidla se používá predikční model, zdali zákazník odejde či nikoliv. Další častou úlohou jsou **propensity to buy** modely, které opět odhadují zájem o koupi daného produktu. Obvyklou úlohou je také **behaviorální segmentace**. Z technického pohledu se jedná o shlukování. Hlavním cílem je najít obchodně zajímavé shluky klientů. Strategickou úlohou v telekomunikacích je **migrace**. To je převod klientů z předplacených karet na paušál.

3 Projekt analýzy dat

Analýzu dat můžeme chápat jako projekt. Ten bude mít několik fází. Zde budeme vycházet z metodiky CRISP-DM (CRoss Industry Standard Process for Data Mining,[2]), která je dostatečně obecná a velmi rozšířená.



Obrázek 1: Fáze procesu CRISP-DM ([2]).

Na obrázku 1 je znázorněn celý proces CRISP-DM. Pojdme si rozebrat jednotlivé kroky.

Obchodní porozumění (Business understanding) – v tomto kroku bychom měli porozumět obchodní situaci, do které se má analýza dat aplikovat. Cílem je pochopit obchodní situaci a nasměřovat analýzu tak, aby její výsledek pomohl řešit nějaký konkrétní problém.

Porozumění datům (Data understanding) – zde bychom měli zmapovat dostupné datové zdroje, pochopit, co jednotlivé položky znamenají a z jakých zdrojů je budeme získávat.

Příprava dat (Data preparation) – příprava dat pro analýzu (modelování) je velmi důležitým krokem; tento krok je často iterován, neboť ve vlastní analýze pak objevíme některé zajímavé vztahy a položíme si otázky a díky nim potřebujeme odvodit další data.

Modelování (Modelling) – vlastní vytvoření modelu.

Nasazení (Deployment) – využití výsledků z celé analýzy v praxi, a můžeme též ovlivnit procesy, které se toho týkají.

Vyhodnocení (Evaluation) – vyhodnocení či pravidelné vyhodnocování výsledného modelu.

4 Data pro analýzy

Při zpracování dat se řeší mnoho problémů. Ukazuje se, že mnohé otázky, které vypadají na první pohled triviálně, vlastně tak jednoduché nejsou. Položme si například otázku, co je to počet zákazníků a kdo je to zákazník (a se kterými zákazníky můžeme pracovat a se kterými ne). Vezměme příklad banky. První definice může být, že zákazníkem je každý subjekt, který má u banky veden alespoň jeden produkt. Tato definice vypadá na první pohled zajímavě, ale vynechali jsme klienty, kteří využívají pouze směnárnu nebo využívají svou platební kartu v naší síti bankomatů či u naší sítě obchodníků. Otázkou je, zdali tyto klienty chceme do analýz také zahrnout. Druhý problém je technický – jakým způsobem zjistit, že např. daný účet a spotřební úvěr patří témuž klientovi? Ne vždy se nám podaří spojit údaje o rodném čísle či IČO z obou účtů (a to jak díky překlepům, tak díky tomu, že k založení účtu někdy stačí např. cestovní pas). A když už s nějakým procentem chyb tyto údaje spojíme, můžeme narazit na další problémy, např. k firemním účtům mohou existovat i stovky firemních platebních karet a tohoto zákazníka bereme jako jednu jednotku. Otázkou je, zdali tedy brát velkého firemního zákazníka jako jednu jednotku či se ho snažit nějakým způsobem dělit (a jakým). Nebo zdali tyto zákazníky úplně vyloučit?

Zajímavou otázkou je také čištění adres. V mnoha zemích, a to i včetně České republiky, existují seznamy tzv. adresních bodů. Lze tedy ověřit, zdali zákazníkem uvedená adresa existuje či je zapsaná bez chyby. Případné chyby je teoreticky možné opravit. Praktická realizace je ovšem o něco složitější –

tato úloha se zpravidla spojuje s úlohou „sjednocování“ klienta (tj. vyhodnocuje se, zdali se v různých systémech nejedná o téhož klienta), přičemž se využívá odhadnutá kvalita (chybovost) původně uvedených jmen a adres.

Při přípravě dat však nesmíme zapomínat ani na rozsah hodnot. Pokud máme např. políčko suma poplatků placených zákazníkem za poslední měsíc a jsme ujišťováni, že všechny poplatky jsou nezáporné, pak můžeme být při použití transformace $\log(1 + x)$ nemile překvapeni. Bližším zkoumáním pak můžeme zjistit, že záporné hodnoty v sumě poplatků jsou způsobeny např. tím, že zákazníkovi byla naúčtována minulý měsíc vyšší částka a protože už byl v době reklamace minulý měsíc účetně uzavřený, byl mu poplatek „vrácen“ následující měsíc a v datech se nám objevila záporná hodnota u poplatku.

Poznamenejme také, že pro analýzy je tedy nutné dobře znát význam jednotlivých proměnných. V obrovských společnostech s obrovskými daty a množstvím produktů a činností jsou však data natolik složitá, že není v silách jednoho člověka znát business význam všech datových položek.

Hlavním cílem by mělo být sledovat použití výsledků. Chyby při pochoopení logiky problému či následné aplikace mohou pokazit celou analýzu. Vezměme jako příklad, že chceme vytvořit predikční model odchodu zákazníků. V řeči dat chceme základě historických dat o chování zákazníka predikovat, zdali odejde či nikoliv. Představme si situaci, že si vezmeme všechna data až do měsíce m včetně a jako cílovou proměnnou zvolíme odchod zákazníka v měsíci $m + 1$. Dále vytvoříme model, otestujeme ho na jiných datech, než ze kterých se model učil, a nasadíme ho do praxe. V tomto postupu jsme však udělali jednu chybu. Představme si, že uvedený model bude fungovat dobře a rozhodneme se oslovit zákazníky s vysokým rizikem odchodu speciální akcí (např. cenové zvýhodnění). Počkáme tedy až budou k dispozici data za měsíc m . Ta budou připravena ve formě pro náš model v polovině měsíce $m + 1$. Dále zabere nějaký čas příprava kampaně a vlastní kampaň, kterou se klienti oslovují (nelze zavolat 30 000 klientům v jediný den). Pokud bude tato kampaň určena vedením firmy jako kampaň s velmi vysokou prioritou, můžeme zvládnout klienty oslovit od 20. do konce měsíce $m + 1$. Ale to už většina zákazníků ohrožených odchodem (i když správně predikovaných) odešla a to už je zpravidla pozdě na akci na záchranu zákazníků. My bychom měli zákazníka ohroženého odchodem oslovit pokud možno ještě před jeho odchodem – to je šance na jeho udržení mnohem vyšší než v situaci, kdy už odešel. Pro oslovení po jeho odchodu nemusíme používat predikční model – to nám stačí vyhodnotit z dat zákazníky, kteří odešli. Jaké je tedy možné řešení našeho problému? Řešení spočívá v zavedení tzv. predikční mezery. V praxi to znamená, že z dat o zákazníkovi do měsíce m včetně předpovídáme odchod v měsíci $m + 2$. Měsíc $m + 1$ bude sloužit jako predikční mezera, tedy čas určený k získání potřebných dat a k realizování potřebných akcí.

Dalším problémem může být definice odchodu. Pokud máme definován odchod zákazníka tím, že přestane využívat daný typ služeb, pak první defi-

nice, která nás může napadnout, je např. zákazník 3 měsíce za sebou nevyužíval danou službu. Tato definice je však chybná. Při jejím použití typicky získáme pravidla typu pokud zákazník nevyužívá službu už rok, pak ji nebude využívat další 3 měsíce. Je to však odchod? Odchod zákazníka bychom měli definovat jako událost, nikoliv jako stav. Možná definice odchodu je tedy zákazník v měsíci $m + 2$ alespoň jednou danou službu využije a v následujících 3 měsících ji nevyužije.

5 Výběr a použití statistických metod

Při volbě statistické metody jsme zpravidla limitováni softwarem, který máme k dispozici. V komerčních firmách není běžné, že by existovalo v jednom oddělení několik statistických balíků současně. Jen málokdy jsme v situaci, kdy můžeme volit statistický software. Je to zejména v okamžiku výběru SW do našeho oddělení. Při výběru softwaru hrají roli zejména cena a schopnost řešit pomocí tohoto SW úlohy, které očekáváme, že budeme během několika let řešit. Jako jedním z klíčových bodů pro volbu SW je schopnost a operativnost práce s velkými daty – tzn. zdali jsme schopni načíst velká data, odvozovat další proměnné, atd. a zejména kolik nám dá práce případná úprava již hotového postupu.

Pokud tedy máme daný statistický software, zbývá nám zvolit metodu. Při volbě metody bychom se měli zaměřit na vlastnosti a předpoklady této metody a v ideálním případě i znát chování dané metody, pokud nejsou splněny předpoklady. V praxi můžeme jen stěží očekávat, že budou splněny všechny předpoklady daných metod. O to opatrnější a obezřetnější musíme být při přípravě dat a při následné analýze. Pro praktickou úlohu též není z časových důvodů obvyklé, že by bylo možné data „dokonale“ připravit. Představme si situaci, že máme data o rozsahu 2000 proměnných – jak pečlivě jsme schopni analyzovat každou proměnnou zvlášť a jak pečlivě jsme schopni analyzovat vlastnosti těchto mnohorozměrných dat jako celku? Zde vyvstává otázka, kolik času by nám to zabralo a kdy by tedy bylo výsledné řešení hotové – a zdali by ještě bylo relevantní.

6 Závěr

Pro analýzu dat je nejdůležitější definovat její cíl a způsob použití výsledků. Při vlastní analýze je časově nejnáročnějším krokem příprava dat – a to jak z pohledu získávání a integrace dat z různých zdrojů, tak z pohledu přípravy dat pro konkrétní analýzu. Použitý statistický software by proto měl mít silnou podporu práce s daty. Celá analýza dat pak zahrnuje mnoho kroků, vlastní použití statistické metody je zpravidla jedním, nikoliv jediným krokem. Tento krok je již velice dobře zvládnutý, a to jak na poli statistických metod, tak jejich implementace, proto obvykle zabírá při celé analýze jen velmi málo času.

Reference

- [1] Berry M.J., Linoff G. (1997). *Data mining techniques*. Wiley.
- [2] Chapman P., Clinton J., Kerber R., Khabaza T., Reinartz T., Shearer C., Wirth R. (2000). CRISP-DM 1.0, www.crisp-dm.org.
- [3] Kimbal R. et al. (1998). *The data warehouse lifecycle toolkit*. John Wiley & Sons.
- [4] Parr-Rud O. (2000). *Data mining cookbook*. Wiley.

Adresa: P. Máša, Adastra, Benešovská 10, 101 00 Praha 10

E-mail: petr.masa@adastracorp.com

S-MAP AND PROBABILITY

Olga Nánásiová

Keywords: An orthomodular lattice, a state, a conditional state, an orthogonal projector.

Abstract: In this paper, we try to explain, why we need to study more general structure as Boolean algebra for describing two random events. Then we define the relevant functions as conditionality, independence etc. on the orthomodular lattice. In the last part we show some examples of such functions, and we show how we can describe causality on it.

1 Introduction

Let A be a random event and let $P(A)$ be its probability. Then $P(A) + P(A^c) = 1$, where A^c is complement to A in the set of all results of some experiment Ω . Indeed we say, that we have a probability space (Ω, \mathcal{S}, P) , where (Ω, \mathcal{S}) is a measurable space and P is a probability measure (σ -aditive function from $\mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$). Kolmogorov has defined for such model a conditional probability as a function which help to us describe the set of all situations, where we restrict the set Ω to an element $A \in \mathcal{S}$, such that $P(A) \neq 0$. As Kolmogorov has written in this paper, this function is really a connection among probability spaces $(\Omega \cap A, \mathcal{S} \cap A, P(\cdot|A))$, in the special case $A = \Omega$ we get the original probability space. The algebra \mathcal{S} has the following property

$$A = (A \cap B^c) \cup (A \cap B).$$

We can see, that an algebra \mathcal{S} is distributive. It means, that full information about a random events A , we could get if we will

observe A with together B ($A \cap B$)

”or” (\cup)

observe A together with B^c ($A \cap B^c$).

In the language of the quantum structure, we say that such random events are compatible or simultaneously measurable, too.

Let $A, B \in \mathcal{S}$ such that $P(A) \neq 0$ and $P(B) \neq 0$. We say that

A is independence of B if $P(A|B) = P(A)$.

It follows from distributivity, that

A is independence to B if and only if B is independence to A .

We can write this situation by the following way

$$P(A|B) = P(A) \text{ if and only if } P(B|A) = P(B).$$

Is it true this in the real live, in generally?

For example, let we have random events which be changing by time (result be time series) and let the following result of experiment be dependent on the previous result of experiment. Is it true, that the following result of experiment is also dependent on the previous result? It follows from this,

that it is impossible to study the causality (A is independence to B and B is dependence on A) on the one probability space. (We can define a causality, which is not such strong, indeed).

In 1933 von Neumann has suggested the other model (von Neumann algebra). In these days they are studied several algebraic structures, which can be use for describing noncompatible random event. How is possible to describe conditionality in this system? This problem has been studied by several authors. For the describing conditionality in our approach we use as a basic structure an orthomodular lattice (an OML), which is studied in many papers [1]-[8], [10]-[23]. For example, on an OML we can study causality. An OML is a Boolean algebra iff

$$a = (a \wedge b^\perp) \vee (a \wedge b).$$

Indeed, $a \geq (a \wedge b^\perp) \vee (a \wedge b)$ for $\forall a, b \in L$.

The equivalent notion to a random variable is an observable, in this approach. The greatest element in an OML will be denote as I and it will be the equivalent to Ω . The least element will be denote as O and it will be the equivalent to \emptyset . A random event $A \in \mathcal{S}$ will be represented by $a \in L$ and a^\perp will be equivalent to A^c .

Let L be an OML and let $x : \mathcal{B}(R) \rightarrow L$ be a homomorphism, where $\mathcal{B}(R)$ be a σ -algebra of Borel sets.

- $x(R) = I$;
- $x(\emptyset) = O$;
- $\forall A, B \in \mathcal{B}(R) \ x(A \cup B) = x(A) \vee x(B)$;
- $\forall A \in \mathcal{B}(R) \ x(A^c) = (x(A))^\perp$;

where \vee is a lattice operation supremum and \perp is the orthocomplement. Such homomorphism is called an observable on L . Let (Ω, \mathcal{S}, P) be a probability space. et $X : \Omega \rightarrow R$ be a random variable. Then

$$X^{-1} : \mathcal{B}(R) \rightarrow \mathcal{S}$$

$$X^{-1}(E) = \{\omega \in \Omega; \ X(\omega) \in E\}$$

is the homomorphism, too.

If we have two random variables from two probability spaces we can include them to one an OML as observables.

In this paper we try to explain, how is possible to define a conditional state and a joint distribution on an OML. And we introduce examples of such functions, too.

2 An orthomodular lattice and an s-map

Definition 2.1. [19] Let L be a nonempty set endowed with a partial ordering \leq . Let there exists the greatest element I and the smallest element O . Let there be operations supremum \vee , infimum \wedge (the lattice operations) and an map m defined as follows.

- i. for $\forall a, b \in L$ $a \vee b, a \wedge b \in L$;
- ii. for each $a \in L$ there $\exists! a^\perp \in L$, such that $(a^\perp)^\perp = a$ and $a \vee a^\perp = I$;
- iii. If $a, b \in L$ such that $a \leq b$, then $b^\perp \leq a^\perp$ and $b = a \vee (b \wedge a^\perp)$

Then L is said to be an orthomodular lattice (briefly an OML).

Let L an OML. Elements $a, b \in L$ will be called orthogonal ($a \perp b$) if $a \leq b^\perp$ and they will be called compatible ($a \leftrightarrow b$) if $a = (a \wedge b^\perp) \vee (a \wedge b)$.

Definition 2.2. [19] A map $m : L \rightarrow [0, 1]$, such that $m(O) = 0$, $m(I) = 1$ and $m(a \vee b) = m(a) + m(b)$ if $a \perp b$, is called a state on L .

Definition 2.3. Let L be an OML. A subset $L_O \subset L$ is called a conditional system (CS) in L if the following conditions hold:

- if $a, b \in L_O$, then $a \vee b \in L_O$;
- if $a, b \in L_O$ and $a \leq b$, then $a^\perp \wedge b \in L_O$.

Definition 2.4. [13] Let L be an OML and let L_O be a CS in L . Let $f : L \times L_O \rightarrow [0, 1]$. If the function f fulfills the following conditions:

- c1 for each $a \in L_O$ $f(\cdot, a)$ is a state on L ;
- c2 for each $f(a, a) = 1$;
- c3 if $a, b \in L_O$, where $a \perp b$, then

$$f(\cdot, a \vee b) = f(a, a \vee b)f(\cdot, a) + f(b, a \vee b)f(\cdot, b);$$

then it is called a conditional state.

If we have a definition of conditional state, then we can define a joint distribution, an independence for nonboolean elements, etc. We can see, that (c3) is nothing more, then the theorem for full probability.

Definition 2.5. [13] Let L be an OML and let f be a conditional state on it. Let $b \in L$ and $a, c \in L_O$ such that $f(c, a) = 1$. Then b is independent of a with respect to the state $f(\cdot, c)$ ($b \succ_{f(\cdot, c)}$) if $f(b, c) = f(b, a)$.

Definition 2.6. [15] Let L be an OML. The map $p : L \times L \rightarrow [0, 1]$ will be called an s-map if the following conditions hold:

s1 $p(I, I) = 1$;

s2 if $a \perp b$, then $p(a, b) = 0$;

s3 if $a \perp b$, then

$$p(a \vee b, \cdot) = p(a, \cdot) + p(b, \cdot)$$

$$p(\cdot, a \vee b) = p(\cdot, a) + p(\cdot, b).$$

We say that a s-map is noncommuting if there $\exists a, b \in L$, such that $p(a, b) \neq p(b, a)$. If for $\forall a, b \in L$ $p(a, b) = p(b, a)$, then we say that p is commuting. We can see, that the conditional state and the s-map have the similarly properties as in the classical probability space, instead of Bayesian theorem, because the s-map can be noncommuting. But for compatible elements we have the same situation, as in the classical theory. This has been studied in the following papers [12]-[17].

In the [15] has been shown that if p is a s-map and

$$L_O = \{b \in L; \quad p(b, b) \neq 0\},$$

then

$$f_p(a, b) = \frac{p(a, b)}{p(b, b)}$$

is a conditional state and conversely if $L_O = L - \{O\}$, then

$$p_f(a, b) = f(a, b)f(a, I)$$

is a s-map.

Let $\mathcal{B}(R)$ be a σ -algebra of Borel sets. A homomorphism $x : \mathcal{B}(R) \rightarrow L$ is called an observable on L . The set $R(x) = \{x(E); \quad E \in \mathcal{B}(R)\}$ is called a range of the observable x . It is clear that $R(x)$ is a Boolean algebra [Var]. The set $\sigma(x) = \cap\{E \in \mathcal{B}(R); \quad X(E) = 1\}$ is called a spectrum of an observable.

We call an observable x a finite if $\sigma(x)$ is a finite set. Let us denote \mathcal{O} the set of all finite observables on L .

Let $x, y \in \mathcal{O}$. Then a map $p(x, y : \mathcal{B}(R) \times \mathcal{B}(R) \rightarrow [0, 1]$, such that

$$p_{x,y}(E, F) = p(x(E), y(F))$$

is called a joint distribution for the observables x, y . Let us denote

$$p(x, y) = \sum_i \sum_j x_i y_j p(x(x_i), y(y_j)).$$

From analogy with the classical theory of probability we can define notions for example as covariance ($c(x, y)$) and correlation coefficient ($r(x, y)$) by the following way:

$$c(x, y) = p(x, y) - p(x, I)p(y, I)$$

$$r(x, y) = \frac{c(x, y)}{\sqrt{c(x, x)c(y, y)}}$$

In spite of the classical theory of probability in this case $c(x, y)$ is not equal to $c(y, x)$ in general [16].

3 Examples of an s-map and a conditional state

Example 3.1. Let L be a set of all orthogonal projectors on n -dimensional real vector space. It means, that $A \in L$ is a symmetric matrix, such that $AA = A$. The greatest element I is the identity matrix and the smallest element is the zero matrix O . It is well know fact, that this set can be organize as an orthomodular lattice. If $AB = BA$, then $A \leftrightarrow B$ and if $AB = BA = O$, then $A \perp B$. Moreover if $A \perp B$, then $A \vee B = A + B$. Let $L_O = L - \{O\}$. Then the function $f : L \times L_O \rightarrow [0, 1]$, such that

$$f(A, B) = \frac{\text{tr}(AB)}{\text{tr}(B)}$$

is the conditional state on L and

$$p(A, B) = \frac{\text{tr}(AB)}{n}$$

is the s-map on L . It is easy to see, that this s-map is commuting.

Example 3.2. Let L be defined as the Example 3.1 and let $n = 2$. It means, that

$$A = \begin{pmatrix} a^2 & ab \\ ab & b^2 \end{pmatrix},$$

where $a^2 + b^2 = 1$ and I, O . If we put $a = \cos^2(\alpha)$, then

$$A = \begin{pmatrix} \cos^2 \alpha & \cos \alpha \sin \alpha \\ \cos \alpha \sin \alpha & \sin^2 \alpha \end{pmatrix},$$

where $\alpha \in R$ ($A := a(\alpha)$). $\mathcal{B}_a = \{O, I, A, A^\perp = I - A\}$ is the Boolean sub-algebra of L . In this case

$$f(a, I) = \frac{1}{2}.$$

and

$$f(a(\alpha), b(\beta)) = \cos^2(\alpha - \beta).$$

Moreover, if $A, B \neq I$

$$f(A, B) = f(B, A) = f(A^\perp, B^\perp) = f(B^\perp, A^\perp),$$

$$f(A, B^\perp) = f(B^\perp, A) = f(A^\perp, B) = f(B, A^\perp).$$

What does it mean independence and dependence with respect to this conditional state? From the definition of independence we know, that $A \asymp_{f(\cdot, I)} B$ if $f(A, B) = f(A, I)$. If $A, B \neq I, O$, then $f(A, B) = \cos^2(\alpha - \beta)$. From this follows, that $A \asymp_{f(\cdot, I)} B$ if $\frac{1}{2} = \cos^2(\alpha - \beta)$.

In the end, we can conclude, that by using conditional states f or f_2 we get the same situation as in the classical probability space. But it was shown, that it is not true on an OML in generally.

Example 3.3. Let $L = \{I, O, a, a^\perp, b, b^\perp, c, c^\perp\}$ In this case L is the prime sum of three Boolean algebras, where a, b, c are atoms. Let s -map p be defined as follow

$$\begin{aligned} p(a, a) &= 0.20 & p(a, b) &= 0.06 & p(a, c) &= 0.08 \\ p(b, a) &= 0.10 & p(b, b) &= 0.30 & p(b, c) &= 0.12 \\ p(c, a) &= 0.10 & p(c, b) &= 0.20 & p(c, c) &= 0.40 \end{aligned}$$

It is easy to see, that p is s -map and we can compute the conditional state. Moreover

$$p(a, b) = p(a, a)p(b, b) \quad p(a, c) = p(a, a)p(c, c) \quad p(b, c) = p(b, b)p(c, c)$$

and

$$p(b, a) \neq p(a, a)p(b, b) \quad p(c, a) \neq p(a, a)p(c, c) \quad p(c, b) \neq p(b, b)p(c, c).$$

Let us denote $B_u = \{I, O, u, u^\perp\}$. The system L of Boolean algebras B_u ($u \neq I, O$) is causal system endowed with the s -map p or with the conditional state f . We can imagine influence among these Boolean algebras as follows

$$B_a \asymp_I B_b, \quad B_a \asymp_I B_c, \quad B_b \asymp_I B_c,$$

On the other hand, if we put $p_1(b, a) = p_1(a, b) = p(a, b), \dots$, then p_1 is the commuting s -map. And so, there is not causality between Boolean algebras.

How is possible to recognize that random events a, b are compatible? Is it possible to recognize it by measurement? May be our system of measurement produce only a commuting s -map.

Reference

- [1] Beltrametti E., Cassinelli G. (1981). *The logic of quantum mechanics*. Addison-Wesley; Reading, Mass.
- [2] Cassinelli G., Zanghí N. (1984). *Conditional probabilities in quantum mechanics II*. Il Nuovo Cimento **798**, 141–154.
- [3] Cassinelli G., Truini P. (1984). *Conditional probabilities on orthomodular lattices* Rep. Math. Phys., **20**, 41–52.

- [4] Dvurečenskij A., Pulmannová S. (2000). *New trends in quantum structures*. Kluwer Acad. Publ.
- [5] Gudder S.P. (1969). *Quantum probability spaces*. AMS **21**, 296–302.
- [6] Khrennikov A.Yu.(2003). *Contextual viewpoint to quantum stochastic*. J. Math. Phys. **44**, 2471–2478.
- [7] Khrennikov A.Yu. (2000). *Origin of quantum probabilities*. Proc. Conf. “Foundations of Probability and Physics”, Vaxjo-2000, Sweden 180–200.
- [8] Kolmogoroff A.N. (1933). *Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung*. Springer, Berlin.
- [9] Kôpka F., Chovanec F. (1984). *D-poset*. Math. Slovaca **44**, 789–807.
- [10] Chovanec F., Rybáriková E. (1998). *Ideal and filters in D-poset*. Int. Journ. of Theor. Phys. **37**, 17–22.
- [11] Nánásiová O. (1987). *On conditional probabilities on quantum logic*. Int. Jour. of Theor. Phys. **25**, 155–162.
- [12] Nánásiová O. (2004). *Principle conditioning*. Int. Jour. of Theor. Phys. **43**, 1383–1395.
- [13] Nánásiová O., Khrennikov A. Yu. (2002). *Observables on a quantum logic*. Foundation of Probability and Physics-2, Ser. Math. Modeling in Phys., Engin., and Cogn. Sc., Växjö Univ. Press **5**, 417–430.
- [14] Nánásiová O. (2003). *Map for simultaneous measurements for a quantum logic*. Int. Journ. of Theor. Phys. **42**, 1889–1903.
- [15] Khrennikov A., Nánásiová O. (2006). *Representation theorem of observables on a quantum system*. Int. Journ. of Theor. Phys. (accepted).
- [16] Nánásiová O. (2000). *Representation of conditional probability on a quantum logic*. Soft Computing.
- [17] Nánásiová O. (1987). *On conditional probabilities on quantum logic*. Int. Jour. of Theor. Phys. **25**, 155–162.
- [18] Navara M.(2004). *When a residuum can be computed from a t-norm and a negation*. Proc. of the 3rd Int. Workshop on Nonstandard Logics CTU, Praha, 12–14.
- [19] Pták P., Pulmannová S. (1991). *Quantum logics*. Kluwer Acad. Press, Bratislava.
- [20] Pták P. (2004). *On prehilbert space logics*. Proc. of the 3rd Int. Workshop on Nonstandard Logics, CTU, Praha, 26–31.
- [21] Riečan B., Neubrun T. (1997). *Integral, measure and ordering*. Kluwer Acad. Press, Bratislava.
- [22] Riečanová Z. (1995). *Pták sum of Boolean algebra with an effect algebra and its complements*. Int. Jour. of Theor. Phys. **34**, 1719–1727.
- [23] Varadarajan V. (1968). *Geometry of quantum theory*. Princeton, New Jersey, D. Van Nostrand.

Acknowledgement: Supported by grant VEGA1/0273/03 and APVT-20-003204.

Address: O. Nánásiová, KMDG STU, Radlinskeho 11, 81368 Bratislava, Slovakia

E-mail: olga@math.sk

MODEL INFORMAČNÍHO VLIVU A DEZINFORMACE

Martina Neumanová, František Vávra, Pavel Nový,
Arnoštka Netrvalová

Klíčová slova: Informace, dezinformace, informační vliv.

Abstrakt: Tento příspěvek se zabývá využitím konceptu dezinformace pro modelování informačního ovlivňování. Jedná se o pravděpodobnostní modely popisující reklamní prezentace, volební kampaně a obdobné aktivity. Naše metodika využívá pojmů klasické shannonovské teorie informace a její, námi zavedené, modifikace.

1 Úvod

V pracích [3] a [4] jsme představili koncept dezinformace, který je založen na rozdílu mezi skutečným rozdělením pravděpodobnosti a předpokládaným modelem. Pro pojetí divergence vycházíme z „konvergence“ statistického odhadu k nějaké hodnotě. Mějme n pozorování $\{x_1, \dots, x_n\}$, iid. Pak pro triviální formu odhadu divergence platí:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lg \frac{e(x_i)}{s(x_i)} \rightarrow \sum_{x \in X} p(x) \lg \frac{e(x)}{s(x)},$$

kde $p(x)$ je skutečné, nedostupné, pravděpodobnostní rozdělení, $e(x)$ je jeho model a $s(x)$ je rozdělení, proti kterému je testováno. Označíme

$$D(p||s; e) = \sum_{x \in X} p(x) \lg \frac{e(x)}{s(x)}$$

jako „dezinformační“ divergenci pravděpodobnostních modelů $p(x)$ proti $s(x)$, přičemž je modelováno rozdělením $e(x)$. Porovnání klasických informačních pojmů na konečné jevové abecedě a jejich „dezinformačních“ alternativ obsahují následující dvě tabulky. Vedoucí rozdělení je označováno $p(x)$, jeho model (odhad) $e(x)$, srovnávací rozdělení (alternativa) pak $q(x)$.

2 Model kampaně s jednou intervencí

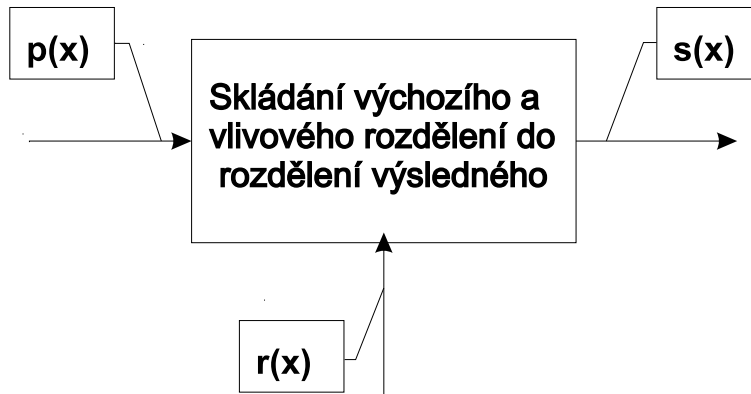
„Dezinformační“ divergence $D(p||s; e)$ je nejen užitečným statistickým pojmem, ale i dobrým prostředkem pro modelování informačního působení (reklamy, politické kampaně, ...). Situace informačního působení jednoho intervanta je schematicky zobrazena na Obr. 1. Zde rozdělení $p(x)$ modeluje stav bez informačního působení, $s(x)$ je popisem stavu po takové kampani a $r(x)$ je modelem vlivového působení (kampaně). $x \in X$ jsou jednotlivé jevy, kterými se modelované uspořádání projevuje navenek (je pozorováno). X je (konečnou) abecedou těchto jevů. Jednotlivé jevy mohou být některé tržní

Míra	Shannonovská informační míra
Entropie	$H(X) = - \sum_{x \in X} p(x) \log p(x)$
Sdílená informace	$I(X : Y) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)}$
Divergence pravděpodobnostních modelů	$D(p q) = \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)}$
Symetrická divergence pravděpodobnostních modelů	$J(p q) = \sum_{x \in X} (p(x) - q(x)) \log \frac{p(x)}{q(x)}$ $J(p q) = D(p q) + D(q p)$

Tabulka 1: Tabulka základních shannonovských pojmů.

Míra	Její „dezinformační“ ekvivalent
Entropie	$H(X; e) = - \sum_{x \in X} p(x) \log e(x)$
Sdílená informace	$I(X : Y; e) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x, y) \log \frac{e(x, y)}{e(x)e(y)}$
Divergence pravděpodobnostních modelů	$D(p q; e) = \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{e(x)}{q(x)}$
Symetrická divergence pravděpodobnostních modelů	$J(p q; e) = \sum_{x \in X} (p(x) - q(x)) \log \frac{e(x)}{q(x)}$ $J(p q; e) = D(p q; e) + D(q e)$

Tabulka 2: Tabulka „dezinformačních“ pojmů.



Obrázek 1: Schéma kampaně s jedním informačním interventem.

produkty a jim přiřazené pravděpodobnosti mohou reprezentovat frekvence prodeje nebo nabídky těchto produktů. Vhodnou mírou pro efekt informačního působení je klasická divergence $D(p||s)$. Tu lze dekomponovat do dvou složek:

$$D(p||s) = D(p||r) + D(p||s; r).$$

První člen součtu popisuje „vztah“ mezi ovlivňovaným a ovlivňujícím rozdělením. Druhý člen je modelem odlišnosti mezi ovlivňovaným a výsledným rozdělením, přičemž ovlivňované je substituováno ovlivňujícím rozdělením.

Tento člen může být interpretován jako míra korekce očekávaného (projektovaného) působení intervenčního rozdělení. Při tom první člen je mírou projektovaného působení takové „informační intervence“. Pro prezentaci uvádíme modelový příklad v tabulce 3.

Prací prášek	Pravděpodobnost koupě před reklamou $p(x)$	Pravděpodobnost koupě předstíraná reklamou $r(x)$	Pravděpodobnost koupě po reklamě $s(x)$
VyZíráte	0.250	0.900	0.350
PereSám	0.167	0.025	0.150
BíláBudeBělejší	0.125	0.025	0.120
ObyčejnýPrášek	0.400	0.025	0.300
VypereVše	0.058	0.025	0.080

Tabulka 3: Demonstrační příklad, $X=\{ VyZíráte, PereSám, BíláBudeBělejší, ObyčejnýPrášek, VypereVše. \}$

K tomuto příkladu je nezbytné poznamenat, že intervenční rozdělení $r(x)$ má nenulové (i když malé) pravděpodobnosti i u nepropagovaných sortimentů. To reprezentuje skutečnost, že každou reklamou je propagován nejen konkrétní produkt konkrétního výrobce, ale i sortiment jako celek. Například reklama na prací prášek VyZíráte upozorní vnímavého diváka i na skutečnost, že vůbec nějaké prací prášky existují.

Výše uvedený vztah $D(p||s) = D(p||r) + D(p||s; r)$ má triviální důkaz:

$$D(p||s) = \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x)}{s(x)} = \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x) r(x)}{s(x) r(x)} = \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x)}{r(x)} + \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{r(x)}{s(x)} = D(p||r) + D(p||s; r).$$
 Z tohoto odvození je zřejmé, že tento vztah platí pro $\forall r(x) \neq 0; \forall s(x) \neq 0; \forall x \in X$.

Vztah

$$D(p||s) = D(p||r) + D(p||s; r)$$

můžeme přepsat do tvaru

$$D(p||s) - D(p||s; r) = D(p||r).$$

Odtud a z faktu, že $D(p||r) \geq 0$ [1,2] plyne:

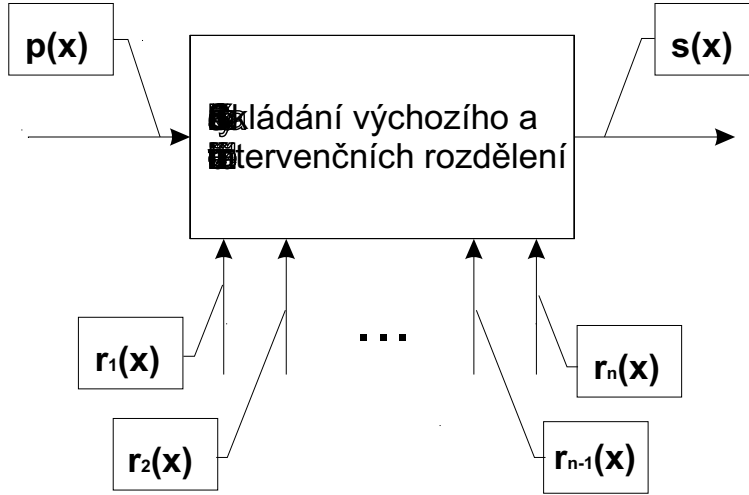
$$D(p||s) \geq D(p||s; r).$$

Tedy divergence dvou pravděpodobnostních rozdělení je větší nebo rovna „dezinformační divergenci“ při libovolném modelu $r(x)$ a rovnost nastává pro $r(x) = p(x), \forall x \in X$. Využijeme-li relace $\frac{x-1}{\ln 2} \geq \log x$, dostáváme pro „dezinformační divergenci“ omezení:

$$\frac{1}{\ln 2} \left(1 - \sum_{x \in X} p(x) \frac{s(x)}{r(x)} \right) \leq D(p||s; r) \leq \left(\sum_{x \in X} p(x) \frac{r(x)}{s(x)} - 1 \right) \frac{1}{\ln 2}.$$

Zde je namístě poznamenat, že vztah $D(p||s) \geq 0$ nemá pro $D(p||s; r)$ obdobu, tedy může být i $D(p||s; r) < 0$.

3 Model kampaně s více intervencemi



Obrázek 2: Schéma kampaně s n informačními intervencemi.

Tato modifikace je modelem soutěže více subjektů o „vhodnou“ transformaci výchozího rozdělení na pravděpodobnostní rozdělení po uplatnění vlivů všech interventů. Pro takovou situaci platí:

$$D(p||s) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(D(p||r_i) + D(p||s; r_i) \right).$$

Důkaz:

$$\begin{aligned} D(p||s) &= \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x)}{s(x)} = \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x) r_1(x)}{s(x) r_1(x)} = \\ &= \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x) r_1(x)}{r_1(x) s(x)} \\ &= \sum_{x \in X} p(x) \log \left[\frac{p(x) r_1(x)}{r_1(x) s(x)} \prod_{i=2}^n \left(\frac{p(x) r_i(x) s(x)}{r_i(x) s(x) p(x)} \right) \right] = \\ &= \sum_{i=1}^n [D(p||r_i) + D(p||s; r_i)] + \sum_{x \in X} p(x) \log \left(\frac{s(x)}{p(x)} \right)^{n-1} = \\ &= \sum_{i=1}^n [D(p||r_i) + D(p||s; r_i)] - (n-1)D(p||s). \end{aligned}$$

Srovnáním počátečního a koncového výrazu dostaneme dokazovanou rovnost. Ta, samozřejmě, platí za předpokladů $\forall x \in X$ je $p(x) \neq 0$, $s(x) \neq 0$

a $\forall i = 1 \dots n \forall x \in X$ je $r_i \neq 0$. Splnění těchto předpokladů pro rozdělení $p(x)$ a $s(x)$ je při konečné abecedě elementárních jevů přirozené. Pro intervenční rozdělení $r_i(x)$ musíme přidat předpoklad, že každá reklama na konkrétní produkt vlastně také trochu propaguje všechny srovnatelné produkty. Samozřejmě totéž platí i pro předvolební kampaně. Zdá se, že i pro tyto dodatečné předpoklady můžeme přijmout fakt jejich přirozenosti.

Shrnutí: Výsledný efekt více-intervenční kampaně je průměrem efektů všech působitelů (informačních interventů).

4 Efektivní měření kampaně s jednou intervencí

V předchozích kapitolách uvedený způsob měření efektu informační kampaně předpokládal libovolnou operaci skládání výchozího a intervenčního rozdělení v rozdělení výsledné. Situaci zjednodušíme na $s(x) = (1 - \lambda)p(x) + \lambda r(x)$. Tedy výsledné rozdělení je směsí rozdělení výchozího a intervenčního a λ ($0 \leq \lambda \leq 1$) je vlastně modelem pro tu část populace, která přijme informační intervenci za svou. Samozřejmě toto zjednodušení je modelem pro informační kampaně více či méně pozitivní. Takový model není, tak jak je formulován, popisem kampaní negativních ($\lambda < 0$). Máme-li dáno výsledné rozdělení $s(x)$, můžeme nalézt metodou nejmenších čtverců nejlepší λ odpovídající aproximační směsí $s(x) = (1 - \lambda)p(x) + \lambda r(x)$, pokud takové λ existuje. Pak:

$$\lambda = \frac{\sum_{x \in X} (s(x) - p(x))(r(x) - p(x))}{\sum_{x \in X} (r(x) - p(x))^2},$$

samozřejmě, pokud platí λ ($0 \leq \lambda \leq 1$). Podmínky existence lze přepsat do tvaru:

$$\sum_{x \in X} (r(x) - p(x))(s(x) - r(x)) \leq 0$$

a

$$\sum_{x \in X} (r(x) - p(x))(s(x) - p(x)) \geq 0.$$

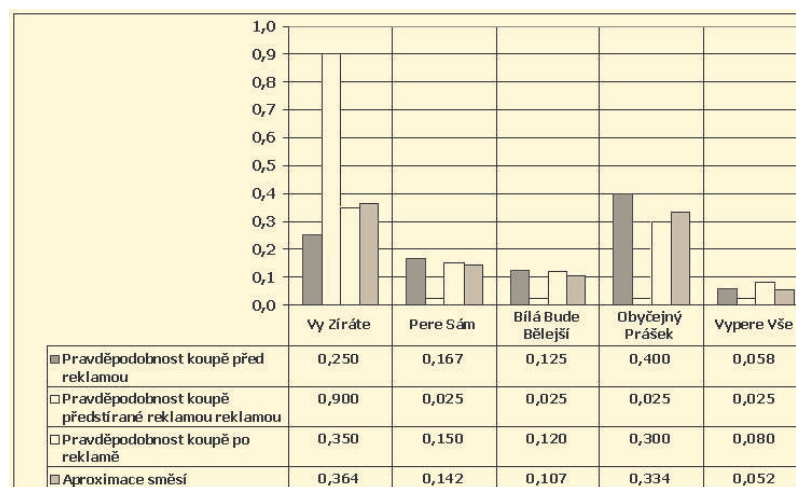
Obě nerovnosti lze přepsat do tvaru skalárních součinů $\langle r - p; s - r \rangle \leq 0$ a $\langle r - p; s - p \rangle \geq 0$. To umožňuje pak geometrickou interpretaci podmínek existence pozitivní charakteru informačního působení (úhlové podmínky, skalární součin po vhodném normování je vlastně cosinem úhlu svíraného oběma vektory).

Příklad: Tedy, v tomto případě, kampaň měla pozitivní efekt a 17,6% populace „podlehla“ jejímu působení (z praktických poznatků poměrně úspěšná kampaň).

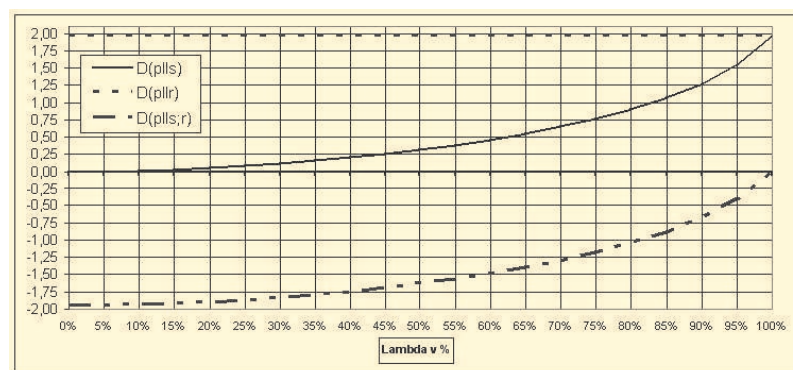
V situacích, kdy je přijatelný předpoklad o tom, že je výsledné rozdělení směsí $s(x) = (1 - \lambda)p(x) + \lambda r(x)$, bude zajímavé sledovat průběhy jednotlivých složek divergence výchozí - výsledné rozdělení na λ . Ty jsou pro jeden modelový příklad zobrazeny na následujícím grafu:

Prací prášek	Pravděpodobnost koupě před reklamou $p(x)$	Pravděpodobnost koupě předstíraná reklamou $r(x)$	Pravděpodobnost koupě po reklamě $s(x)$
VyZíráte	0.250	0.900	0.350
PereSám	0.167	0.025	0.150
BíláBudeBělejší	0.125	0.025	0.120
ObyčejnýPrášek	0.400	0.025	0.300
VypereVše	0.058	0.025	0.080

Tabulka 4: $D(p||s) = 0.0508$; $D(p||r) = 1.9557$; $D(p||s;r) = -1.9049$; $\lambda = 0.1761$.



Obrázek 3: „Učinkující“ a výsledná rozdělení k předcházejícímu příkladu.



Obrázek 4: Závislost jednotlivých složek $D(p||s)$ na λ .

5 Závěr a další rozvoj

V předcházejícím textu je naznačen jeden způsob modelování a měření vlivu při informačních kampaních. Tento přístup má některá omezení. První z nich je to, že vlivové působení pracuje se shodnou abecedou jevů jako ovlivňo-

vané. Předložený model „tvorby“ výsledného rozdělení pomocí směsi výchozího a ovlivňujícího má možnost modelovat jen „pozitivní“ působení. Pro negativní kampaně musíme připustit i jiné formy „skládání“ rozdělení. Samozřejmě v některých případech je v takové situaci přijatelná i směs. To proto, že pro λ potřebujeme splnit pouze omezení $0 \leq (1 - \lambda)p(x) + \lambda r(x) \leq 1; \forall x \in X$. Je tu také další „zúžení“. Model je statický a popisný. Model tedy měří efektivitu, již realizované kampaně. Další rozvoj půjde několika směry:

- Studium možných operací skládání výchozího a ovlivňujícího rozdělení nebo jejich aproximací. Zajímavý bude případ více informačních intervencí.
- Studium podmínek, při kterých je informační kampaň výsledkově negativní. To však také předpokládá vymezení pojmu negativní informační kampaň pomocí jazyka pravděpodobnosti a teorie informace.
- Studium operací skládání výchozího a ovlivňujících rozdělení za předpokladu, že u interventů může „působit“ jiná abeceda (obsahující či neobsahující za svou část abecedu ovlivňovaných jevů).
- Studium modelů, u kterých jejich struktura připustí popsat některé dynamické jevy (alespoň na úrovni před a po).

Reference

- [1] Vajda I. (1982). *Teória informácie a štatistického rozhodovania*. Alfa Bratislava.
- [2] Cover T.M., Thomas J.A. (1991). *Elements of information theory*. Wiley.
- [3] Vávra F., Nový P. (2004). *Informace a dezinformace*. Seminář z aplikované matematiky. Katedra aplikované matematiky, Přírodovědecká fakulta Masarykovy Univerzity, Brno.
- [4] Kotlíková M., Mašková H., Netrvalová A., Nový P., Spíralová D., Vávra F., Zmrhal D. (2004). *Informace a dezinformace - statistický pohled*. ROBUST'2004, JČMF 2004. Třešť 2004.
- [5] Netrvalová A., Šafařík J. (2006). *Human trust modelling*. Aplimat 2006, 5th International Conference, Department of Mathematics, Faculty of Mechanical Engineering, STU, Bratislava, Slovakia.

Poděkování: Tato práce by nebyla vytvořena nebýt instituce IWRS a grantu IWRS 2004 008.

Adresa: F. Vávra, P. Nový, M. Neumanová, A. Netrvalová, Katedra informatiky a výpočetní techniky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita v Plzni, Univerzitní 22, 306 14 Plzeň

E-mail: {vavra,novyp,mneumano,netrvalo}@kiv.zcu.cz

ESTIMATION OF THE VARIANCE IN MARKED POINT PROCESSES

Zbyněk Pawlas

Keywords: Marked point processes, mean square error, U -statistics, variance estimation.

Abstract: We study the statistical properties of different estimators of variance of the typical mark in marked point processes. Since the marks are typically correlated, the standard sample variance is biased. The mean square error can be substantial for small and medium sample sizes. We discuss possibilities to reduce the bias. The mean square errors of variance estimators are compared using both theoretical computation and simulations for selected types of marked point process.

1 Introduction

In spatial statistics, we often work with measurements of some quantity at points irregularly scattered in the plane or in the space (see [2]). The locations of these points and the measurements are considered as random. This situation can be modeled by means of marked spatial point processes. The statistical dependence of the measurements (marks) is involved in the model.

In order to allow parameter estimation from a single realization, we assume that a marked point process is stationary. Then there exists the mark distribution. The aim of this contribution is to investigate the estimation of variance in the mark distribution.

The presence of spatial correlation creates a bias of the common variance estimator. In order to eliminate this bias we can try to estimate it, and, consequently, we increase the variance of the estimator. We propose another estimator based on U -statistics of second order.

For illustration we choose a one-dimensional example with equally spaced points. From the theoretical computation of variances it is shown that the classical estimator has larger bias than the estimator based on U -statistics under realistic assumptions that the data close together are positively correlated and this dependence becomes weaker as the separation between locations increases. On the other hand, the standard sample variance has lower mean square error (MSE) than the estimator based on U -statistics unless the correlation is very strong. Using simulations, it is observed that the latter estimator performs better than the former one for strongly correlated marked spatial point processes.

2 Marked point processes

We begin by summarizing basic facts and notation concerning marked point processes that will be needed later. For more details and further background we refer to [2], [3] or [7].

Let $\Phi_m = \{(X_i, M_i)\}$ be a stationary marked point process with positions in the d -dimensional Euclidean space \mathbb{R}^d and marks in some complete separable metric space, say \mathbb{M} . The mark M_i attached to the point X_i specifies some additional information about the location X_i . Stationarity of Φ_m means that the distribution is translation invariant with respect to the first component, i.e. $\Phi_m + x = \{(X_i + x, M_i)\}$ has the same distribution as Φ_m for all $x \in \mathbb{R}^d$. Since Φ_m is stationary, the unmarked point process $\Phi = \{X_i\}$ is a stationary point process on \mathbb{R}^d . Moreover, we shall assume that Φ is simple, i.e. all points are distinct almost surely. Denote by λ its intensity and assume that $0 < \lambda < \infty$.

The intensity measure of the marked point process is defined as

$$\Lambda_m(B \times U) = \mathbb{E} \sum_i \mathbf{1}_B(X_i) \mathbf{1}_U(M_i), \quad B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d), U \in \mathcal{B}(\mathbb{M}), \quad (1)$$

where $\mathbf{1}_B(\cdot)$ stands for the indicator function of the set B and \mathcal{B} denotes Borel σ -algebra. In other words, $\Lambda_m(B \times U)$ is the expected number of points in B with corresponding mark in U . The intensity measure decomposes for stationary marked point process as follows

$$\Lambda_m(B \times U) = \lambda |B| \Lambda_0(U), \quad B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d), U \in \mathcal{B}(\mathbb{M}),$$

where $|\cdot|$ denotes the d -dimensional Lebesgue measure and Λ_0 is called the mark distribution. A random element in the space \mathbb{M} , distributed according to the probability measure Λ_0 , is referred as a typical mark and will be denoted by M_0 . If $\{M_i\}$ are i.i.d. and independent of Φ (Φ_m is then called independently marked point process) then their common distribution coincides with the mark distribution Λ_0 .

From the definition of the intensity measure and decomposition (1) it can be deduced by standard measure theory argument that

$$\mathbb{E} \sum_i f(X_i, M_i) = \lambda \int_{\mathbb{M}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x, m) dx \Lambda_0(dm) \quad (2)$$

for any non-negative measurable function f on $\mathbb{R}^d \times \mathbb{M}$. Equation (2) is known as Campbell's theorem for stationary marked point processes.

For the study of second order properties of the marked point process we will use the second factorial moment measure

$$\alpha_m^{(2)}(B_1 \times U_1 \times B_2 \times U_2) = \mathbb{E} \sum_{i \neq j} \mathbf{1}_{B_1}(X_i) \mathbf{1}_{U_1}(M_i) \mathbf{1}_{B_2}(X_j) \mathbf{1}_{U_2}(M_j).$$

Second order Campbell's theorem for stationary marked point processes has the form

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \sum_{i \neq j} f(X_i, M_i, X_j, M_j) &= \\ &= \int \int \int \int f(x_1, m_1, x_2, m_2) \mathcal{M}_{x_1 - x_2}(dm_1, dm_2) \alpha^{(2)}(dx_1, dx_2), \quad (3) \end{aligned}$$

where $\alpha^{(2)}(\cdot \times \cdot) = \alpha_m^{(2)}(\cdot \times \mathbb{M} \times \cdot \times \mathbb{M})$ is the second factorial moment measure of point process Φ and \mathcal{M}_y is so called two-point mark distribution.

3 Estimation of moments in the mark distribution

The marks can be quite complex (e.g. compact sets or other geometrical objects) but often we are interested just in some variable which is a real function of the marks (e.g. volume, length, angle). Then it is senseful to ask for the estimators of moments of this random variable. In what follows we always assume that $\mathbb{M} = \mathbb{R}$ and $\mathbb{E}M_0^2 < \infty$. Further, we assume that a single observation of Φ_m in a bounded sampling window $W \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ is available and that we can measure marks M_i for all observable points $X_i \in W$.

Let us define the mark sum measure by

$$\Psi(B) = \sum_i \mathbf{1}_B(X_i)M_i, \quad B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d).$$

From Campbell's theorem for stationary marked point processes (2) we get $\mathbb{E}\Psi(B) = \lambda|B| \int_{\mathbb{M}} m \Lambda_0(dm)$ and since $\mathbb{E}\Phi(B) = \lambda|B|$, the estimator $\bar{M} = \Psi(W)/\Phi(W)$ is the ratio-unbiased estimator of $\mathbb{E}M_0$ (i.e. the ratio of two unbiased consistent estimators). Similarly, $\sum_i \mathbf{1}_W(X_i)M_i^2/\Phi(W)$ is ratio-unbiased estimator of $\mathbb{E}M_0^2$. Our aim is to study the estimation of $\sigma^2 = \text{var } M_0$.

The most natural way is to consider the plug-in estimate of $\sigma^2 = \mathbb{E}M_0^2 - (\mathbb{E}M_0)^2$, obtained from ratio-unbiased estimators of $\mathbb{E}M_0$ and $\mathbb{E}M_0^2$:

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{1}{\Phi(W)} \sum_i \mathbf{1}_W(X_i) (M_i - \bar{M})^2. \tag{4}$$

In the case of independent marking it can be easily shown that $\mathbb{E}\bar{M} = \mathbb{E}M_0$ and $S^2 = \frac{\Phi(W)}{\Phi(W)-1} \widehat{\sigma^2}$ is an unbiased estimator of $\text{var } M_0$. For fixed number n of points in W and identically distributed marks, $\widehat{\sigma^2}$ on average underestimates σ^2 and we have

$$\mathbb{E}\widehat{\sigma^2} = \sigma^2 - \text{var } \bar{M}. \tag{5}$$

We can try to correct the bias by estimating $\text{var } \bar{M} = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j} \text{cov}(M_i, M_j)$. There are several methods how to estimate the variance of the sample mean, e.g. using empirical covariances, subsampling methods or some parametric method. The first two approaches will be discussed later.

In some applications, the window of observation W is formed by the union of several smaller windows which are far apart. Then it can be assumed that only marks within the same subwindow are correlated. This motivates us for the definition of another variance estimator. We know that the sample variance S^2 coincides with the U -statistics of second order

$$U = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i < j} (M_i - M_j)^2.$$

We introduce the estimator with slightly modified kernel function (taking into account only pairs of widely distant locations)

$$U_h = \frac{1}{2N_h} \sum_{i < j} (M_i - M_j)^2 \mathbf{1}_{[h, \infty)}(\|X_i - X_j\|) \mathbf{1}_W(X_i) \mathbf{1}_W(X_j), \quad (6)$$

where $N_h = \sum_{i < j} \mathbf{1}_{[h, \infty)}(\|X_i - X_j\|) \mathbf{1}_W(X_i) \mathbf{1}_W(X_j)$ and $\|\cdot\|$ is the Euclidean distance. If $\mathcal{M}_y = \Lambda_0 \times \Lambda_0$ for $\|y\| \geq h$, then it follows from (3) that $\mathbb{E}2N_h U_h / \mathbb{E}2N_h = \sigma^2$, hence U_h is ratio-unbiased estimator of σ^2 .

For a fixed number of points and identically distributed marks is the bias of U_h

$$\mathbb{E}U_h - \sigma^2 = - \sum_{i < j} \text{cov}(M_i, M_j) \mathbf{1}_{[h, \infty)}(\|X_i - X_j\|) \mathbf{1}_W(X_i) \mathbf{1}_W(X_j),$$

which is in the absolute value smaller than the bias of $\widehat{\sigma^2}$ under the assumption that $\text{cov}(M_i, M_j)$ is non-negative and not increasing as the distance $\|X_i - X_j\|$ increases. In particular, if $\text{cov}(M_i, M_j) = 0$ for $\|X_i - X_j\| \geq h$, then (6) is the unbiased estimator of σ^2 . But greater values of h typically cause greater variance. Our aim is to investigate whether U_h with an appropriately chosen parameter $h > 0$ can improve classical estimator (4).

4 Comparison of estimators

Let us first consider an illustrative one-dimensional example such that the variances can be expressed explicitly. Then we look at marked point processes in the plane. Three simulation examples are presented in order to show how the performance of estimators depends on the strength of dependence and the type of process.

4.1 Random vector

In this subsection the locations will form a regular lattice on the line. Let (M_1, \dots, M_n) be a random vector having n -dimensional Gaussian distribution with expectation (μ, \dots, μ) and variance matrix $\Sigma = (\sigma^2 r_{ij})_{i,j=1}^n$, where $\sigma^2 > 0$ and $r_{ii} = 1$ for $i = 1, \dots, n$. Then

$$\text{var } S^2 = \frac{2\sigma^4}{(n-1)^2} \left(\sum_{i,j} r_{ij}^2 - \frac{2}{n} \sum_{i,j,k} r_{ij} r_{ik} + \left(\frac{1}{n} \sum_{i,j} r_{i,j} \right)^2 \right)$$

and similar (but longer) formula can be derived for $\text{var } U_h$. We can compare the quality of $\widehat{\sigma^2}$, S^2 and U_h (with $h = 2$) according to their mean square errors. For example, for $r_{ij} = \rho^{|i-j|}$ and $n = 50$ we get $\text{MSE } S^2 > \text{MSE } U_2$ for $\rho > \rho_0 \doteq 0,882$, $\text{MSE } \widehat{\sigma^2} > \text{MSE } S^2$ for $\rho > \rho_1 \doteq 0,738$ (see Figure 1 left).

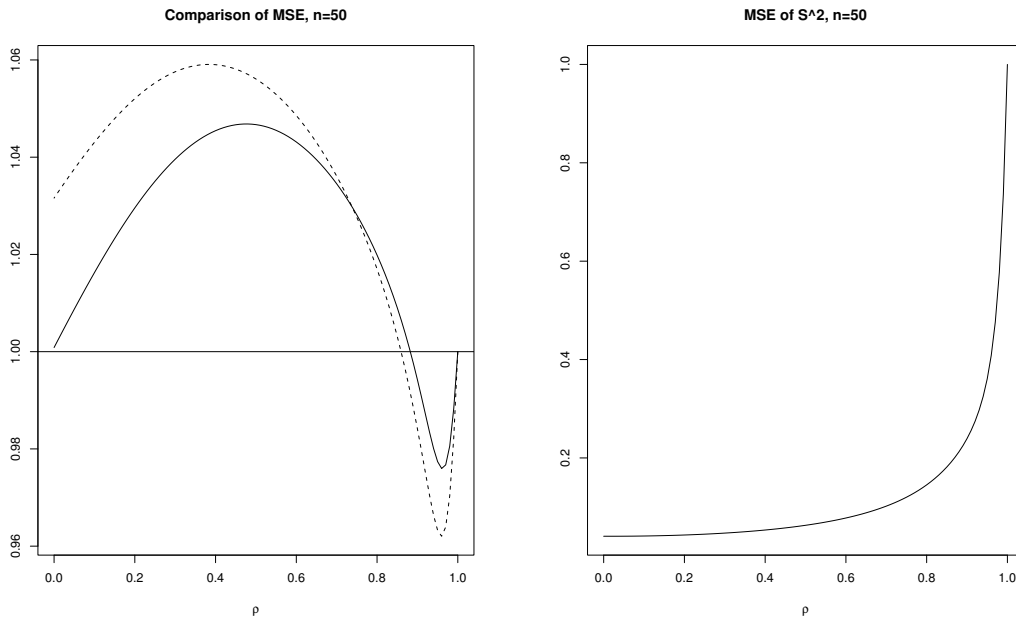


Figure 1: Left: ratios $\text{MSE } U_2 / \text{MSE } S^2$ (full line) and $\text{MSE } U_2 / \text{MSE } \widehat{\sigma}^2$ (dashed line) as the function of ρ . Right: $\text{MSE } S^2$ as the function of ρ .

Mean square errors of all three estimators are increasing with increasing correlation coefficient ρ (see Figure 1 right).

We also briefly mention those estimators based on (5), that have the form $\widehat{\sigma}^2 + \widehat{\text{var } \bar{M}}$. Using

$$\text{var } \bar{M} = \frac{1}{n^2} \left(n \text{var } M_1 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \text{cov}(M_1, M_{k+1}) \right)$$

we cannot replace covariances by empirical counterparts

$$\frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^{n-k} (M_i - \bar{M})(M_{i+k} - \bar{M})$$

because such plug-in estimator is always zero, which is inadvisable estimator of the variance. The reason is that empirical covariances of higher order have large variance. Therefore, we have to use only empirical covariances upto some smaller order, say K . It turns out that in our example this procedure doesn't improve (4) in the sense of mean square error except for small K and large ρ .

For irregularly scattered data we usually do not observe enough pairs with the same distance. In order to estimate covariance function at h it is common to use either kernel estimators or empirical estimators based on the pairs of points with distances in interval $(h - \delta, h + \delta)$.

Another possibility how to estimate $\text{var } \bar{M}$ for spatial randomly scattered data is subsampling method described in [5]. The authors show that under certain assumptions the estimator is L^2 -consistent but the results obtained from finite sample simulations considered in the next subsection were not too satisfactory for any of the chosen subsampling parameters.

4.2 Marked planar point processes

In this subsection the locations will be scattered randomly in the plane. We choose three examples representing basic types of point processes: Poisson point process (complete spatial randomness), Matérn cluster process (clustering, attractive interactions) and Matérn hard-core process II (regularity, repulsive interactions), for exact definitions see [4] or [7].

The mark structure is again generated from the Gaussian distribution in such a way that, conditionally on Φ , the marks have covariance

$$\int \int (m_1 - \mu)(m_2 - \mu) \mathcal{M}_y(dm_1, dm_2) = \sigma^2 \rho^{-\|y\|}, \quad y \in \mathbb{R}^d,$$

where $\mu = \mathbb{E}M_0$. Large values of ρ correspond to strong correlation for points close together, while small ρ corresponds to approximately independent case. For widely distant data the correlation is almost zero. Therefore, it seems that dependencies should have larger influence in cluster processes than

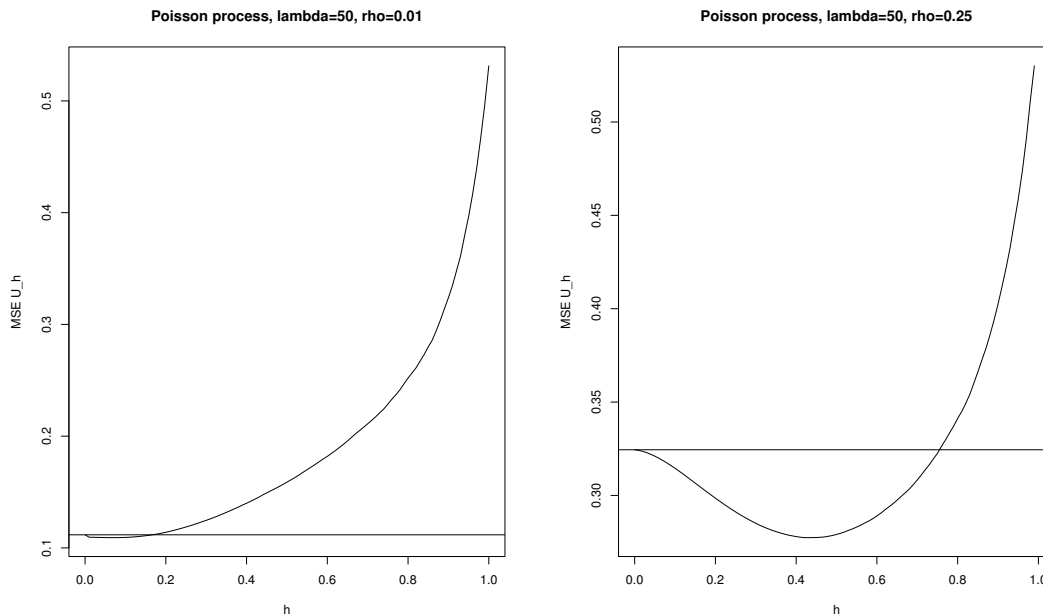


Figure 2: Empirical mean square error of U_h as the function of h computed from 10 000 realizations of Poisson point process with intensity $\lambda = 50$. Empirical mean square error of $\widehat{\sigma}^2$ is represented by horizontal line. Left: $\rho = 0.01$. Right: $\rho = 0.25$.

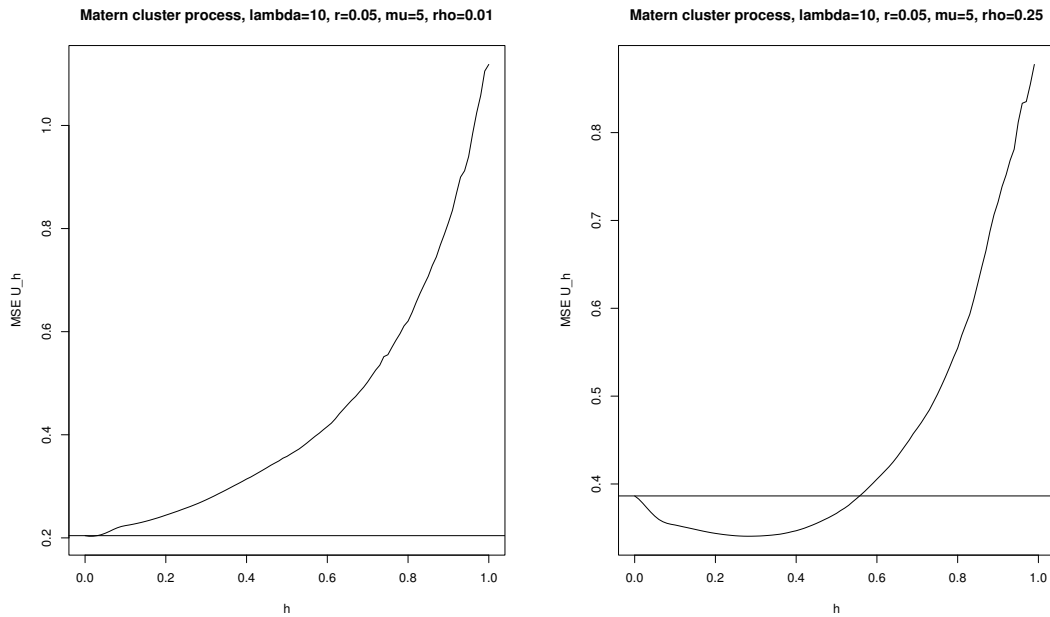


Figure 3: Empirical mean square error of U_h as the function of h computed from 10 000 realizations of Matérn cluster process with parameters $\lambda_p = 10$, $r = 0.05$ and $\mu = 5$. Empirical mean square error of $\widehat{\sigma}^2$ is represented by horizontal line. Left: $\rho = 0.01$. Right: $\rho = 0.25$.

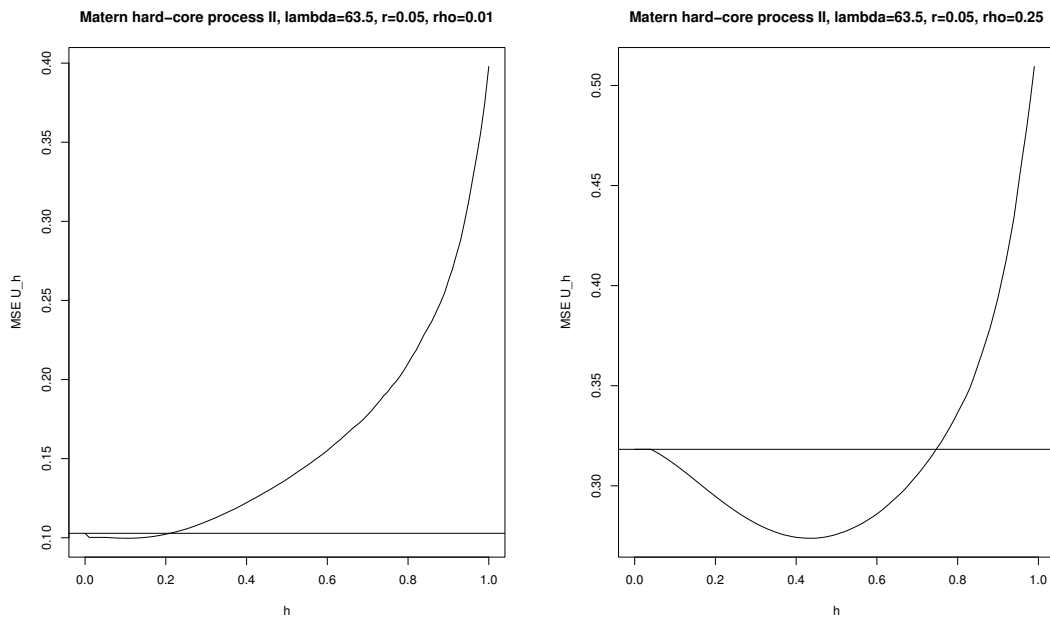


Figure 4: Empirical MSE of U_h as the function of h computed from 10 000 realizations of Matérn hard core II process with parameters $\lambda_b = 63.5$ and $r = 0.05$. Empirical MSE of $\widehat{\sigma}^2$ is represented by horizontal line. Left: $\rho = 0.01$. Right: $\rho = 0.25$.

in regular processes. We chose $\sigma^2 = 1$ and two different values of ρ in each of three examples.

For each example we simulated 10 000 realizations of given process in unit square window. The statistical computing and simulation was conducted using R (see [6]) and its contributed package `spatstat` (see [1]). The parameters were chosen so that the intensity λ (the mean number of points) was 50. The results are shown in Figures 2, 3 and 4.

The performance of the variance estimators is influenced by the strength of dependence (MSE increases as the strength increases) and by the process (MSE is larger for clustered processes than for regular ones). The bias decreases but the variance increases as h increases. Minimizing MSE we can find a trade-off between the bias and the variance. This optimal h is near 0 for weak correlation (U_h resembles $\widehat{\sigma^2}$) and can be far from 0 for strong dependencies. In practice, it is question how to define an appropriate h . Sometimes the choice of h is natural, e.g. when W consists of smaller distant windows.

Reference

- [1] Baddeley A., Turner R. (2005). *Spatstat: an R package for analyzing spatial point patterns*. Journal of Statistical Software **12**, 1–42.
- [2] Cressie N.A.C. (1993). *Statistics for spatial data*. Wiley & Sons, New York.
- [3] Daley D.J., Vere-Jones D. (1988). *An introduction to the theory of point processes*. Springer Verlag, New York.
- [4] Møller J., Waagepetersen R.P. (2003). *Statistical inference and simulation for spatial point processes*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton.
- [5] Politis D.N., Sherman M. (2001). *Moment estimation for statistics from marked point processes*. J. R. Statist. Soc. B **63**, 261–275.
- [6] R Development Core Team (2004). *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL: <http://www.R-project.org>.
- [7] Stoyan D., Kendall W.S., Mecke J. (1995). *Stochastic geometry and its applications*, 2nd edition. Wiley & Sons, New York.

Acknowledgement: This work was supported by the research project MSM 0021620839 financed by MŠMT ČR, by grant 201/06/P075 from GA ČR and by grant IAA 101120604 from GA AV ČR.

Address: Z. Pawlas, Charles University, Faculty of Mathematics and Physics, Department of Probability and Mathematical Statistics, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: pawlas@karlin.mff.cuni.cz

IDEAS AND REMARKS ON ISOTONIC REGRESSION IN SOBOLEV SPACES

Michal Pešta

Keywords: Isotonic regression, Sobolev spaces, nonparametric, monotonicity.

Abstract: We propose a class of nonparametric estimators for the regression models based on least squares over sets of sufficiently smooth functions. Least squares permit the imposition of additional constraint—*isotonia*—on the nonparametric regression estimation and testing of this constraint.

The estimation takes place over the balls of functions which are elements of a suitable Sobolev space that allow to transform the problem of searching for the best fitting function in an infinite dimensional space into a finite dimensional optimization problem.

Moreover, bounded higher order derivatives permit us to estimate over rich set of functions with sufficiently low metric entropy and apply the laws of large numbers and the central limit theorems.

1 Motivation and aim of this contribution

We would like to estimate a regression function that is smooth and isotonic. *Isotonia* is non-negativity (non-positivity) of n -th derivative of a function (e.g. monotonicity, convexity or concavity). Sobolev spaces are class of the functions with smooth high order derivative. On the other hand, they are also spaces of integrable functions on a specific domain.

We think of regression models based upon functions with specific features (quality). So we do not care about formula of regression function (nonparametric regression).

2 Sobolev spaces

We consider function $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, where Ω is a connected Lebesgue-measurable bounded subset of an Euclidean space \mathbb{R}^q with non-empty interior.

Definition 2.1 (Sobolev norm). *Let $f \in C^m(\Omega) \cap L_p(\Omega)$. We introduce Sobolev norm $\|\cdot\|_{p,Sob,m}$:*

$$\|f\|_{p,Sob,m} := \left\{ \sum_{|\alpha|_\infty \leq m} \int_{\Omega} |D^\alpha f(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} \right\}^{1/p}. \quad (1)$$

Definition 2.2 (Sobolev space). *Sobolev space $\mathcal{W}_p^m(\Omega)$ is the completion of intersection of space $C^m(\Omega)$ and space $L_p(\Omega)$ with respect to the Sobolev norm $\|\cdot\|_{p,Sob,m}$.*

Definition 2.3 (Sobolev inner product). *Let $f, g \in \mathcal{W}_2^m(\Omega)$. We introduce Sobolev inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle_{Sob,m}$:*

$$\langle f, g \rangle_{Sob,m} := \sum_{|\alpha|_\infty \leq m} \int_{\Omega} D^\alpha f(\mathbf{x}) D^\alpha g(\mathbf{x}) dx. \quad (2)$$

2.1 Representors in Sobolev space

$\mathcal{W}_2^m(\Omega)$ is a Hilbert space, so we can express $\mathcal{W}_2^m(\Omega)$ as a direct sum of the subspaces that are orthogonal to each other and take the projections of elements of $\mathcal{W}_2^m(\Omega)$ into its subspaces. This property is very important in the regression.

\mathcal{Q}^q denotes a closed unit cube in \mathbb{R}^q and $\mathcal{W}_2^m(\mathcal{Q}^q) \equiv \mathcal{H}^m$.

In [1] we can find a function and its derivative evaluation using special types of sufficiently smooth functions—representors.

Theorem 2.1 (Representors in Sobolev space). *For all $f \in \mathcal{H}^m$, $\mathbf{a} \in \mathcal{Q}^q$ and $\mathbf{w} \in \mathbb{N}_0^q$, $|\mathbf{w}|_\infty \leq m - 1$, there exists a function $\psi_{\mathbf{a}}^{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) \in \mathcal{H}^m(\mathcal{Q}^q)$, s.t.*

$$\langle \psi_{\mathbf{a}}^{\mathbf{w}}, f \rangle_{Sob,m} = D^{\mathbf{w}} f(\mathbf{a}). \quad (3)$$

$\psi_{\mathbf{a}}^{\mathbf{w}}$ is called a representor at the point \mathbf{a} with the rank \mathbf{w} . Furthermore, $\psi_{\mathbf{a}}^{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^q \psi_{a_i}^{w_i}(x_i)$ for all $\mathbf{x} \in \mathcal{Q}^q$, where $\psi_{a_i}^{w_i}(\cdot)$ is the representor in the Sobolev space of functions of one variable on \mathcal{Q}^1 with inner product

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{w_i} f(\mathbf{a})}{\partial x_i^{w_i}} &= \left\langle \psi_{a_i}^{w_i}, f(x_1, \dots, x_{i-1}, \cdot, x_{i+1}, \dots, x_q) \right\rangle_{Sob,m} \\ &= \sum_{\alpha=0}^{m} \int_{\mathcal{Q}^1} \frac{d^\alpha \psi_{a_i}^{w_i}(x_i)}{dx_i^\alpha} \frac{d^\alpha f(\mathbf{x})}{dx_i^\alpha} dx_i. \end{aligned} \quad (4)$$

Define $\kappa := \begin{cases} \frac{m}{2}, & 2 \mid m, \\ \frac{m+1}{2}, & 2 \nmid m \end{cases}$, $\mathcal{K} := \{0, 1, \dots, 2m+1\} \setminus \{\kappa, m+1+\kappa\}$ and $\mathcal{M} := \{1, 2, \dots, m\} \setminus \{\kappa\}$. From the proof of Theorem 2.1 we easily obtain that representor $\psi_{\mathbf{a}} \in \mathcal{H}^m[0, 1]$ s.t. $\langle \psi_a, f \rangle_{Sob,m} = f(a)$ for all $f \in \mathcal{H}^m[0, 1]$

will be of the form $\psi_a(x) = \begin{cases} \sum_{k \in \mathcal{K}} \gamma_k \varphi_k(x) & 0 \leq x \leq a, \\ \sum_{k \in \mathcal{K}} \gamma_{2m+2+k} \varphi_k(x) & a \leq x \leq 1. \end{cases}$ We also determine $\varphi_k(x)$ according to [3] for m even

$$\varphi_k(x) = \exp \left\{ (\Re(\lambda_k))x \right\} \cos \left[(\Im(\lambda_k))x \right]; \quad (5a)$$

$$\varphi_{m+1+k}(x) = \exp \left\{ (\Re(\lambda_k))x \right\} \sin \left[(\Im(\lambda_k))x \right]; \quad (5b)$$

where $k \in \{0\} \cup \mathcal{M}$ and for m odd

$$\varphi_0(x) = \exp \{x\}; \quad \varphi_k(x) = \exp \left\{ (\Re(\lambda_k))x \right\} \cos \left[(\Im(\lambda_k))x \right]; \quad (6a)$$

$$\varphi_{m+1}(x) = \exp \{-x\}; \varphi_{m+1+k}(x) = \exp \left\{ (\Re(\lambda_k))x \right\} \sin \left[(\Im(\lambda_k))x \right]; \quad (6b)$$

where $k \in \mathcal{M}$ and $\lambda_k = e^{i\theta_k}$, $\theta_k \in \begin{cases} \frac{(2k+1)\pi}{2m+2}, & 2 \mid m, \quad k \in \mathcal{K}, \\ \frac{k\pi}{m+1}, & 2 \nmid m, \quad k \in \mathcal{K}. \end{cases}$

Theorem 2.2 (Obtaining coefficients γ_k). *Let $a \in (0, 1)$. Coefficients $\gamma_k(a)$ of the representer $\psi_a(x)$ are unique solution of $4m \times 4m$ system of linear equations*

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} \gamma_k(a) \left(\varphi_k^{(m-j)}(0) + (-1)^j \varphi_k^{(m+j)}(0) \right) = 0, \quad j = 0, \dots, m-1; \quad (7a)$$

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} \gamma_{2m+2+k}(a) \left(\varphi_k^{(m-j)}(1) + (-1)^j \varphi_k^{(m+j)}(1) \right) = 0, \quad j = 0, \dots, m-1; \quad (7b)$$

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} (\gamma_k(a) - \gamma_{2m+2+k}(a)) \varphi_k^{(j)}(a) = 0, \quad j = 0, \dots, 2m-2; \quad (7c)$$

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} (\gamma_k(a) - \gamma_{2m+2+k}(a)) \varphi_k^{(2m-1)}(a) = (-1)^{m-1}; \quad (7d)$$

where \mathcal{K} is defined above and φ_k in (5–6).

Coefficients φ_k are base elements of a special vector space described in [3].

3 Regression in Sobolev spaces

Connection of features of L_2 -space and \mathcal{C}^m -spaces yield an interesting background for the nonparametric regression. L_2 -space are special types of the Hilbert spaces that facilitate calculation of the least square projection. On the other hand, we regard the \mathcal{C}^m -spaces as one of the common classes of functions enabling us to approximate the data with.

3.1 Single equation model

Yatchew and Bos in [1] proposed the following model.

Definition 3.1 (Single equation model). *The single equation model is*

$$Y_i = f(\mathbf{X}_i) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (8)$$

with these assumptions:

- i) \mathbf{X}_i are q -dimensional random vectors, i.i.d. with probability law P_x and density p_x bounded away from zero on the support \mathcal{Q}^q , the unit cube in \mathbb{R}^q ;
- ii) ε_i are i.i.d. random variables with probability law P_ε so that $\mathbb{E}\varepsilon_i = 0$ and $\text{Var}\varepsilon_i = \sigma_\varepsilon^2$ for all i ; $P_\varepsilon \in \mathcal{P}_\varepsilon$ a collection of probability laws with mean 0 and support contained in a bounded interval of \mathbb{R}^1 ; \mathbf{X}_i and ε_i are independent;
- iii) $f \in \mathcal{F}$, where \mathcal{F} is a family of functions in the Sobolev space \mathcal{H}^m from \mathbb{R}^q to \mathbb{R}^1 , $m > \frac{q}{2}$, $\mathcal{F} = \left\{ f \in \mathcal{H}^m : \|f\|_{\text{Sob},m}^2 \leq L \right\}$.

3.2 Least squares

Least squares are in regression the most typical and standard way of finding the estimator. Our regression problem can be characterized by:

$$\min_{f \in \mathcal{H}^m} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i)]^2 \quad \text{s.t.} \quad \|f\|_{Sob,m}^2 \leq L. \tag{9}$$

The Sobolev norm bound L controls the tradeoff between the infidelity to the data and the roughness of the estimated solution.

Definition 3.2 (Representer matrix). *Let $\psi_{\mathbf{x}_1}, \dots, \psi_{\mathbf{x}_n}$ be the representer for function evaluation at $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ respectively, i.e. $\langle \psi_{\mathbf{x}_i}, f \rangle_{Sob,m} = f(\mathbf{x}_i)$ for all $f \in \mathcal{H}^m$, $i = 1, \dots, n$. Let Ψ be the $n \times n$ representer matrix whose columns (and rows) equal the representer evaluated at x_1, \dots, x_n ; i.e.*

$$\Psi_{i,j} = \langle \psi_{x_i}, \psi_{x_j} \rangle_{Sob,m} = \psi_{x_i}(x_j) = \psi_{x_j}(x_i). \tag{10}$$

Theorem 3.1 (Infinite to finite). *Let $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)'$ and define*

$$\hat{\sigma}^2 = \min_{f \in \mathcal{H}^m} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i)]^2 \quad \text{s.t.} \quad \|f\|_{Sob,m}^2 \leq L, \tag{11}$$

$$s^2 = \min_{\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} [\mathbf{y} - \Psi \mathbf{c}]' [\mathbf{y} - \Psi \mathbf{c}] \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{c}' \Psi \mathbf{c} \leq L \tag{12}$$

where \mathbf{c} is an $n \times 1$ vector and Ψ is the representer matrix. Then $\hat{\sigma}^2 = s^2$. Furthermore, there exists a solution to (11) of the form

$$\hat{f} = \sum_{i=1}^n \hat{c}_i \psi_{\mathbf{x}_i} \tag{13}$$

where $\hat{\mathbf{c}} = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)'$ solves (12). The estimator \hat{f} is unique a.e.

Theorem 3.1 transforms an infinite dimensional problem into a finite dimensional one—quadratic optimization problem. Proof is simply based on the projection property in a Hilbert space (analogue with linear regression) (see [1]), the uniqueness has been shown in [3].

Corollary 3.1 (Form of the regression function estimator). *Given x_1, \dots, x_n , the estimator of the regression function from Theorem 3.1 in one-dimensional case is of this form:*

$$\begin{aligned} \hat{f}(x) = & \sum_{j=1}^n \hat{c}_j \sum_{k=1}^{2m} \exp[\Re(e^{i\theta_k})x] \{ I_{[x \leq x_j]} \gamma_k(x_j) \cos[\Im(e^{i\theta_k})x] \\ & + I_{[x > x_j]} \gamma_{2m+k}(x_j) \sin[\Im(e^{i\theta_k})x] \}, \end{aligned} \tag{14}$$

where $\hat{\mathbf{c}} = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)'$ solves (12) and γ is obtained from Theorem 2.2. \hat{f} is not estimated using goniometric splines neither kernel functions.

There is an algorithm employing Schur matrix decomposition suggested and in detail described in [3].

Theorem 3.2 (Constraint optimizing). *Optimizing with constraint*

$$\min_{\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} [\mathbf{y} - \Psi \mathbf{c}]' [\mathbf{y} - \Psi \mathbf{c}] \quad \text{s.t. } \mathbf{c}' \Psi \mathbf{c} \leq L \quad (15)$$

where $\Psi > \mathbf{0}$ is a symmetric $n \times n$ matrix, \mathbf{y} is an $n \times 1$ vector of constants and $L > 0$; has a solution $\hat{\mathbf{c}} = \Phi \hat{\mathbf{d}}$, where Φ is an orthogonal $n \times n$ matrix from Schur decomposition $\Psi = \Phi \Lambda \Phi'$ such that $\Lambda = \text{diag} \{ \lambda_1, \dots, \lambda_n \}$, $\lambda_i > 0, \forall i, \mathbf{I} = \Phi' \Phi = \Phi \Phi'$ and $\hat{\mathbf{d}} = (\hat{d}_1, \dots, \hat{d}_n)'$ solves

$$\min_{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\lambda_i d_i - z_i)^2 \quad \text{s.t. } \sum_{i=1}^n \lambda_i d_i^2 \leq L \quad (16)$$

where $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n)' = \Phi' \mathbf{y}$. Vector $\hat{\mathbf{d}}$ (solution of (16)) always exists.

At this moment we have finally found the procedure of determination of the regression function estimator \hat{f} . Quadratic optimizing with constraints provides \hat{c}_j . Riesz representation theorem gives us θ_k . Boundary conditions of specific differential equation provides γ_k .

The asymptotic behavior of the estimator has been examined in [1]. Kolmogorov and Tihomirov CLT for entropy is used.

Theorem 3.3 (Behavior of finite optimizing solution). *Let \hat{f} satisfy $s^2 = \min_{f \in \mathcal{H}^m} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Y_i - f(\mathbf{X}_i)]^2$. Suppose $f \in \mathcal{H}^m$, then:*

- i) $s^2 \xrightarrow{a.s.} \sigma_\varepsilon^2, \quad n \rightarrow \infty,$
- ii) $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[\hat{f}(\mathbf{X}_i) - f(\mathbf{X}_i) \right]^2 = O_p(n^{-r}), \quad \text{where } r = \frac{2m}{2m+q},$
- iii) $\sqrt{n} (s^2 - \sigma_\varepsilon^2) \xrightarrow{\mathcal{D}} \mathcal{N} (0, \text{Var}(\varepsilon^2)), \quad n \rightarrow \infty.$

We can easily generalize our settings onto weighted least squares (see [3]), multiple observations (see [2]) and also general multi-equation model (see [1]).

3.3 Selection of Sobolev norm bound

In nonparametric least squares the smoothing parameter L corresponds to the diameter of the set of functions over which the estimation takes place. Heuristically, the larger are the bounds (much larger than true norm), the less efficient estimators we obtain in spite of the fact that they will be consistent. On the other hand, the smaller bounds the more efficient estimators we have but inconsistent.

To estimate Sobolev bound L we can use cross-validation method. The existence of 1–1 mapping between Sobolev bound and smoothing parameter

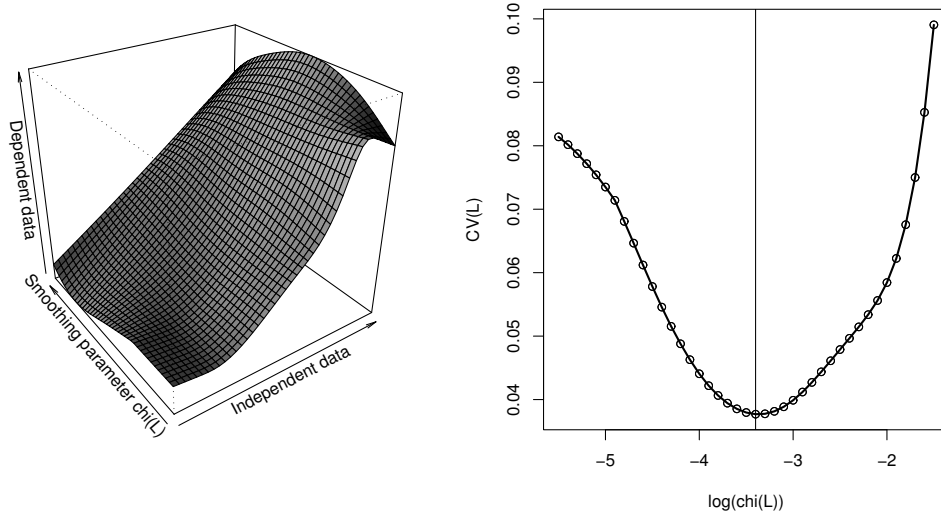


Figure 1: Changing monotone curve in \mathcal{H}^2 depending upon smoothing parameter χ with its optimal value according to cross-validation.

χ —commonly used in nonparametric regression techniques—has been explored in [3]. In Figure 1 we can see correspondence between smoothing parameter χ (thus Sobolev bound L) and shape of regression function estimator (smoothness vs. data fit). Optimal regression function estimator (appropriate smooth) according to cross-validation is also shown (right).

4 Isotonia

In our set-up, we have demanded only smoothness constraint on regression function $f \in \mathcal{F} = \left\{ f \in \mathcal{H}^m : \|f\|_{Sob,m}^2 \leq L \right\}$. Notice, however, that other types of constraints could be used as well. Two basic types of isotonia are monotonicity and concavity so we will concentrate mostly on them.

4.1 Constrained submodel

In [1] the basic single equation model (Definition 3.1) has been extended.

Definition 4.1 (Constrained single equation submodel). *Invoke the assumptions for the single equation model 3.1 and add these assumptions:*

- iv) $\tilde{\mathcal{F}} \subseteq \mathcal{F}$ is a closed set of functions such that the metric entropy $\log N(\delta; \tilde{\mathcal{F}}) \leq A\delta^{-\zeta}$ for some $A > 0, \zeta > 0$;
- v) $\left\{ \tilde{\mathcal{F}}_n \right\}_{n=1}^{\infty}$ is a descending sequence of closed and possibly random sets of functions $\mathcal{F} \supseteq \tilde{\mathcal{F}}_1 \supseteq \dots \supseteq \tilde{\mathcal{F}}_1 \supseteq \dots \supseteq \tilde{\mathcal{F}}$ such that $\bigcap_{n=1}^{\infty} \tilde{\mathcal{F}}_n = \tilde{\mathcal{F}}$ a.s. and $\log N(\delta; \tilde{\mathcal{F}}_n) \leq A'\delta^{-\zeta}, n = 1, 2, \dots$ for some $A' > 0$.

Metric entropy $N(\delta; \mathcal{F})$ denotes the minimum number of balls of the radius δ in supnorm required to cover the set of functions \mathcal{F} .

4.2 Monotonicity and convexity

There exist some needs that press us on defining various types of monotonicity and convexity (in one-dimensional case). More details can be found in [3].

Definition 4.2 (Definite monotonicity). *Optimizing with smoothness and definite monotonicity constraint is*

$$\min_{\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{n} [\mathbf{y} - \Psi \mathbf{c}]' [\mathbf{y} - \Psi \mathbf{c}] \tag{17}$$

$$s.t. \quad \mathbf{c}' \Psi \mathbf{c} \leq L \tag{18}$$

$$\Psi^{(1)} \mathbf{c} \geq \mathbf{0} \tag{19}$$

where Ψ is an $n \times n$ representor matrix at the data points x_1, \dots, x_n , $\Psi^{(1)}$ is a matrix of first derivatives of the representors evaluated at the points x_1, \dots, x_n , \mathbf{y} is an $n \times 1$ vector of constants and $L > 0$.

Similarly we can define definite convexity or concavity.

5 Asymptotic behavior

Laws of large numbers and central limit theorems have been applied on our estimator and its derivatives, which leads into following Theorem 5.1 examined in [2].

Theorem 5.1 (LLN and CLT). *Given $\{(x_i, Y_i)\}_{i=1}^n$ where $Y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$, the ε_i are independently distributed and x_i are sampled from a discrete distribution whose support is X_1, \dots, X_k with probabilities π_1, \dots, π_k . Suppose that f lies strictly inside the ball of functions $\|f\|_{Sob,m}^2 < L$ and f is strictly increasing and strictly convex. Let $\bar{\mathbf{Y}}(\mathbf{X}) = (\bar{Y}_1(X_1), \dots, \bar{Y}_k(X_k))'$ be the k -dimensional vector of average observations at the k values. Let $\mathbf{\Pi}/n = \text{Var}(\bar{\mathbf{Y}}(\mathbf{X}))$ be the $k \times k$ diagonal matrix of variances of the point means estimators, i.e. $\Pi_{jj} = \sigma^2(X_j)/\pi_j$, $j = 1, \dots, k$. Then*

$$i) \quad \mathcal{P} \left[\widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{X}) = \bar{\mathbf{Y}}(\mathbf{X}) \right] \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \tag{20}$$

$$ii) \quad \widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{X}) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{P}} \mathbf{f}(\mathbf{X}), \tag{21}$$

$$iii) \quad \sqrt{n} \left(\widehat{\mathbf{f}}(\mathbf{X}) - \mathbf{f}(\mathbf{X}) \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \mathbf{\Pi}), \tag{22}$$

$$iv) \quad \sqrt{n} \left(\widehat{\mathbf{f}}^{(1)}(\mathbf{X}) - \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{X}) \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \Psi^{(1)} \Psi^{-1} \mathbf{\Pi} \Psi^{-1} \Psi^{(1)}), \tag{23}$$

$$v) \quad \sqrt{n} \left(\widehat{\mathbf{f}}^{(2)}(\mathbf{X}) - \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{X}) \right) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \Psi^{(2)} \Psi^{-1} \mathbf{\Pi} \Psi^{-1} \Psi^{(2)}). \tag{24}$$

Practical application of Theorem 5.1 combined with bootstrap techniques on DAX call options data is sketched in Figures 2 and 3 in and described in [3].

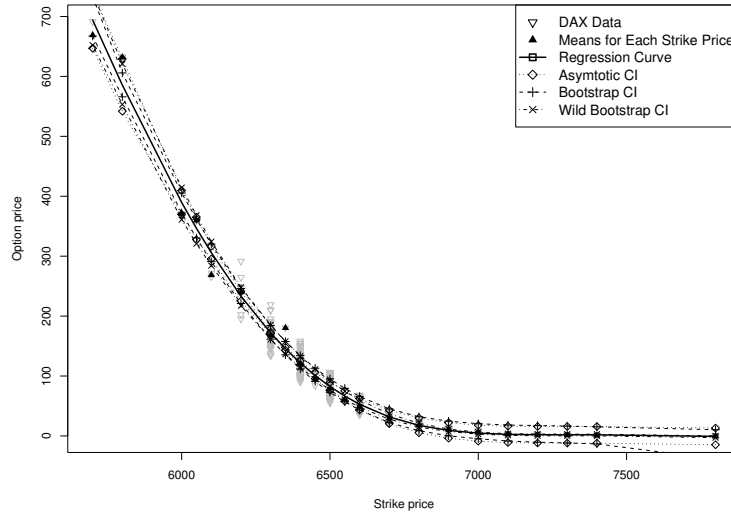


Figure 2: DAX call options data—monotonic (decreasing) and convex regression curve in \mathcal{H}^4 with various types of 95% confidence intervals.

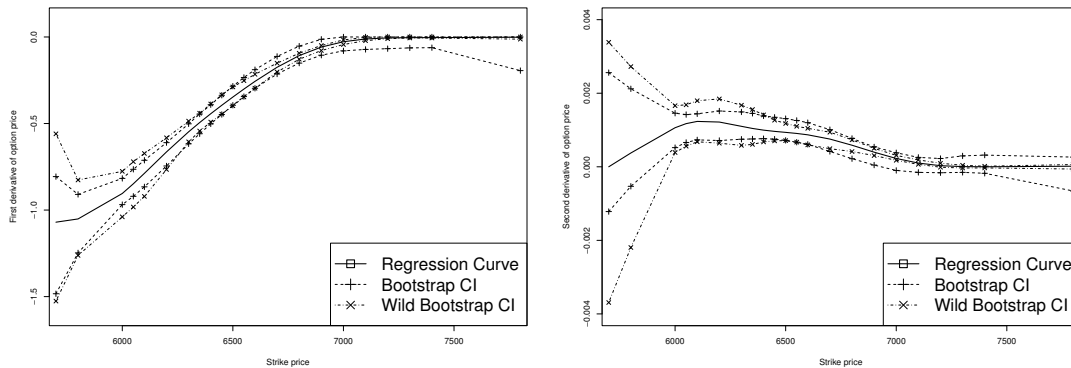


Figure 3: First and second derivative of DAX option price with bootstrap CI.

Reference

- [1] Yatchew A.J., Bos L. (1997). *Nonparametric least squares estimation and testing of economic models*. Journal of Quantitative Economics **13**, 81 – 131.
- [2] Yatchew A.J., Härdle W. (2003). *Nonparametric state price density estimation using constrained least squares and the bootstrap*. This is a full unpublished entry, Toronto University and Humboldt-Universität zu Berlin, <http://www.chass.utoronto.ca/~yatchew/>.
- [3] Peřta M. (2006). *Isotonic regression in Sobolev spaces*. Master Thesis, Charles University in Prague, <http://miso.matfyz.cz/studium/>.

Acknowledgement: I would like to express my thanks to my supervisor Mgr. Zdeněk Hlávka, Ph.D. for his generous support and help. I would also like to thank to Prof. RNDr. Jaromír Antoch, CSc. and an anonymous reviewer for their valuable comments. My attendance on Robust 2006 was supported by grant ČSOB.

Address: MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: michal.pesta@matfyz.cz

ODHAD NEURČITOSTI A SPOLEHLIVOSTI STANOVENÍ DIAGNÓZY

Zdeněk Půlpán, Michal Čihák

Keywords: Entropy and information for fuzzy sets, entropy for the diagnostic of disease.

Abstract: Two interesting methods of estimation of the diagnosis uncertainty. It's very important to estimate the measure of uncertainty of data in the case of diagnosis of disease. We recommend two methods with help fuzzy interpretation of disease data.

Abstrakt: V člancích autora [7], [8] byla navržena metoda odhadu množství informace, vedoucí k podezření na onemocnění jistou chorobou. Při tom bylo využito prostředků fuzzy matematiky. Zde bude ukázáno, jak lze podobnými prostředky stanovit neurčitost diagnózy z dat vágní povahy.

1 Úvod

Velké množství informací získává lékař jen díky své zkušenosti. Bylo tomu tak zvláště v minulosti, ale je tomu tak i dnes. Manuální vyšetřování pacienta, poslech funkce plic nebo srdce, posuzování různých reakcí (např. po poklepu kladívkem) i hodnocení výpovědi pacienta o potížích vedou k jistým rozhodnutím lékaře, které je poznamenáno neurčitostí vstupních informací. Uvedená neurčitost se může manifestovat v různých formách. Ty se často označují slovy jako fuzzy (neostrost, nejasnost), vágnost (nepřesnost, nekonkrétnost), mnohoznačnost, nepochopení, přirozená variabilita, ... [11]. Některé z neurčitostí nelze popsat klasickými statistickými prostředky, protože za určitých podmínek nejeví potřebnou stabilitu relativní četnosti nebo nelze do jejich popisu snadněji zahrnout důležitou lékařovu zkušenost. Ta je zvláště v medicíně oceňována; ani některé moderní technické diagnostické prostředky ji nejsou schopny překonat. Zde poukážeme na dvě speciální diagnostické metody, jejichž formální popis míry jejich užitku lze realizovat prostředky fuzzy.

V literatuře je popsáno mnoho různých metod kvantitativního popisu neurčitosti (např. [10], [11], [12]). V tomto příspěvku uvedeme dvě metody, které se opírají jen o články [1] a [9]. Autor se dlouhodobě zabývá odhadem neurčitosti v humanitních vědách, novou inspiraci získal spoluprací s Prof. MUDr. Jiřinou Martínkovou, CSc. z Lékařské fakulty v Hradci Králové [13].

Dvě zajímavé metody odhadu neurčitosti stanovení diagnózy

S neurčitostí se setkáváme již při posuzování souboru objektivně zjišťovaných dat, protože samotný proces posuzování má jistou neurčitost. Dokonce již prvotní data (získaná například z dotazníku) mají jistou neurčitost (vágnost, neostrost, ...). Neurčitost při posuzování, které je rozhodováním, ale i neurčitost v datech lze modelovat pomocí fuzzy množin. Ukážeme, jak lze míru neurčitosti odhadnout pomocí fuzzy entropie. Problém odhadu neurčitosti však nemá jednoznačné řešení.

V článku [8] jsme navrhli formální metodu odhadu množství informace, vedoucí k podezření na onemocnění jistou chorobou. Využili jsme při tom prostředků fuzzy matematiky. Zde ukážeme, jak lze podobnými prostředky (viz také [7], resp. [6], [5], [4]) stanovit neurčitost diagnózy. Na příkladech odhadu míry únavy a pak i bolesti demonstrujeme stanovení podkladů pro diagnózu z hodnot souboru subjektivně posuzovaných relevantních proměnných. Subjektivitu odhadovaných proměnných modelujeme fuzzy množinou, která je základem pro vytvoření fuzzy matematického modelu odhadu neurčitosti a také informace.

Pod fuzzy množinou \underline{A} na základní n -prvkové množině Z_n

$$Z_n = \{z_1, z_2, \dots, z_n\}$$

rozumíme zobrazení $\mu_A : Z_n \rightarrow \langle 0; 1 \rangle$. Zobrazení μ_A se nazývá věrohodnostní funkce. Pro zápis fuzzy množiny \underline{A} , definované na Z_n , užíváme také vyjádření

$$\underline{A} = \{z_1|\mu_1, z_2|\mu_2, \dots, z_n|\mu_n\},$$

kde $\mu(z_i) = \mu_i, i = 1, 2, \dots, n$.

Míru neurčitosti, obsaženou ve fuzzy množině \underline{A} , nazýváme fuzzy entropií. Reprezentuje-li například fuzzy množina \underline{A} nepřesnost jistého měření na škále Z_n , je fuzzy entropie $H(\underline{A})$ fuzzy množiny \underline{A} mírou neidentifikovanosti, nedefinovanosti, ... uvedeného měření. Fuzzy entropii $H(\underline{A})$, odpovídající fuzzy množině \underline{A} , můžeme definovat různým způsobem (4). Obecně se však požaduje, aby $H(\underline{A})$ splňovala následující podmínky:

- $H(\underline{A}) = 0$ právě když fuzzy množina \underline{A} reprezentuje ostrou množinu, tj. když $\mu_A(z_i) = 0$ nebo 1 pro $i = 1, 2, \dots, n$;
- $H(\underline{A})$ nabývá svého maxima, právě když fuzzy množina \underline{A} má „nejmenší ostrost“, tj. $\mu_A(z_i) = 0,5$ pro $i = 1, 2, \dots, n$;
- hodnoty $H(\underline{A})$ rostou s růstem „neostrosti“ fuzzy množiny \underline{A} , tj.

$$H(\underline{A}^*) \geq H(\underline{A}) \text{ když pro } \mu_{A^*} \text{ platí}$$

$$\text{je-li } \mu_{A^*}(z_i) \leq 0,5, \text{ pak } \mu_A(z_i) \leq \mu_{A^*}(z_i),$$

$$\text{je-li } \mu_{A^*}(z_i) > 0,5, \text{ pak } \mu_A(z_i) > \mu_{A^*}(z_i), z_i \in Z_n;$$

- d) pro fuzzy množinu $\overline{\underline{A}}$, jejíž věrohodnostní funkce $\mu_{\overline{\underline{A}}}(z_i) = 1 - \mu_A(z_i)$, $z_i \in Z_n$, platí $H(\overline{\underline{A}}) = H(\underline{A})$;
 e) jsou-li $\underline{A}, \underline{B}$ dvě fuzzy množiny na Z_n , pak

$$H(\underline{A} \cup \underline{B}) = H(\underline{A}) + H(\underline{B}) - H(\underline{A} \cap \underline{B}),$$

kde $\mu_{A \cup B}(z) = \max_{z \in Z_n}(\mu_A(z), \mu_B(z))$,

$$\mu_{A \cap B}(z) = \min_{z \in Z_n}(\mu_A(z), \mu_B(z)).$$

Jestliže entropie $H(\underline{A})$ splňuje všechny podmínky a) - e), nazývá se „dobrou mírou“ neurčitosti (podobně pak i pro informaci, vypočtenou z dobré míry neurčitosti, užíváme názvu „dobrá míra“ informace).

V práci Arora a kol. [1] je uveden příklad parametrizované entropie pro fuzzy množinu \underline{A} ve tvaru

$$H_\beta(\underline{A}) = K \cdot A_\beta \cdot \sum_{i=1}^n [(\mu_A^\beta(z_i) + (1 - \mu_A(z_i))^\beta - 1)], \quad (1)$$

kde $\beta > 0, \beta \neq 1, A_\beta = (2^{1-\beta} - 1)^{-1}, K > 0$ je normalizační konstanta (β je vhodný parametr, který specifikuje vlastnosti entropie). Entropie $H_\beta(\underline{A})$ má pro každé \underline{A} a libovolný přípustný parametr β vlastnosti a) až e).

Volbou normalizační konstanty K určíme jednotku entropie. Je výhodné spojovat volbu konstanty K s určitou interpretací stupnice neurčitosti. Ukážeme to na následujícím příkladě.

Příklad 1. Je-li $n = 3$ a fuzzy množina \underline{A} na Z_3 je

$$\underline{A} = \{z_1|1; z_2|0,3; z_3|0\},$$

pak

$$H_{0,5}(\underline{A}) = K \cdot (1 + \sqrt{2}) \cdot [0 + (\sqrt{0,3} + \sqrt{0,7} - 1) + 0] \doteq 0,928K.$$

Má-li být pro fuzzy množinu $\underline{B} = \{z_1|0,5; z_2|0,5; z_3|0,5\}$ hodnota (největší) neurčitosti rovna 100, musí platit

$$H_{0,5}(\underline{B}) = K \cdot (1 + \sqrt{2}) \cdot 3 \cdot [\sqrt{0,5} + \sqrt{0,5} - 1] = 3K = 100.$$

Z toho je vidět, že konstanta K musí být rovna $100/3$. Pak pro neurčitost $H_{0,5}(\underline{A})$ v uvedených jednotkách máme $H_{0,5}(\underline{A}) \doteq 0,928 \cdot \frac{100}{3} \doteq 30,93$. \square

K entropiím, které jsou jednoduše konstruovány z věrohodnostní funkce příslušné fuzzy množiny \underline{A} na Z_n , patří $H_P(\underline{A})$. Ta je definovaná vztahem (2):

$$\begin{aligned}
H_P(\underset{\sim}{\mathbf{A}}) &= 2L \cdot \sum_{i=1}^n [1 - \max(\mu_A(z_i), 1 - \mu_A(z_i))] = \\
&= 2L \cdot \sum_{i=1}^n \min(\mu_A(z_i), 1 - \mu_A(z_i)), \tag{2}
\end{aligned}$$

kde $L > 0$ je normalizační konstanta (kterou zde často volíme rovnu jedné). Snadno ověříme, že entropie $H_P(\underset{\sim}{\mathbf{A}})$ splňuje také podmínky a) až e).

Příklad 2. Pro fuzzy množinu $\underset{\sim}{\mathbf{A}}$ z předchozího příkladu máme podle (2)

$$H_P(\underset{\sim}{\mathbf{A}}) = 2L \cdot [0 + 0,3 + 0] = 0,6 \cdot L.$$

Volíme-li pro fuzzy množinu $\underset{\sim}{\mathbf{B}}$ (z příkladu 1) entropii rovnu opět 100, musí platit

$$H_P(\underset{\sim}{\mathbf{B}}) = 2L \cdot [3 \cdot 0,5] = 3L = 100$$

a tedy $L = \frac{100}{3}$. Pro entropii $H_P(\underset{\sim}{\mathbf{A}})$ pak ale máme ve zde zavedených jednotkách vzhledem ke vztahu (2)

$$H_P(\underset{\sim}{\mathbf{A}}) = 0,6 \cdot \frac{100}{3} = 20.$$

□

Stupnice pro neurčitost je určena nejen volbou některého ze vztahů (1) nebo (2), ale také stanovením normalizačních konstant. Konkrétní volba stupnice závisí na povaze modelovaného problému; je tedy otázkou zkušenosti aplikace. Přitom je důležitá její „schopnost“ dobře zachytit významné momenty modelovaného jevu.

Fuzzy informaci můžeme určit odečtením příslušné fuzzy entropie od její maximální možné hodnoty. Tak například pro fuzzy entropii definovanou vztahem (1) se příslušná fuzzy informace $I_\beta(\underset{\sim}{\mathbf{A}})$ určí podle vztahu (3)

$$I_\beta(\underset{\sim}{\mathbf{A}}) = H_{0,5}^{\max} - H_\beta(\underset{\sim}{\mathbf{A}}) = n \cdot K - H_\beta(\underset{\sim}{\mathbf{A}}) \tag{3}$$

a pro fuzzy entropii (2) je odpovídající fuzzy informace dána vztahem (4)

$$I_P(\underset{\sim}{\mathbf{A}}) = n \cdot L - H_P(\underset{\sim}{\mathbf{A}}). \tag{4}$$

Aplikace

Uvedeme některé příklady aplikace vztahů (1) a (2) v medicínském výzkumu na nichž se autor přímo podílel. Podrobněji se o experimentech čtenář dozví v medicínské literatuře [7], [8], [13].

Příklad 3. V práci [7] je publikován dotazník subjektivních pocitů únavy (SPU). Ten se skládá z 32 položek, u nichž má respondent označit sílu (úroveň) příslušného pocitu čísly 0 - žádný, 1 - mírný, 2 - silný.

Ukažme si nejprve, jak lze pro každou z 32 položek stanovit příslušnou fuzzy neurčitost. Pro každou položku máme $n = 3$ úrovně odpovědí, označených postupně $z_1 = 0$, $z_2 = 1$, $z_3 = 2$.

Míru věrohodnosti $\mu_A(z_i)$ můžeme pak odhadnout relativními četnostmi z jisté aplikace uvedeného dotazníku v homogenní skupině respondentů za standardních podmínek:

$$\mu(z_i) \sim \frac{m_i}{N}, \quad (5)$$

kde m_i je četnost těch respondentů z celkového počtu N , kteří označili sílu svého pocitu znakem z_i . Celkovou neurčitost pak považujeme za prostý součet neurčitostí jednotlivých položek. Podobně i celkovou informaci určíme jako součet informací všech položek. Výslednou fuzzy neurčitost pak můžeme interpretovat jako neurčitost identifikace pocitu únavy uvedeným způsobem. Fuzzy informace pak je mírou informace, získané z dotazníkových odpovědí. \square

Příklad 4. Předpokládejme, že jistá nemoc je charakterizována pěti proměnnými: 1. věk, 2. teplota, 3. dušnost, 4. kašel, 5. nález na plicích (viz Půlpán v [8]). Z uvedených proměnných první dvě se určí přesně, nemají proto žádnou neurčitost. U zbývajících proměnných předpokládáme (zde pro jednoduchost), že jsou kategorizovány jen ve třech úrovních z_1, z_2, z_3 (s interpretacemi například z_1 - bez příznaku, z_2 - středně silný, z_3 - silný), představují tedy fuzzy množiny $\underset{\sim}{A}_3, \underset{\sim}{A}_4, \underset{\sim}{A}_5$ ve tvaru

$$\underset{\sim}{A}_j = \{z_1|\mu_j(z_1), z_2|\mu_j(z_2), z_3|\mu_j(z_3)\}, \quad j = 3, 4, 5. \quad (6)$$

Hodnoty $\mu_j(z_i) \in \langle 0; 1 \rangle$ jsou měrami přesvědčivosti o správném stanovení úrovně diagnózy z_i u j -tého příznaku (proměnné). Hodnotu $\mu_j(z_i)$ je možné určit buď jen na základě prostého přiznání toho, kdo diagnózu stanovoval, nebo z expertních odhadů několika kvalifikovaných posuzovatelů. Pro každé j stanovíme neurčitost $H(\underset{\sim}{A}_j)$. Celková neurčitost diagnózy je pak

součet $H = \sum_{j=3}^5 H(\underset{\sim}{A}_j)$. Kvalitu dat z hlediska jejich přesnosti můžeme pak posoudit z relativního ukazatele δ ze (7)

$$\delta = \frac{H}{H_{\max}}; \quad \delta \in \langle 0; 1 \rangle, \quad (7)$$

kde H_{\max} je celková maximální entropie (stanovená vzhledem k použitému vztahu (1) nebo (2) pro určování $H(\underset{\sim}{A}_j)$). Čím je hodnota ukazatele bližší 1, tím nepřesnější údaje máme.

Ilustrujme ještě uvedenou situaci podrobněji numericky. Předpokládejme, že $\underset{\sim}{A}_3 = \underset{\sim}{A}$, $\underset{\sim}{A}_4 = \underset{\sim}{B}$ (z příkladu 1 a 2) a že $\underset{\sim}{A}_5 = \{z_1|0, z_2|0, z_3|1\}$.

Použijeme-li vztahu (1) při $\beta = 0,5$ a $K = \frac{100}{3}$, máme

$$H_{0,5}(\underset{\sim}{A}_1) = H_{0,5}(\underset{\sim}{A}_2) = 0$$

$$H_{0,5}(\underset{\sim}{A}_3) = H_{0,5}(\underset{\sim}{A}) = 30,93$$

$$H_{0,5}(\underset{\sim}{A}_4) = H_{0,5}(\underset{\sim}{B}) = 100$$

$$H_{0,5}(\underset{\sim}{A}_5) = \frac{100}{3} \cdot (1 + \sqrt{2}) \cdot [0 + 0 + 0] = 0.$$

Celková neurčitost diagnózy za předpokladu stejné důležitosti charakteristik 1 - 5 je $H^1 = 0 + 0 + 30,93 + 100 + 0 = 130,93$.

Kvalita dat z hlediska jejich přesnosti je podle (7)

$$\delta^1 = \frac{130,93}{500} \doteq 0,26.$$

Použijeme-li vztahu (2) při $L = \frac{100}{3}$, máme

$$H_P(\underset{\sim}{A}_1) = H_P(\underset{\sim}{A}_2) = H_P(\underset{\sim}{A}_5) = 0$$

$$H_P(\underset{\sim}{A}_3) = H_P(\underset{\sim}{A}) = 20$$

$$H_P(\underset{\sim}{A}_4) = H_P(\underset{\sim}{B}) = 100.$$

Celková neurčitost diagnózy je v uvedeném případě a opět za předpokladu rovnocennosti charakteristik $H^2 = 0 + 0 + 20 + 100 + 0 = 120$.

Kvalita dat posuzovaných na uvedené škále z hlediska jejich přesnosti je podle (7)

$$\delta^2 = \frac{120}{500} = 0,24.$$

□

Máme tedy dva možné ukazatele kvality dat: δ^1, δ^2 . První ukazatel byl založen na entropii (1) pro $\beta = 0,5$, druhý na entropii (2). Definice entropie (1) představuje nekonečně možností, které odpovídají určité volbě $\beta > 0, \beta \neq 1$. Protože oba uvedené typy entropií jsou „dobrymi měrami“ ve smyslu podmínek a) - e) z úvodu tohoto článku, lze se domnívat, že mohou být použity i v medicíně (když (2) bylo úspěšně použito autorem v psychologii), jak zkráceně ukazují následující příklady (podrobněji o okolnostech pokusu je v [13]). Aplikace je v začátcích, proto o míře „vhodnosti“ některého ze vztahů (1) nebo (2) v dané konkrétní situaci popsaného experimentu se nelze zatím vyjádřit.

Poznámka: V případě, že charakteristiky nemoci nejsou stejné důležitosti, je třeba jejich relativní význam odhadnout (opět třeba „expertně“) nezápornými vahami v_1, v_2, \dots, v_5 tak, že $\sum_{i=1}^5 v_i = 1$ ([4]). Celkovou neurčitost H pak určíme váženým součtem $H = v_1 \cdot H(\underset{\sim}{A}_1) + v_2 \cdot H(\underset{\sim}{A}_2) + \dots + v_5 \cdot H(\underset{\sim}{A}_5)$. □

Odhad spolehlivosti měření

V tomto odstavci ukážeme, jak lze pomocí míry neurčitosti, která může nabývat jen hodnoty v konečných mezích, odhadovat spolehlivost měření.

Současně také předvedeme i poněkud neobvyklé užití Spearman - Brownova vzorce pro výpočet spolehlivosti měření realizovaného různými nezávislými hodnotiteli.

Spearman - Brownův vzorec se používá k odhadu spolehlivosti pedagogicko-psychologických testů. Tedy k odhadu spolehlivosti jediného měřícího prostředku na základě (průměrné) vzájemné korelace jeho (předpokládáme ekvivalentních) podčástí. Zde využijeme průměrné (Pearsonovy) korelace výsledků mezi n hodnotiteli téhož jevu „vyjádření mimiky“ v různých časech. Výslednou hodnotu pak interpretujeme jako míru spolehlivosti odhadu úrovně „vyjádření mimiky“ podle dané škálové předlohy 1 ([6], vzorec (1. 88))

Příklad 5. Jistému novorozenci byl podáván *tramadol* (je to analgetikum, nový lék, jehož účinky se měly v našich podmínkách důkladně prověřit). Účinek tramadolu na změnu pacientova pocitu bolesti byl posuzován tak, že výraz jeho obličeje byl v určité časové posloupnosti porovnáván se čtyřmi ikonickými výrazy mimiky obličeje zobrazující bolest. Ikonické výrazy byly seřazeny do posloupnosti, aby reprezentovaly vzrůstající míru manifestované bolesti prostřednictvím charakteristických znaků obličejové mimiky. Každý ze čtyř ikonických výrazů obličeje byl porovnáván s aktuálním výrazem obličeje pacienta. Číslice, odpovídající nejlépe ikoně, jejíž výraz se podobá pacientovi, byla považována za odhad manifestní „míry“ bolesti.

V následující tabulce 1 jsou uvedena nezávislá hodnocení míry bolesti našeho pacienta pěti hodnotiteli v diskrétních časových okamžicích po začátku podávání tramadolu.

Posuzovatel	Okamžik sledování [h]							
	0	1	2	4	6	8	10	12
1.	3	2	2	0	0	0	0	0
2.	3	3	2	1	0	0	0	0
3.	3	2	1	1	1	0	0	0
4.	2	2	2	1	0	0	0	0
5.	3	2	2	0	0	0	0	0

Tabulka 1: Odhady míry bolesti pěti hodnotiteli.

Protože uvedené „měření“ je velmi subjektivní, byl nejprve proveden odhad celkové spolehlivosti měření na srovnávací vizuální škále bolesti a pak i odhady spolehlivosti měření v určitých místech vizuální škály.

a) Z tabulky 1 odhadů míry bolesti byly stanoveny vzájemné výběrové korelace mezi hodnoceními hodnotitelů, které jsou uvedeny v tabulce 2.

Všechny korelace z tabulky 2 jsou statisticky významné na 5 % hladině významnosti. Jejich průměrná hodnota je $\bar{r} = 0,927$. Spearman-Brownův vzorec (viz vzorec (1.88) z [5]) odhaduje z uvedených vzájemných korelací celkovou

Hodnotitel	1	2	3	4	5
1.	1	0,94	0,86	0,96	1,00
2.		1	0,89	0,97	0,94
3.			1	0,89	0,86
4.				1	0,96
5.					1

Tabulka 2: Korelace mezi výsledky hodnotitelů.

spolehlivost měření S ve tvaru

$$S = \frac{n \cdot \bar{r}}{1 + (n - 1)\bar{r}}, \quad (8)$$

kde n je zde počet hodnotitelů ($n = 5$); po dosazení dostaneme pro spolehlivost hodnotu

$$S = \frac{5 \cdot 0,927}{1 + 4 \cdot 0,927} = 0,984.$$

Protože nejvyšší možná spolehlivost je 1, mělo uvedené odhadování takto stanovenou vysokou spolehlivost.

Spolehlivost uvedeného „měření“ bychom měli určovat porovnáním i u více novorozenců. Ke zkoumání bylo k dispozici celkem pět novorozenců u nichž výsledky byly obdobné.

Autor si uvědomuje problematičnost použití Pearsonova korelačního koeficientu v případě, že není zaručena normalita rozložení. Použití vztahu (8) by mělo být ještě kontrolováno i jinou technikou odhadu „spolehlivosti“.

b) Vyjdeme z toho, že *větší* neurčitost měření znamená *menší* spolehlivost měření. Odhadujeme proto spolehlivost měření na doplňku hodnot na škále neurčitosti.

Neurčitost jsme odhadovali prostřednictvím fuzzy množin podle (1), resp. (2). Vizualní odhady škálových hodnot modelujeme fuzzy množinami na čtyřprvkové množině normativních obrázků, které jsme označili čísly 0, 1, 2, 3. Uvedená čísla jsou také hodnotami škály „bolesti“ v interpretaci

- „0“ bez bolesti
- „1“ mírná bolest
- „2“ bolest
- „3“ velká bolest.

Tabulka 1 popisuje, že v časových okamžicích 0, 1, 2, 4, 6, 8, 10, 12 [h] byl proveden současně (avšak nezávisle) pěti hodnotiteli odhad míry bolesti porovnáním mimiky respondenta se standardy škálových ikon. Z relativních četností výsledků těchto odhadů byly pro každý uvažovaný časový okamžik t stanoveny fuzzy množiny $\underline{A}(t)$, reprezentující neurčitost odhadu pomocí vztahů (1), resp. (2). Výsledky jsou obsaženy v následující tabulce 3.

	relativní četnosti odpovídající hod- notám škály [h]				neurčitosti		spolehlivosti	
	0	1	2	3	$H_{0,5}$	H_P	$S_{0,5}$	S_P
$\underline{\underline{A}}(0)$	0	0	0,2	0,8	41,2	20	58,8	80
$\underline{\underline{A}}(1)$	0	0	0,8	0,2	41,2	20	58,8	80
$\underline{\underline{A}}(2)$	0	0,2	0,8	0	41,2	20	58,8	80
$\underline{\underline{A}}(4)$	0,4	0,6	0	0	49,1	40	50,9	60
$\underline{\underline{A}}(6)$	0,8	0,2	0	0	41,2	20	58,8	80
$\underline{\underline{A}}(8), \underline{\underline{A}}(10), \underline{\underline{A}}(12)$	1	0	0	0	0	0	100,0	100

Tabulka 3: Neurčitosti fuzzy množin měření v různých časových okamžicích.

Pro odhad neurčitosti podle vztahu (1) máme $n = 4$ a když volíme $\beta = 0,5$ a maximální neurčitost 100, platí

$$K^* = K \cdot A_{0,5} = \frac{100}{4(2 \cdot \sqrt{0,5} - 1)} \doteq 60,35.$$

Pro $\underline{\underline{A}}(0)$ tak například dostáváme

$$H_{0,5}(\underline{\underline{A}}(0)) = 60,35 \cdot [(\sqrt{0} + \sqrt{1} - 1) \cdot 2 + (\sqrt{0,2} + \sqrt{0,8} - 1) \cdot 2] = 41,24$$

$$H_{0,5}(\underline{\underline{A}}(0)) = H_{0,5}(\underline{\underline{A}}(1)) = H_{0,5}(\underline{\underline{A}}(2)) = H_{0,5}(\underline{\underline{A}}(6))$$

$$H_{0,5}(\underline{\underline{A}}(4)) = 60,35 \cdot [\sqrt{0,4} + \sqrt{0,6} - 1] \cdot 2 = 49,13.$$

Pro odhad neurčitosti podle (2) máme při $n = 4$ a volbě maximální neurčitosti opět 100, podmínku pro konstantu L :

$$2L \cdot 4 \cdot 0,5 = 100 \text{ a tedy } L = 25.$$

Proto například pro $\underline{\underline{A}}(0)$ podle (2) dostáváme pro neurčitost odhady

$$H_P(\underline{\underline{A}}(0)) = 50 \cdot [0,2 + 0,2] = 20$$

$$H_P(\underline{\underline{A}}(4)) = 50 \cdot [0,4 + 0,4] = 40.$$

Za odhad spolehlivosti měření v časových okamžicích $t = 0, 1, 2, 4, 6, 8, 10, 12$ [h] pak můžeme volit vzhledem k zavedené neurčitosti $H_{0,5}$, resp. H_P , míru

$$S_{0,5}(\underline{\underline{A}}(t)) = 100 - H_{0,5}(A(t)), \text{ resp. } S_P(A(t)) = 100 - H_P(A(t)). \quad (9)$$

Z tabulky 3 je vidět, že vzhledem k neurčitosti $H_{0,5}$ se spolehlivost $S_{0,5}$ pohybuje kolem 60 a spolehlivost S_P mezi 60 - 80 (míra spolehlivosti $S_{0,5}$ je „přísnější“). Lze proto označit uvedený vizuální odhad bolesti (stejně kvalifikovaným hodnotitelem jako byli ti zkušební) za spolehlivý. Hodnocení bolesti diskutovanou metodou lze realizovat proto i jediným hodnotitelem. (Intuitivně však soudíme, že je to způsobeno malou citlivostí tohoto měření.) \square

Reference

- [1] Arora H., Petry F., Beaubouef T. (1997). *New information measures for fuzzy sets*. IFSA'97 Prague, **IV**, 75–78.
- [2] Půlpán Z. (2000). *Informoj por svaga aro en starigo de diagnozoj de malsanoj*. Grkg/Humankybernetik **41**, 4, 167–176.
- [3] Půlpán Z. (1990). *Fuzzy - pragmatische information*. Grkg/Humankybernetik **31**, 3, 123–132.
- [4] Půlpán Z. (1997). *K problematice vágnosti v humanitních vědách*. Praha, Academia, 151 p.
- [5] Půlpán Z. (2001). *K problematice hledání podstatného v humanitních vědách*. Praha, Academia, 135 p.
- [6] Půlpán Z. (2004). *K problematice zpracování empirických šetření v humanitních vědách*. Praha, Academia, 182 p.
- [7] Půlpán Z. (2002). *Únava jako funkce času*. Acta Medica (Hradec Král.) **45**, 2, 89–98.
- [8] Půlpán Z. (2000). *Informace pro fuzzy množiny v diagnostice nemocí*. Acta Medica (Hradec Král.) **43**, 1, 7–12.
- [9] Půlpán Z. (1986). *Některé možnosti aplikace teorie fuzzy množin v psychologickém výzkumu*. Československá psychologie **XXX**, 1, 68–79.
- [10] Vajda I. (1982). *Teória informácie a štatistického rozhodovania*. Alfa, Bratislava, 335.
- [11] Ross T.J. (2005). *Fuzzy logic*. Wiley, England, 2. ed.
- [12] Klir G., Folger T. (1988). *Fuzzy sets, uncertainty and information*. Prentice Hall, Englewood, Clifs, NJ.
- [13] Martínková J. (2006). *Analezie u novorozenců modelem pro vysokoškolskou výuku lékařské farmakologie*. Závěrečná zpráva, LF UK Hradec Králové, 38 p.

Address: Z. Půlpán, M. Čihák, Univerzita Hradec Králové, Pedagogická fakulta, Katedra matematiky, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové

E-mail: zdenek.pulpan@uhk.cz

ITERATIVE METHODS FOR CALCULATION OF STATIONARY DENSITY IN SOME AUTOREGRESSIVE MODELS

Pavel Ranocha

Keywords: Time series, stationary distribution, autoregressive processes.

Abstract: The paper deals with methods of calculating the stationary density in some autoregressive models of time series. Exact solution of this problem is known in only few special cases. We study algorithms which approximate such solution.

For AR(1) model we describe a method of Anděl and Hrach [2] and show that under some conditions its speed of convergence is exponential. Further we briefly review an algorithm proposed by Haiman [6] and generalized by Anděl et al. [3]. It investigates the limit behavior of sequences $\eta_1 + \rho\eta_2 + \rho^2\eta_3 + \dots + \rho^n\eta_{n+1}$, where η_i are iid random variables and $\rho \in (-1, 1)$.

In the final part we apply these results to the problem of computing the stationary density in nonlinear model of absolute autoregression AAR(1).

1 Introduction

Let $\{X_n, n \in \mathbb{N}_0\}$ be an AR(1) process defined by

$$X_{n+1} = \rho X_n + \eta_{n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

where $\rho \in (-1, 1)$ and $\{\eta_n, n \in \mathbb{N}\}$ are i.i.d. random variables, independent of X_0 . The task is to find the stationary distribution of process $\{X_n, n \in \mathbb{N}_0\}$.

Even in this simple model, the exact solution is difficult to derive. Suppose that η_n has a density $f(x)$ with respect to Lebesgue measure. Then X_t has a stationary density $h(x)$ which satisfies the integral equation

$$h(x) = \int f(x - \rho u)h(u) du. \quad (2)$$

For a general non-linear AR(1) model

$$X_{n+1} = g(X_n) + \eta_{n+1},$$

the problem is even more complicated and it has been solved only in a few special cases. One of them is the absolute autoregression

$$X_{n+1} = a|X_n| + \eta_{n+1},$$

for which an analytic solution was computed by Anděl et al. [4] if $\eta_n \sim \mathbf{N}(0,1)$, by Anděl and Bartoň [1] for η_n having Cauchy distribution and by Anděl and

Ranocha [5] for η_n with Laplace and discrete rectangular distribution. See also Tong [8], p. 140. Loges [7] derived an explicit form of the stationary marginal density of a threshold TAR(1) process

$$X_{n+1} = \begin{cases} \alpha X_n + \eta_{n+1} & \text{if } X_n \geq 0 \\ \beta X_n + \eta_{n+1} & \text{if } X_n < 0 \end{cases}$$

where the noise process η_n has Laplace distribution.

2 Algorithm of Anděl and Hrach

Now, consider again the AR(1) model (1) and equation (2). As we mentioned above, an explicit formula for h satisfying (2) given f is known only in a few cases. Anděl and Hrach [2] proposed an iterative method for its computation. Let h_0 be an arbitrary density. For $n \geq 1$ they defined

$$h_n(x) = \int f(x - \rho u) h_{n-1}(u) du \quad (3)$$

and proved the following result.

Theorem 2.1. *Let h_0 be a density. Define h_n by (3). Assume that there exists an integer $m \geq 0$ such that*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(t)\psi(\rho t) \cdots \psi(\rho^m t)| dt < \infty, \quad (4)$$

where $\psi(t)$ is the characteristic function corresponding to f . Then $h_n(x) \rightarrow h(x)$ for all x as $n \rightarrow \infty$.

Now, we will show that under some rather mild conditions, the speed of convergence is exponential.

Definition 2.1. *Let \mathcal{S} be a system of functions $f \in L^1(\mathbb{R})$ for which there exist numbers $-\infty = a_{-1} < a_0 < a_1 < \cdots < a_r < a_{r+1} = \infty$, $r \in \mathbb{N}$, such that*

1. *function f is absolutely continuous on (a_{j-1}, a_j) , $j = 0, \dots, r + 1$;*
2. *$f' \in L^1(\mathbb{R})$.*

Then \mathcal{S} is called a system of piecewise smooth functions.

Theorem 2.2. *Let $f \in \mathcal{S}$. Let ψ be the characteristic function corresponding to f . Then there exists number $b > 0$ such that*

$$|\psi(t)| \leq \frac{b}{1 + |t|}, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Důkaz. See Anděl et al. [3]. □

Theorem 2.3. *Let $\{X_n\}$ be the AR(1) process (1) with η_1 such that $E|\eta_1| < \infty$. Further, let the density f of η_1 be piecewise smooth. Let $h_0 = f$. Then $h_n(x) \rightarrow h(x)$ uniformly as $n \rightarrow \infty$ and*

$$|h_{n+1} - h(x)| \leq K \frac{\ln|\rho|}{(\rho^2 - 1)(1 - |\rho|)} |\rho|^n$$

for some $K \in \mathbb{R}$, independent of ρ .

Důkaz. Since f is piecewise smooth, Theorem 2.2 yields

$$|\psi(\rho^k t)| \leq \frac{b}{1 + |\rho^k t|} \tag{5}$$

for every $k = 0, 1, 2, \dots$ and some $b \in \mathbb{R}$. The condition (4) is fulfilled for $m = 1$ since

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(t)\psi(\rho t)| dt \leq \int_{\mathbb{R}} \frac{b^2}{(1 + |t|)(1 + |\rho t|)} dt < \infty$$

and therefore $h_n(x) \rightarrow h(x)$ pointwise as $n \rightarrow \infty$.

Let λ_n denote the characteristic function corresponding to h_n . It is easy to show that

$$\lambda_n(t) = \psi(t)\psi(\rho t)\psi(\rho^2 t) \cdots \psi(\rho^n t).$$

Thus, for $n \geq 2$ we have

$$\begin{aligned} |h_{n+1}(x) - h_n(x)| &= \left| \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-itx} \lambda_{n+1}(t) dt - \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-itx} \lambda_n(t) dt \right| \\ &= \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}} e^{-itx} [\lambda_{n+1}(t) - \lambda_n(t)] dt \right| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} |\lambda_{n+1}(t) - \lambda_n(t)| dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \left| \left[\prod_{j=0}^n \psi(\rho^j t) \right] [\psi(\rho^{n+1} t) - 1] \right| dt \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} |\psi(t)| \cdot |\psi(\rho t)| \cdot |\psi(\rho^2 t)| \cdot |\psi(\rho^{n+1} t) - 1| dt. \tag{6} \end{aligned}$$

Further,

$$\left| \frac{\partial}{\partial t} [e^{itx} f(x)] \right| = |x| f(x) \in L^1(\mathbb{R})$$

(because of finiteness of the first absolute moment of η_1). Therefore $\psi(t) = \int e^{itx} f(x) dx$ is differentiable and thus Lipschitz with some constant, say L .

This implies that $|\psi(t) - 1|$ is Lipschitz with the same constant since $||x| - |y|| \leq |x - y|$ for any x, y . Using this fact at point 0, we get

$$|\psi(\rho^{n+1}t) - 1| \leq L|\rho^{n+1}t|. \tag{7}$$

Combination of (6), (5) and (7) gives

$$\begin{aligned} |h_{n+1}(x) - h_n(x)| &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{b}{1 + |t|} \cdot \frac{b}{1 + |\rho t|} \cdot \frac{b}{1 + |\rho^2 t|} \cdot L|\rho^{n+1}t| dt \\ &= \frac{b^3 L|\rho|^{n+1}}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{|t|}{(1 + |t|)(1 + |\rho t|)(1 + |\rho^2 t|)} dt \\ &= \frac{b^3 L|\rho|^{n+1}}{2\pi} \cdot 2 \frac{\ln \rho^2(1 - |\rho|) + \ln |\rho|(\rho^2 - 1)}{2(\rho^2 - \rho^4) + |\rho|(\rho^4 - 1)} \\ &= \frac{b^3 L|\rho|^{n+1}}{\pi} \cdot \frac{\ln |\rho|}{|\rho|(\rho^2 - 1)} \end{aligned}$$

Finally,

$$|h_n(x) - h(x)| \leq \sum_{k=n}^{\infty} |h_k(x) - h_{k+1}(x)| \leq \frac{b^3 L}{\pi} \cdot \frac{\ln |\rho|}{(\rho^2 - 1)(1 - |\rho|)} \cdot |\rho|^n.$$

Choosing $K = b^3 L/\pi$ completes the proof. □

This algorithm was extended to an AR(2) model and a multidimensional AR(1) model. In both situations, assertions on the pointwise convergence were proved, see Anděl and Hrach [2] and Anděl et al. [3], respectively. It still remains to derive results regarding the actual speed of convergence.

3 Haiman’s procedure

Consider again an AR(1) process (1) with $\rho \in (0, 1)$. Suppose that η_n has a density $f(x)$ with respect to Lebesgue measure and its support $\text{spt } f = \text{cl} \{x : f(x) > 0\}$ is a compact subset of the interval $[0, 1]$. Further, assume that the derivative $f'(x)$ exists for every $x \in [0, 1]$ and $\sup_{x \in (0,1)} |f'(x)| \leq D$ for some constant $D \in \mathbb{R}$.

It is obvious that the stationary distribution of $\{X_n\}$ defined by (1) is the same as that of the random variable $\sum_{i=1}^{\infty} \eta_i \rho^{i-1}$. Consider the sequence of partial sums $Y_n = \eta_1 + \rho \eta_2 + \dots + \rho^n \eta_{n+1}$, $n \geq 1$. Let $h_n(u)$ denote the density of Y_n and define $h_0(u) = f(u)$. Haiman [6] proved the following theorem.

Theorem 3.1. *Under the above assumptions, the stationary distribution of $\{X_n, n \in \mathbb{N}\}$ has a density $h(x)$ with $\text{spt } h \subseteq [0, 1/(1 - \rho)]$ such that $h \in C^\infty$. Furthermore, we have, for $n \geq 1$,*

$$\sup_{0 \leq x \leq 1/(1-\rho)} |h_n(x) - h(x)| \leq \frac{D\rho^{n+1}}{1 - \rho}. \tag{8}$$

Remark 3.1. *The author introduced factor 2 on the right hand side of the last inequality, which is not necessary.*

This theorem gives not only the convergence of sequence $h_n(x)$ to the stationary density $h(x)$, but the speed of convergence, which is geometrical, as well. On the other hand, its assumptions are quite strong and most of widely used distributions do not satisfy them.

However, several of the assumptions mentioned above were relaxed significantly, namely the finiteness of the support of density f , existence of derivative, its boundedness and positivity of parameter ρ .

Theorem 3.2. *Let $\{X_n, n \geq 0\}$ be an AR(1) process (1) with $\rho \in (-1, 1)$. Let η_n has a piecewise smooth density $f(x)$ such that $E|\eta_1| < \infty$. Then the stationary distribution of $\{X_n\}$ has a density $h \in C^\infty$ and for $n \geq 2$ we have*

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |h_n(x) - h(x)| \leq \frac{D|\rho^{n+1}|E|\eta_1|}{1 - |\rho|}$$

where $D = \sup_x |h'_2(x)| < \infty$.

Důkaz. See Anděl et al. [3]. □

4 Absolute autoregression

Let $\{X_n, n \in \mathbb{N}_0\}$ be an AAR(1) process defined by

$$X_{n+1} = a|X_n| + \eta_{n+1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \tag{9}$$

where $a \in (-1, 1)$ and $\{\eta_n, n \in \mathbb{N}\}$ are i.i.d. random variables. Suppose that η_n has a density $f(x)$ which is symmetrical around zero. Let g be the stationary density of AR(1) process ξ_n given by

$$\xi_n = a\xi_{n-1} + \eta_n.$$

Tong [8] (p. 140) showed that the stationary density of X_n in (9) is

$$h(y) = 2 \int_0^\infty g(x)f(y - ax)dx.$$

Density g is usually unknown, but we can use its approximation. Let $\{g_n(x)\}$ be the sequence of densities obtained by the algorithm described in Section 2. We proved that under some conditions

$$|g_n(x) - g(x)| \leq M|a|^n$$

for some constant M . Let these conditions hold again. Define

$$h_n(y) = 2 \int_0^\infty g_n(x)f(y - \rho x)dx. \tag{10}$$

Then we have

$$\begin{aligned}
 |h_n(y) - h(y)| &= 2 \left| \int_0^\infty [g_n(x) - g(x)] f(y - ax) \, dx \right| \\
 &\leq 2 \int_0^\infty |g_n(x) - g(x)| f(y - ax) \, dx \\
 &\leq 2M|a|^n \int_0^\infty f(y - ax) \, dx \\
 &\leq 2M|a|^n.
 \end{aligned}$$

Again, we obtained geometrical speed of convergence.

Example 4.1 (Laplace distribution). *Let $\{X_t\}$ follow the AAR(1) model (9) with $a = 1/2$ and innovations η_n having Laplace distribution $\text{La}(1)$, i.e. $f(x) = \frac{1}{2}e^{-|x|}$, $x \in \mathbb{R}$. We compute first four members of sequences g_n and h_n using (3) and (10), respectively. We get*

$$\begin{aligned}
 g_0(x) &= \frac{1}{2}e^{-|x|}, \\
 g_1(x) &= \frac{1}{3}(2e^{-|x|} - e^{-2|x|}), \\
 g_2(x) &= \frac{2}{45}(16e^{-|x|} - 10e^{-2|x|} + e^{-4|x|}), \\
 g_3(x) &= \frac{4}{2835}(512e^{-|x|} - 336e^{-2|x|} + 42e^{-4|x|} - e^{-8|x|})
 \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
 h_0(x) &= \begin{cases} \frac{1}{3}e^x & x < 0 \\ e^{-x} - \frac{2}{3}e^{-2x} & x \geq 0, \end{cases} \\
 h_1(x) &= \begin{cases} \frac{14}{45}e^x & x < 0 \\ \frac{2}{45}(25e^{-x} - 20e^{-2x} + 2e^{-4x}) & x \geq 0, \end{cases} \\
 h_2(x) &= \begin{cases} \frac{124}{405}e^x & x < 0 \\ \frac{4}{2835}(807e^{-x} - 672e^{-2x} + 84e^{-4x} - 2e^{-8x}) & x \geq 0, \end{cases} \\
 h_3(x) &= \begin{cases} \frac{31496}{103275}e^x & x < 0 \\ \frac{8}{722925}(103513e^{-x} - 87040e^{-2x} + 11424e^{-4x} - \\ - 340e^{-8x} + 2e^{-16x}) & x \geq 0. \end{cases}
 \end{aligned}$$

Densities g_n and h_n , $n = 0, \dots, 3$, are shown on Figures 1 and 2, respectively. We can see that the actual speed of convergence is very high since the densities h_2 and h_3 almost coincide (the maximum difference between them is approximately 0.0012).

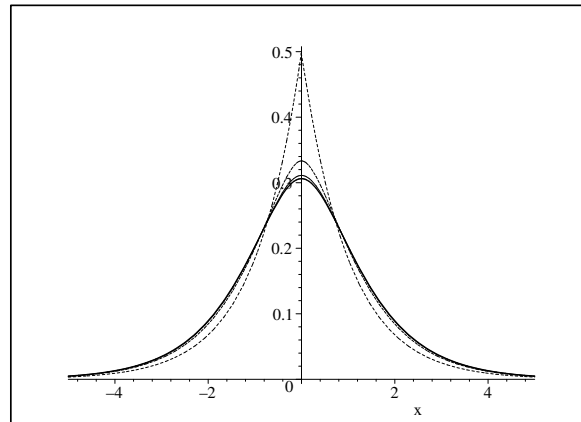


Figure 1: Densities g_0 (dotted), g_1 (dashed), g_2 (solid) and g_3 (solid thick).

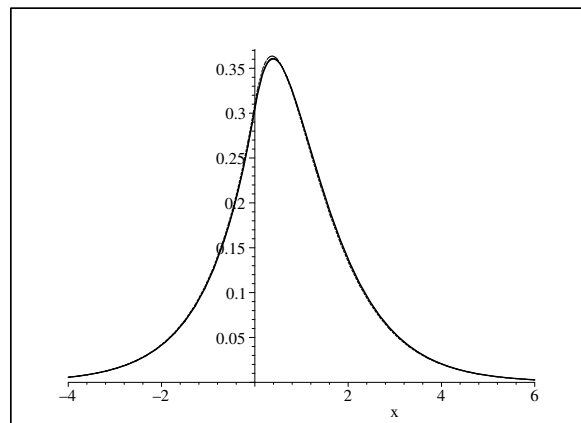


Figure 2: Densities h_0 (dotted), h_1 (dashed), h_2 (solid) and h_3 (solid thick).

Reference

- [1] Anděl J., Bartoň T. (1986). *A note on the threshold AR(1) model with Cauchy innovations*. *Journal of Time Series Analysis* **7**, 1–5.
- [2] Anděl J., Hrach K. (2000). *On calculation of stationary density of autoregressive processes*. *Kybernetika* **36**, 311–319.
- [3] Anděl J., Netuka I., Ranocha P. (2006). *On methods for calculating stationary distribution in AR(1) model*. Submitted.
- [4] Anděl J., Netuka I., Zvára K. (1984). *On threshold autoregressive processes*. *Kybernetika* **20**, 89–106.
- [5] Anděl J., Ranocha P. (2005). *Stationary distribution of absolute autoregression*. *Kybernetika* **41**, 735–742.

- [6] Haiman G. (1998). *Upper and lower bounds for the tail of the invariant distribution of some AR(1) processes*. Asymptotic Methods in Probability and Statistics **45**, 723–730 (ed.: B. Szyszkowicz), Elsevier Science B.V.
- [7] Loges W. (2004). *The stationary marginal distribution of a threshold AR(1) process*. Journal of Time Series Analysis **25**, 103–125.
- [8] Tong H. (1990). *Non-linear time series. A dynamical system approach*. Clarendon Press, Oxford.

Acknowledgement: This work was supported by grant 201/05/H007 of the Grant Agency of the Czech Republic.

Address: MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: ranocha@karlin.mff.cuni.cz

MODEL VÝVOJE NEZAMĚSTNANOSTI V ČASE A OKRESECH

Soňa Reisnerová

Klíčová slova: Bayesovské metody, časové řady, časo-prostorové procesy, MCMC, nezaměstnanost.

Abstrakt: Cílem příspěvku je zachytit časovou i prostorovou závislost souboru Poissonových náhodných veličin. Mějme časové řady náhodných veličin - počtů událostí - v daných lokalitách. Počty modelujeme pomocí Poissonova rozdělení a zároveň chceme zachytit vazby mezi sousedními lokalitami. Pro intenzitu (parametr) Poissonova rozdělení volíme tvar obvyklý pro Coxův regresní model, tj. funkce času násobena $\exp(\text{funkce dalších vlivů})$, kde v druhé části bude popsána uvažovaná vzájemná závislost lokalit, a to formou Markovského náhodného pole. Dostáváme tak jednoduchý model časo-prostorového procesu, zde s diskretním časem. Odhad parametrů modelu provedeme pro časovou složku pomocí klasického Gibbsova algoritmu a pro prostorovou složku kombinací Gibbsova algoritmu se zamítací metodou. Tato metoda je demonstrována na reálných datech měsíčního vývoje přírůstků nezaměstnaných v České republice, které jsou po dobu několika let pozorovány ve všech okresech.

1 Bayesovská statistika a MCMC metody

Mějme náhodný vektor X , jehož rozdělení závisí na vektoru parametrů θ , a chtějme z napozorovaných hodnot vektoru X odhadnout hodnotu parametru θ . Bayesovský přístup nahlíží na vektor parametrů jako na vektor náhodných veličin a ne jako na vektor konstant, jak je tomu v případě klasické matematické statistiky. Marginální rozdělení vektoru parametrů θ nazýváme apriorním rozdělením. Aposteriorním rozdělením označujeme podmíněné rozdělení parametru θ za podmínky $X = x$, kde x je napozorovaná hodnota vektoru X . Z Bayesovy věty vyplývá pro hustotu aposteriorního rozdělení následující vztah:

$$f(\theta | X = x) \sim f(\theta) \cdot f(X | \theta),$$

který nám říká, že hustotu cílového, aposteriorního rozdělení dostaneme jako normovaný součin příslušné části věrohodnostní funkce a apriorní hustoty. Základy Bayesovské statistiky jsou popsány např. v [5].

V tomto příspěvku chceme vedle vzájemně nezávislé časové složky modelu generovat parametry prostorové složky, o kterých předpokládáme jisté apriorní rozdělení s autoregresní závislostí. Podobný případ autoregresní závislosti regresního parametru časové složky byl zmíněn např. v [3]. Budeme uvažovat, že máme dvoudimensionální pole oblastí či buněk, které si lze představit jako konečnou mřížku. Vazby jednotlivých buněk potom mohou být

vyjádřeny čtvercovou maticí o velikosti počtu buněk v mřížce, kde nenulová hodnota prvku (i, j) znamená, že je mezi buňkou i a j vazba. Hodnoty v matici mohou být pouze 0-1 nebo více hodnot podle typů vazeb mezi buňkami.

Bayesovská statistika často s výhodou používá známé simulační metody, k nimž bezesporu patří metody Markov Chain Monte Carlo. Pomocí těchto metod lze generovat Markovské řetězce s daným stacionárním rozdělením a využívají se mimo jiné k odhadování parametrů ve složitých pravděpodobnostních modelech jako např. v [6].

Pro generování náhodných veličin z aposteriorního rozdělení použijeme Gibbsův algoritmus popsáný např. v [2] a kombinaci Gibbsova algoritmu se zamítací metodou uvedenou např. v [7]. Vyjdeme z počátečních hodnot parametrů a v každém kroku algoritmu vybereme náhodně jeden index, pro který vygenerujeme nového kandidáta. Výsledný Markovský řetězec konverguje v distribuci k aposteriornímu rozdělení, proto z celého řetězce oddělíme první část tak, aby zbylý řetězec měl již přibližně stacionární rozdělení. Problematika, jak velkou část řetězce máme oddělit, je zmíněna např. v [1]. Ze zbylé části řetězce určíme medián a výběrové kvantily, které by měly odpovídat charakteristikám aposteriorního rozdělení.

V následující části příspěvku se budeme věnovat nejprve přesné formulaci uvažovaného problému, jehož základem je nehomogenní Poissonův model. Další část se bude zabývat odvozením odhadů parametrů modelu a na závěr uvedeme aplikaci na reálná data týkající se vývoje přírůstků nezaměstnaných v jednotlivých krajích a okresech.

2 Nehomogenní Poissonův model

Nejprve budeme specifikovat data, pro která je model určen. Pokud sledujeme výskyt nějaké události v čase a oblasti, může nás zajímat intenzita, s jakou událost nastává. Tato data bývají často reprezentována v diskrétním čase celkovými počty událostí v jednotlivých časo-prostorových intervalech. Lze s nimi tedy zacházet jako s Coxovým náhodným bodovým procesem, jehož intenzita je náhodná, mění se zároveň v čase a prostoru. Náhodnost intenzity jsme do modelu vlastně vnesli díky Bayesovskému přístupu. Zároveň předpokládáme, že při fixované (realizované) intenzitě se analyzovaný proces událostí řídí nehomogenním Poissonovým procesem. Pracujeme s diskretizovaným časem, pozorované počty událostí se řídí Poissonovým rozdělením a proto lze pro pozorovaná data psát:

$$\begin{aligned} N(t, j) &\sim \text{Pois}(\lambda(t, j)), \\ \text{kde } \lambda(t, j) &= N_0(j)a(t) \exp(\beta(j)), \end{aligned} \tag{1}$$

$t = 1, \dots, T$ jsou indexy časových intervalů, $j = 1, \dots, J$ jsou indexy prostorových oblastí a $N_0(j)$ jsou dopředu známé konstanty spjaté s celkovými počty jedinců ohrožených výskytem události v oblasti j , které pomáhají dostat hodnoty odhady parametrů do přijatelných mezí. V modelu se snažíme od sebe

oddělit časovou a prostorovou složku reprezentovanou neznámými parametry $a(t)$ a $\beta(j)$ a současně uvažovat pro $\beta(j)$ závislost na okolních parametrech.

Věrohodnostní funkce pro náš model má tvar:

$$L(N | a, \beta) = \prod_{j=1}^J \prod_{t=1}^T \exp\{-N_0(j)a(t)b(j)\} \frac{(N_0(j)a(t)b(j))^{N(t,j)}}{N(t,j)!}, \quad (2)$$

kde značíme $b(j) = \exp(\beta(j))$.

3 Odhad parametrů modelu

V této části budeme pracovat s gamma rozdělením, připomeňme tedy, jak vypadá hustota $\Gamma(u, v)$:

$$f(\mathbf{X} | u, v) = x^{u-1} e^{-x/v} \Gamma(u) v^u, \quad (3)$$

pak $E(\mathbf{X}) = uv$ a $var(\mathbf{X}) = uv^2$.

Nejprve se zabýváme odhadem parametrů časové složky modelu, pro které uvažujeme vzájemnou nezávislost. Apriorní rozdělení pro $a(t)$, $t = 1, \dots, T$ zvolíme jako:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0(a(t)) &= \Gamma\left(\gamma, \frac{A}{\gamma}\right), \\ f_0(a(t)) &= a(t)^{\gamma-1} e^{-a(t)\gamma/A} (A/\gamma)^\gamma \Gamma(\gamma)^{-1}. \end{aligned} \quad (4)$$

Podmíněné aposteriorní rozdělení $a(t)$, $t = 1, \dots, T$ při dané hodnotě všech ostatních parametrů dostaneme složením příslušné části věrohodnostní funkce (2) a apriorního rozdělení (4):

$$\begin{aligned} f^*(a(t) | \cdot) &= \exp\left\{-a(t) \sum_{j=1}^J N_0(j)b(j)\right\} a(t)^{\sum_{j=1}^J N(t,j)} f_0(a(t)) \cdot K_1, \\ &= \exp\left\{-a(t) \left(\sum_{j=1}^J N_0(j)b(j) + \gamma/A\right)\right\} a(t)^{\gamma-1 \sum_{j=1}^J N(t,j)} \cdot K_2, \end{aligned} \quad (5)$$

kde K_1 a K_2 jsou normující konstanty (závisející jen na podmiňujících, v daný moment fixovaných parametrech), potom lze psát

$$\mathcal{L}^*(a(t) | \cdot) = \Gamma\left(\gamma + \sum_{j=1}^J N(t,j), \left(\gamma/A + \sum_{j=1}^J N_0(j)b(j)\right)^{-1}\right).$$

Jelikož je výsledkem gamma rozdělení, můžeme použít Gibbsův algoritmus a generovat tak podmíněné aposteriorní rozdělení přímo.

Prostorové složky modelu jsou svázány Gaussovsko-Markovským náhodným polem. Apriorní rozdělení je závislé na okolních parametrech, tedy pro $\beta(j)$, $j = 1, \dots, J$:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0(\beta(j) \mid \beta(i) \forall i \neq j) &= \mathcal{N}(\mu_j, \sigma^2), \\ f_0(\beta(j) \mid \beta(i) \forall i \neq j) &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(\beta(j) - \mu_j)^2\right), \end{aligned} \quad (6)$$

kde μ_j je aritmetický průměr z okolí j -té oblasti. Podmíněné aposteriorní rozdělení $\beta(j)$, $j = 1, \dots, J$, při dané hodnotě všech ostatních parametrů dostaneme složením příslušné části věrohodnostní funkce (2) a apriorního rozdělení (6):

$$f^*(b(j) \mid \cdot) = h_1(b(j)) \cdot h_2(\beta(j)), \quad (7)$$

kde

$$h_1(b(j)) = \exp\left\{-b(j)N_0(j) \sum_{t=1}^T a(t)\right\} b(j)^{\sum_{t=1}^T N(t,j)} \cdot K_3, \quad (8)$$

odpovídá gamma rozdělení pro $b(j)$, K_3 je opět normující konstanta, a kde

$$\begin{aligned} h_2(\beta(j)) &= f_0(\beta(j) \mid \beta(i) \forall i \neq j) \\ &= \prod_k \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\beta(k) - \mu_k)^2\right\} \end{aligned} \quad (9)$$

odpovídá hustotě normálního rozdělení, za k bereme všechny indexy oblastí sousedící s oblastí j .

V tomto případě ale nedostáváme přímo žádné známé rozdělení. Pro generování reprezentanta z cílového rozdělení použijeme Gibbsův algoritmus doplněný metodou "sampling-rejection". Pokud chceme vygenerovat prvek z rozdělení s hustotou $f^* = h_1 \cdot h_2$, kde h_1 je úplná hustota a h_2 je nezáporná ohraničená funkce, tak lze postupovat takto: Nejprve vygenerujeme kandidáta $b^* = \exp(\beta^*)$ z rozdělení

$$\Gamma\left(\left(\sum_{t=0}^T N(t,j) + 1\right) / \gamma, \gamma / \left(N_0(j) \sum_{t=0}^T a(t)\right)\right) \quad (10)$$

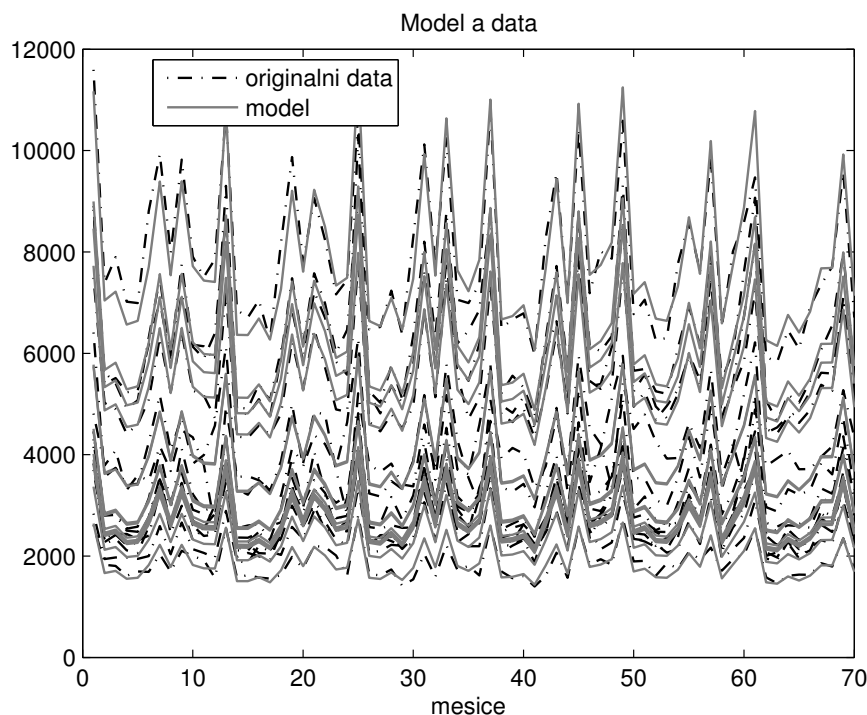
a přijmeme ho s pravděpodobností $p = h_2(\beta^*) / \max h_2(\beta)$. V našem případě je funkce h_2 hustotou normálního rozdělení bez normujícího členu a její maximum je 1. Metoda "sampling-rejection" podrobně popsána např. v [4] pracuje efektivněji než obecný Metropolis-Hastingsův algoritmus.

Vstupní parametry γ , σ a A jsou stanoveny jako konstanty a jejich vliv na výsledek analýzy by mohl být také zkoumán. My jsme volili hodnotu A v okolí skutečné hodnoty počtu událostí v čase, neboť $E(a(t)) = A$. Parametry γ a σ volíme přiměřeně, protože mohou ovlivnit výsledek ve smyslu silnějšího či slabšího vlivu apriorní informace.

4 Aplikace na počty nezaměstnaných v České republice

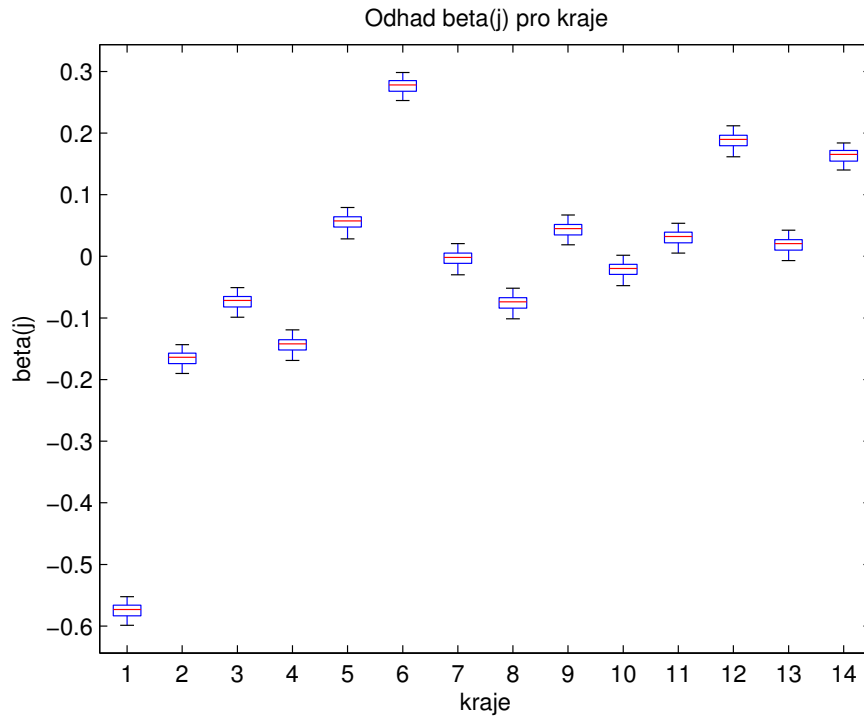
Použití výše popsané metody jsme demonstrovali na reálných datech měsíčního vývoje přírůstků nezaměstnaných v České republice. Pozorovaná data $N(t, j)$ znamenají počet nově registrovaných nezaměstnaných v čase t a oblasti j . K dispozici jsme měli údaje jak pro kraje, tak okresy za období leden 2000 až říjen 2005. V ČR je nyní 14 krajů, 77 okresů, z toho hlavní město tvoří kraj s jedním okresem. Za $N_0(j)$ jsme zvolili počet aktivně pracujících v příslušné oblasti dělený 100. Typy vazeb v mřížce jsme uvažovali pouze 0-1, 1 znamená, že spolu příslušné oblasti sousedí, tzn. mají alespoň část hranice společnou, 0 opak. Nejprve jsme vzali data členěná na kraje, kde bychom neočekávali takovou prostorovou provázanost a poté jsme stejný model aplikovali na okresy. Veškeré výpočty byly dělány v programu Matlab 7.0.

Jelikož rozdělení jednotlivých veličin na sobě vzájemně závisejí, nejprve jsme při simulaci vygenerovali realizaci celého vektoru a , tuto nově získanou hodnotu jsme použili pro generování kandidáta na $\beta(j)$, kterého jsme přijali s pravděpodobností p a provedli 10 000 iterací. Díky malému procentu nepřijatých kandidátů jsme z vygenerovaného řetězce vynechali pouze první třetinu a zbytek jsme již považovali za Markovský řetězec s přibližně stacionárním rozdělením. Zobrazené výsledky odpovídají této volbě počátečních parametrů $\gamma = 1$, $\sigma = 1$ a $A = 0,01$. Volbou větší hodnoty těchto parametrů pouze uměle zvětšíme rozptyl aposteriorních rozdělení při zachování stejné střední hodnoty.

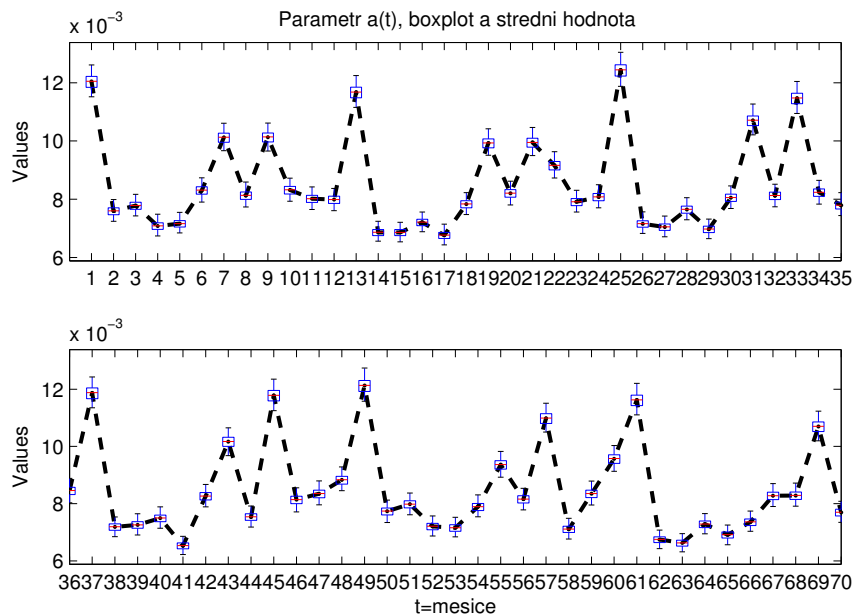


Obrázek 1: Fit modelu.

Na obrázku č. 1 je možné vidět napozorovaná data pro kraje vyznačena tečkovanými křivkami v porovnání s plnými křivkami, které zobrazují odhad střední hodnoty modelu $EN(t, j) = N_0(j) \cdot a(t) \cdot \exp\{\beta(j)\}$. Jedná se o absolutní čísla přírůstků nezaměstnaných v jednotlivých krajích.

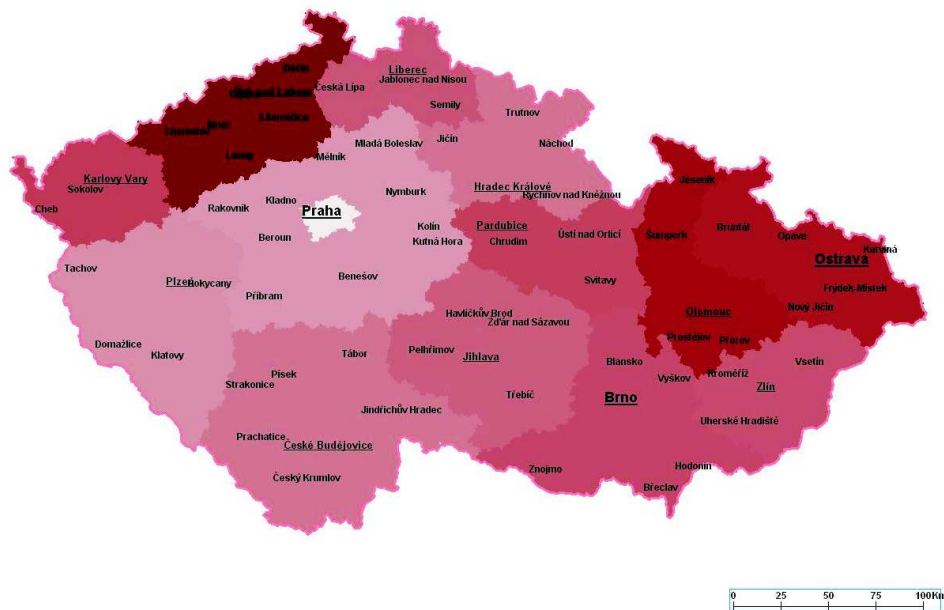


Obrázek 2: Parametr beta(j).

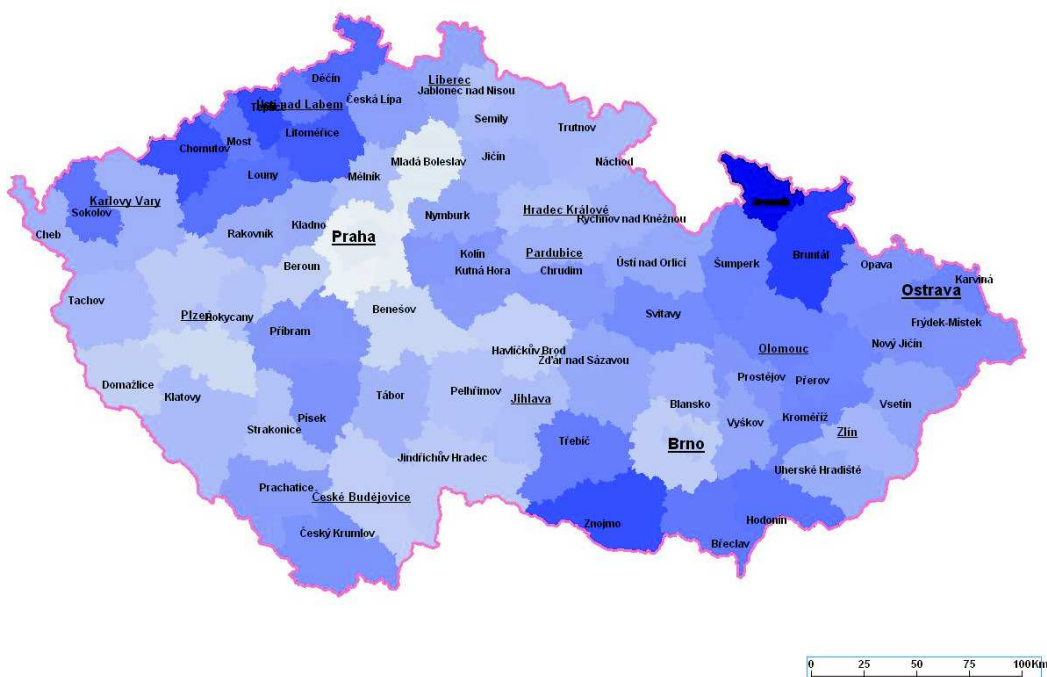


Obrázek 3: Parametr a(t).

Graf na obrázku č. 2 zobrazuje boxplot odhadnutých parametrů $\beta(j)$ v modelu pro kraje. Nejpriznivější situace je pro kraj Praha, zde je nezaměstnanost nejnižší, naopak nejhorší situace je v Ústeckém, dále Moravskoslezském a Olomouckém kraji. Graf na obrázku č. 3 zobrazuje boxplot a střední hodnotu odhadnutých parametrů $a(t)$ v modelu pro okresy.



Obrázek 4: Kraje ČR s odstíny dle hodnot odhadnutého parametru $\beta(j)$.



Obrázek 5: Okresy ČR s odstíny dle hodnot odhadnutého parametru $\beta(j)$.

Na obrázku č. 4 a 5 jsou mapy ČR pro kraje a okresy s odstíny šedi dle odhadnutých hodnot $\beta(j)$, ze kterých lze vidět, že v mapě pro okresy přechází odstíny plynuleji mezi jednotlivými oblastmi než v mapě pro kraje.

Výsledky tedy potvrdili, že jsou kraje na rozdíl od okresů více uzavřeny do sebe a nejsou tolik ovlivněny sousedními kraji. Nejnížší nezaměstnanost mají okresy bezprostředně hraničící s Prahou, zejména Mladá Boleslav. Nejproblematictější jsou okresy v Ústeckém, Olomouckém a Moravskoslezském kraji.

5 Závěr

V tomto příspěvku jsme se zabývali spíše jednodušším diskretizovaným časoprostorovým bodovým procesem. Ukázali jsme zároveň využití Bayesovského přístupu podpořeného MCMC metodami. Jedním z možných vylepšení navrženého modelu je rozdělení $a(t)$ na sezónní a meziroční složku. Také bychom mohli uvažovat více typů vazeb a zkoumat jejich významnost.

Reference

- [1] Derman C. (1956). *Some asymptotic distribution theory for Markov chains with a denumerate number of states*. Biometrika **43**, 285–294.
- [2] Gamerman D. (1997). *Markov chain Monte Carlo*. Chapman and Hall.
- [3] Gamerman D., West M. (1998). *An application of dynamic survival models in unemployment studies*. The Statistician **36**, 269–274.
- [4] Heikkinen J., Arjas E. (1998). *Non-parametric Bayesian estimation of a spatial poisson intensity*. Scand. J. Statist. **25**, 435–450.
- [5] Hušková M. (1985). *Baysové metody*. Univerzita Karlova Praha.
- [6] Volf P. (2005). *Bayes analysis of time series with covariates*. Proceedings of the 23rd Int. Conf. MME 2005, 421–426.
- [7] Volf P., Linka A. (1997). *On MCMC methods in Bayesian regression analysis and model selection*. IASC Summer School, Padua, Italy.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GA ČR 201/05/H007.

Adresa: S. Reisnerová, Ústav teorie informace a automatizace, AV ČR, Pod Vodárenskou věží 4, 182 08 Praha 8

E-mail: reisnero@utia.cas.cz

PROBLEMS IN ESTIMATING STRUCTURE OF NANOMATERIALS

I. Saxl, L. Ilucová, V. Sklenička, M. Svoboda, P. Král

Keywords: Equal channel angular pressing (ECAP), orientation imaging microscopy, creep, inhomogeneity, anisotropy.

Abstract: The structure of high purity (99.99%) aluminium processed by equal channel angular pressing (ECAP) was examined in the as-produced state and after creep deformation by means of various stereological methods. The results indicate that inhomogeneity and anisotropy of the microstructure in mesoscopic scale influence the creep behaviour of the pressed material.

1 Introduction

All technical metallic materials are polycrystals which means that their structure is composed of regions called the grains. Such a grain has an approximately constant lattice orientation and is separated from the neighbouring grain by a thin layer called the grain boundary; its thickness amounts few atomic distances, its structure is formed by disordered groups of atoms and it accomplishes the passage between the lattices of neighbouring grains. The least angle of rotation required to rotate a crystal into the same orientation as the considered neighbouring crystal is called the *disorientation* or *misorientation* or also *disclination* Δ and its value must exceed a conventional limit of 15° . The linear grain size (*e.g.* its mean width, *i.e.* the mean length of its projection onto an isotropic bundle of directions) in conventionally used materials ranges from several microns to tenths of millimeters, hence the grain volume lies between 10^2 and $10^7 \mu\text{m}^3$. However, even within such a grain is the lattice orientation strictly constant only within some smaller subregions - subgrains - separated by subboundaries formed by partially ordered groups of atoms. The disclination of neighbouring subgrains is $\Delta \leq 10^\circ$ and $10^\circ < \Delta < 15^\circ$ is an intermediate region.

Recently, an excellent technique has been developed, namely Orientation Imaging Microscopy (OIM) or, equivalently, Electron Backscatter Diffraction (EBSD) mapping. It is based on automatic indexing of electron backscatter diffraction patterns which can be produced in a suitably equipped scanning electron microscope. When the beam of electrons strikes a surface of the crystalline material at an angle around 70° , the electrons disperse beneath the surface, subsequently diffracting among the crystallographic planes. The diffracted beam produces a pattern composed of intersecting bands, termed electron backscatter patterns. By a suitable computer analysis of these patterns, the mutual orientation of neighbouring grains and subgrains can be estimated and an image constructed such that regions with Δ exceeding some selected value (the lower limit) are shown in different colours. Hence

a complete description of the crystallographic orientations in polycrystalline materials is provided. In Fig. 1 are shown two images of the same area at different limit disclinations Δ . Note that subgrains observed at lower prescribed value of Δ join together to create subgrains bounded by subboundaries with a greater Δ .

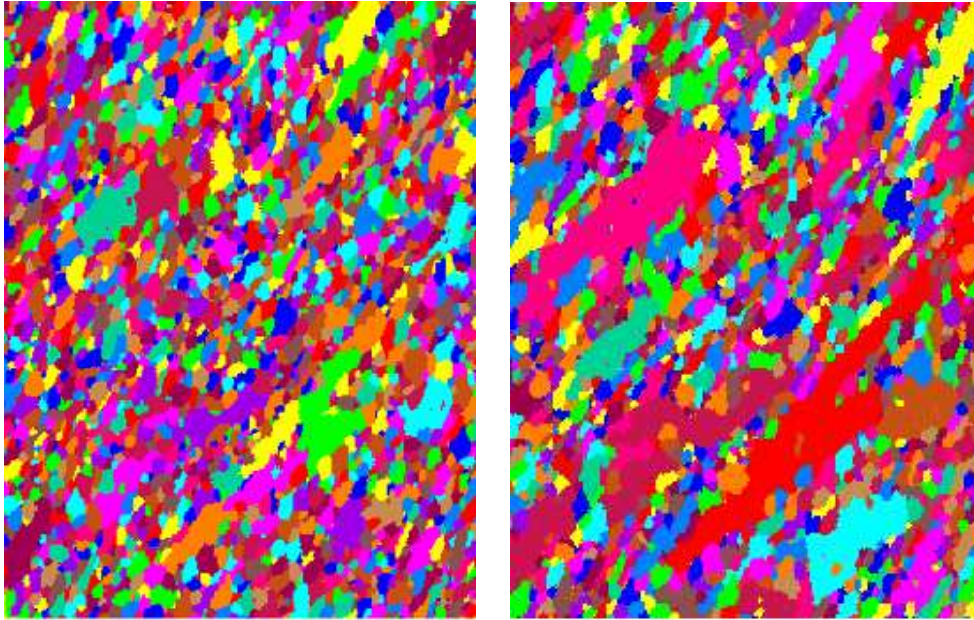


Figure 1: The specimen section (as-pressed ECAP aluminium after 8 passes) as observed at the lower limits of disclination $\Delta \geq 5^\circ$ (left) and $\Delta \geq 10^\circ$ (right), magnification $\approx 830\times$.

There is another important grain characteristic beside its size, namely its shape. It is reasonable to expect that the properties of a material with distinctly plate-like or rod-like grains, *i.e.* so-called *non-equiaxial* grains, will depend on the orientation of grain boundaries with respect to acting forces. Consequently, the analysis of preferred boundary orientation is an important topic in the examination of the material structure.

The last but not least characteristic of a material is the homogeneity of its structure, *i.e.* the local (a comparison of neighbouring grains) and overall (a comparison of grains in distanced positions) variability of grain characteristics.

It is well known that interfaces are very important in explaining the behaviour of materials, namely their electrical conductivity, thermal stability and, in particular, their mechanical properties. The deformation processes proceed mainly by the movement of certain lattice defects called the dislocations, which move under relatively small stresses through a regular lattice but are stopped or annihilated at the grain boundaries. In a coarse grained material, only a relatively small percentage of atoms will be at or near an interface. In materials with very small grains, their size ensures that dislo-

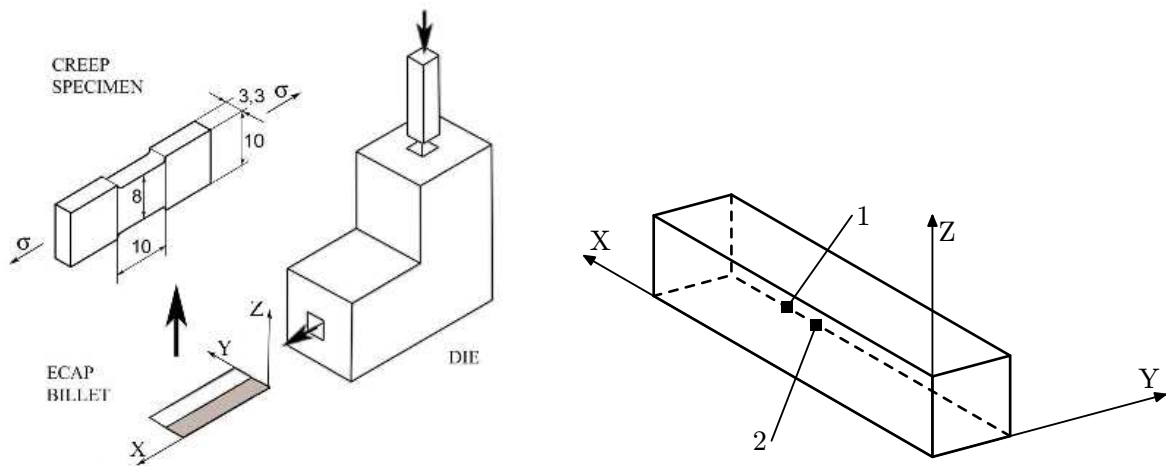


Figure 2: Scheme of the pressing process, shape of the specimen and the orientation chosen in what follows. The material is repeatedly extruded through a die and rotated by 90° in the same direction about its axis after each pass; this type of rotation denotes the letter B in the specimen notation. Samples B8_1C and B8_2C were taken from the places 1 and 2.

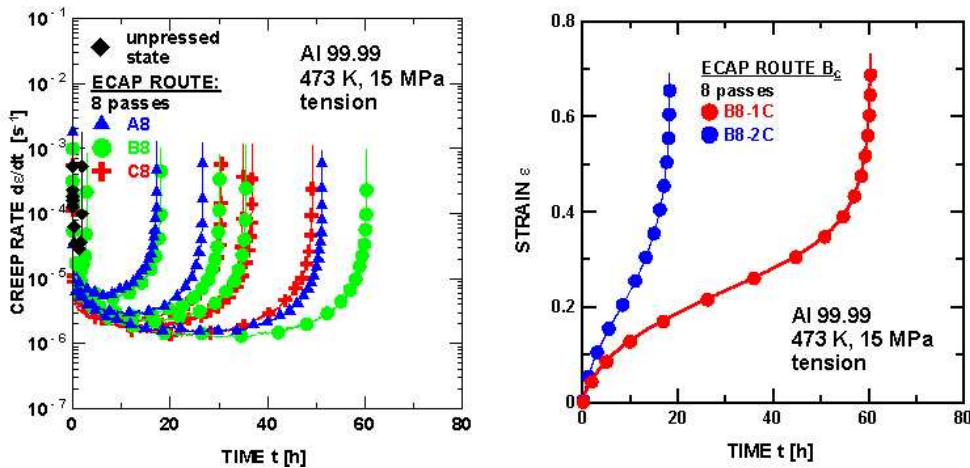


Figure 3: Creep properties of various ECAP specimens after eight passes (the A-specimens are unrotated after each pass, whereas C-specimens are rotated by 180° - left) and the creep curves of examined specimens B8_1C and B8_2C (right).

cation movement and also other processes like the diffusion will be influenced by the high density of closely spaced grain and subgrain boundaries passing in the vicinity of a considerable fraction of atoms.

That is why the technological procedures considerably refining grain size are in the centre of the research attention [12]. One possible approach consists in introducing large plastic strains into a coarse-grained material, typically a pure metal or an alloy. Among the various severe plastic deformation techniques, equal channel angular pressing (ECAP) is the most promising one.

ECAP is the processing procedure in which a material is subjected to a repeated very severe plastic strain without any concomitant change in the cross-sectional dimensions of the work piece (see Fig. 2) and its result is a very significant refinement of polycrystalline grain size (submicrometer and/or nanometer level of the mean grain width). In the present study, a selected material was examined in the as-pressed state and after a creep deformation. The preliminary study [10] has shown that the creep properties of identically produced specimens considerably differ in the creep rates and times to fracture even when the elongations are comparable - see Fig. 3 - and described the extreme structural variability in the as-pressed state. The main goal of the present examination is to find whether the considerable differences in the fracture times are also reflected in the sample grain structures.

2 Material, its sectioning and imaging

The initial material was extremely coarse grained (≈ 5 mm) high purity (99.99%) aluminium. It was processed at the room temperature by the ECAP pressing consisting in eight passes (each of them was followed by the rotation of the type B) through a die as shown in Fig. 2 - for details see [9]. Two such specimens were then examined in the as-pressed state (B8_1, B8_2), another two specimens with considerably different fracture times were examined after the creep test (B8_1C, B8_2C).

For creep testing, flat specimens were machined parallel to the longitudinal axes X of the billets with gauge sections having cross sections and lengths of 5×3.3 mm² and 10 mm, respectively. Creep tests in tension were performed at 473K after an annealing for 4 hours under no external load before creep testing in order to ensure the structural stability of the specimens. The measurement was performed at three different places selected near the head of the tensile specimen where the deformation was rather mild and the change in the grain structure was primarily a consequence of the annealing for 3 hours without stress and then for 20 or 60 hours under stress.

For the detailed examination were prepared three mutually perpendicular section planes XY, XZ and YZ with the X-axis in the pressing direction and the Z-axis perpendicular to the bottom of the die. Consequently, YZ and XY, XZ are the transversal and longitudinal specimen planes, respectively (see Fig. 2). Then the images of sections were obtained by means of the scanning (Philips SEM 505) electron microscope using the EBSD mapping with the lower limits of disclination $\Delta \geq 2^\circ, 5^\circ, 10^\circ, 15^\circ$ - see Fig's 4 and 5.

3 Measurement and estimation

Images have been analysed by the standard methods (profile and intercept counts) in order to characterize the microstructure and its homogeneity. Profile and intercept counts in all three section planes have been made by semi-manual analysis, the edge effects have been carefully removed. The num-

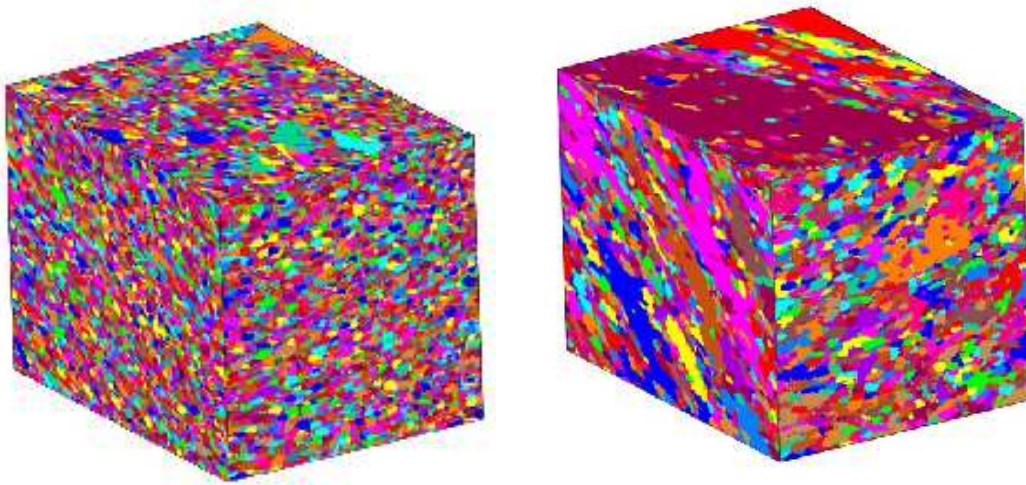


Figure 4: Comparison of the images obtained by OIM in three mutually perpendicular section planes at $\Delta \geq 2^\circ$ (subgrains) and 15° (grains) in the specimen B8.1, magnification $\approx 500\times$. The Z-axis is vertical and the elongated and inclined profiles lie in the XZ plane.

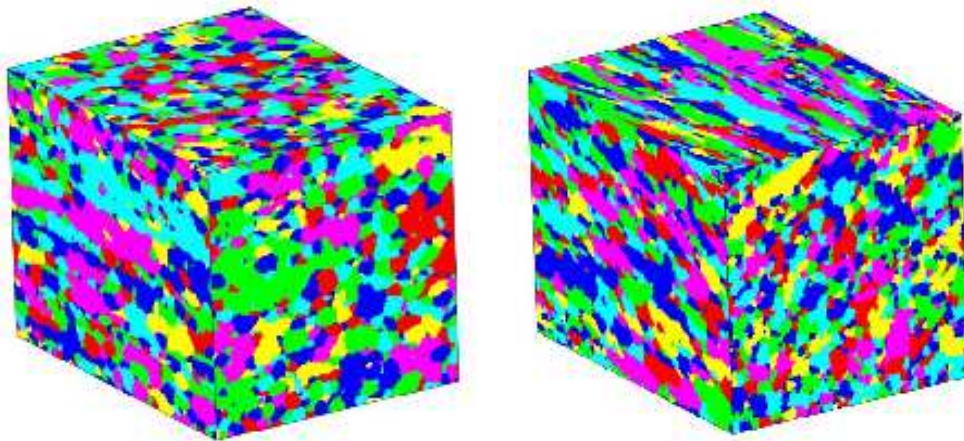


Figure 5: The structure of the two examined specimens B8.1C (fracture time 60h) and B8.2C (fracture time 20h) after creep near the specimen head; $\Delta \geq 15^\circ$, magnification $\approx 160\times$. The axes orientation as in Fig. 4.

bers of counted profiles were approximately as follows: 25 000 and 21 000 at $\Delta \geq 2^\circ$ in as-produced and creep loaded specimens, resp., 12 000 and 7 000 at $\Delta \geq 15^\circ$ again in as-produced and creep loaded specimens, respectively. Consequently, including also the remaining two disclination bounds, about 130 000 profile areas were estimated. The intercept counts have been made in six systematically chosen directions including the directions of the coordinate axes in the examined plane section.

The aim of the present study was the comparison of the subgrain and grain structures of the above described ECAP specimens in the as-produced state

and after the creep exposition. The method consisted in the stereological examination of planar and line sections; the basic stereological approaches were described in [2] and are developed and commented in [11]. In [2] as well as in the present treatment is the structure considered as deterministic and the probe positions are random (the choice of the XZ planes) or systematically random (the choice of the most closely placed XY and YZ planes and of the test lines in all section planes); as the probe size is negligible with respect to the specimen size, the approach can be classified as *the extended deterministic case* in the terminology introduced by Miles [5].

The main characteristics of convex tessellations and tessellations induced by them in sections as well as their mutual relations have been described in [7] and will be only shortly summarized in what follows. The global characteristics of a 3D tessellation are intensity of cells λ (the mean number of cells per unit volume), areal intensity of cell boundaries S_V (the mean boundary area per unit volume) and length intensity of cell edges L_V (the mean length of cell edges per unit volume; usually the tessellation can be considered as normal, which means that four cells meet at a vertex and three cells meet along an edge, hence the commonly used term *triple grain edges*). In the induced tessellations are similarly introduced the profile intensity λ' (the mean number of cell sections per unit area of the section plane) and the chord intensity λ'' (the mean number of cell chords per unit length of the test line). The reciprocal values of λ, λ' have the meaning of the expected cell and profile contents $\mathbf{E}v, \mathbf{E}a$, respectively. Moreover, $2S_V = \lambda \mathbf{E}s$ and $4L_V = \mathbf{E}w$, where s, w are the cell surface area and cell mean width, resp. (see [7]).

It follows from the Crofton relation mentioned in [2] that the mutual relation between the cell intensities is

$$\lambda = \lambda' / \mathbf{E}w = \lambda'' / \mathbf{E}(s/4),$$

as w is the mean length of cell projections into an isotropic bundle of lines and $s/4$ equals (by the Cauchy relation) the mean area of cell projections into an isotropic bundle of planes. By a simple rearrangement, the relation $\lambda = c'(\lambda')^{3/2}$ with $c' = \lambda^{-1}(\mathbf{E}w)^{-3/2}$ follows. The scale invariant factor c' is a function of the tessellation type and its estimation is difficult - see [7]. For that reason the ASTM E 112 Standard [1] recommends the constant value $c' = 0.886$ as suitable for a wide range of grain structures and $c'(\Sigma N_A)^{3/2}$ is considered as an estimator of λ ; here ΣN_A is the arithmetic mean of profile count carried out in several section planes (of different orientations for a mildly anisotropic grain structure).

For materials with a pronounced grain anisotropy recommends ASTM E 112 Standard [1] a similar formula based on the geometric mean (denoted by Π in what follows) of profile counts in three suitably (w. r. to actual type of examined anisotropy) chosen perpendicular section planes (\bullet) and with a different scale invariant factor: $[\lambda] = 0.8(\Pi N_A(\bullet))^{3/2}$. The resulting estimate is biased in general because of the assumption that c' is constant. However,

a theoretical study [8] has shown that the bias is not large at least for some plate-like and rod-like systems of isohedral grains and that the geometric mean of such three measured profile intensities is much better estimator of λ than their arithmetic mean. Consequently, the ASTM recommendation is used to estimate the grain intensity λ in what follows.

Whereas the estimate of the intensity λ is based on several assumptions and is biased, the unbiased estimates of the area and length intensities S_V , L_V are also the consequences of the Crofton relation:

$$S_V = 2\lambda'', \quad L_V = 4\lambda'.$$

The estimates of λ' have been obtained as arithmetic means of profile counts in the three mutually orthogonal planes (in B8_●C also at three different places), the estimates of λ'' have been obtained as arithmetic means of intercept counts along 18 systematically chosen directions (six of them in every section plane).

It would be clearly quite insufficient to restrict the examination to the first order quantities only. Consequently, the coefficients of variation $CV a$ of profile areas have also been estimated. They are reasonable measures of the local (within one section) as well as long range (at different places) and overall (all observed profiles in one specimen) grain size homogeneity. It should be recalled that the value of $CV a$ is close to 0.55 for the both isohedral tessellations by tetrakaidecahedrons and rhombic dodecahedrons corresponding to body-centered and face-centred cubic generating lattices, about 0.7 for the Poisson-Voronoi tessellation and about 1 for the homogeneous Johnson-Mehl tessellation.

4 Results

As-pressed specimens. The obtained results for two examined B8 samples cut from the as-pressed billet are presented in Table 1. The column $CV a(\bullet)$ gives the range of $CV a$ values observed in different section planes, whereas $CV a$ includes profiles observed in the all section planes and thus estimate the overall grain size inhomogeneity.

The extreme local inhomogeneity in the B8_1 sample is also clearly observable in Fig. 4. In the both specimens, the $CV a$ values increase with the lower bound of the disclination and the highest local inhomogeneity was observed in the horizontal XZ planes. The (sub)grain structure of the B8_2 was at all values of Δ similar to the subgrain structure of B8_1 at $\Delta \geq 2^\circ$ shown in Fig. 4, and also the values of intensities were of the same order, namely $\lambda(2^\circ)_{B8_1} = 0.30 \mu\text{m}^{-3}$ and $\lambda(15^\circ)_{B8_2} = 0.26 \mu\text{m}^{-3}$. Regardless of great differences between the specimens, the amount of the high angle boundaries prevails in the both specimens.

Specimens after creep test. The extreme grain coarsening proves that the structure of as-pressed specimens is instable. Otherwise are the mean structure characteristics presented in Tab. 2 remarkably similar in spite of

	$[\lambda]$ $[\mu\text{m}^{-3}]$	$\mathbf{E}v$ $[\mu\text{m}^3]$	$[S_V]$ $[\mu\text{m}^{-2}]$	$[L_V]$ $[\mu\text{m}^{-1}]$	$CV a(\bullet)$	$CV a$
B8_1	0.086	11.6	0.96 (56%)	1.16 (45%)	3.1 - 12	10.44
B8_2	0.26	3.8	1.69 (70%)	2.01 (48%)	1.4 - 2.5	1.54

Table 1: Structural characteristics of B8 specimens at $\Delta \geq 15^\circ$. The numbers in parentheses gives the contribution of the high angle boundaries and triple grain junctions to the results obtained at $\Delta \geq 2^\circ$ (e. g. S_V were 1.72 and $2.43 \mu\text{m}^{-1}$ in B8_1 and B8_2, resp. at $\Delta \geq 2^\circ$).

	$[\lambda]$ $[\mu\text{m}^{-3}]$	$\mathbf{E}v$ $[\mu\text{m}^3]$	$[S_V]$ $[\mu\text{m}^{-2}]$	$[L_V]$ $[\mu\text{m}^{-1}]$	$CV a(\bullet)$	$CV a$
B8_1C	0.0006	1670	0.18(67%)	0.033(36%)	1.1 - 4.9	3.06
B8_2C	0.0005	1880	0.18(59%)	0.031(32%)	1.3 - 2.6	1.87

Table 2: Structural characteristics at $\Delta \geq 15^\circ$ in specimens B8_1C (fracture time 60 hours) and B8_2C (fracture time 20 hours). Observation was carried out at three places in each specimen. The meaning of the numbers in the parentheses is the same as in Tab. 1.

the different fracture times. The only exception are higher values of $CV a$ in the specimen B8_1C. Thus a great local as well as overall inhomogeneity is the feature of the specimen with the longer creep fracture time.

Further the anisotropic characteristics of the specimens were compared. It was shown in [3] that three sections are insufficient for the reliable estimation of the spatial anisotropy of fibre processes and the same conclusion necessarily relates to the surface processes. Consequently only the anisotropy of profile boundaries in section planes was examined.

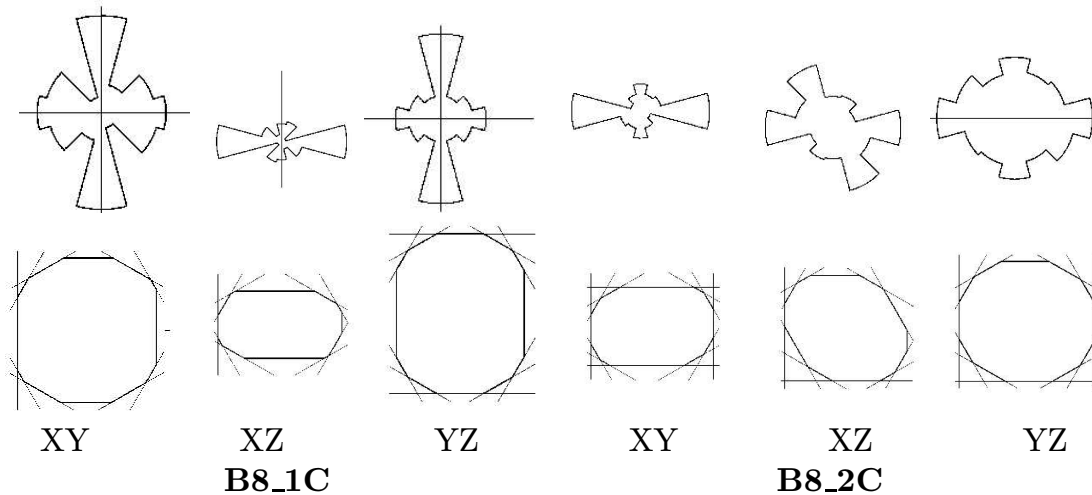


Figure 6: Typical roses of directions of the grain profile boundaries ($\Delta \geq 15^\circ$) and the corresponding Steiner compacts in the section planes XY, XZ, YZ of the specimens B8_1C (fracture time 60 hours) and B8_2C (fracture time 20 hours); Y-axis is always vertical, X-axis is always horizontal.

As it was already mentioned above, the intercept count was carried out along six directions in all section planes and its results were unfolded in order to obtain the rose of direction and the corresponding Steiner compact (the centred convex set - zonoid - the boundary of which has the same rose of directions as the examined fibre process) of profile boundaries. The Steiner compact can be in certain respect considered as the mean shape of the examined profiles. The simple graphical method proposed in [6] was used and its results are shown in Fig. 6.

The grains in B8_2C are plates elongated in the loading directions and inclined w. r. to the XY plane, whereas in B8_1C are the edges of plate-like grains preferably oriented along the coordinate axes and elongated in the direction Y perpendicular to the loading and pressing direction X. Such a less advantageous grain orientation can also contribute to the longer creep life.

5 Conclusions

From the point of view of materials science, the conclusions are as follows. The examination of the grain and subgrain structures in the as-pressed state revealed an extreme inhomogeneity of the material after eight passes and an extreme grain growth after annealing and loading at 473K. The detailed quantitative investigation of the coarser grain structures of two specimens with different fracture times indicates that the observed difference in the creep life can be caused by the substantial dissimilarities in homogeneity and anisotropy of grains and subgrains. Surprisingly enough, the more inhomogeneous specimen had the longer fracture time.

From the mathematical point of view it can be concluded that at present time we are not prepared to answer reliably the questions posed by materials science in the relation to products of modern technologies of the ECAP type. Repeated severe plastic deformation accompanied by local overheating produces extremely inhomogeneous irregular and highly unstable structures of hardly predictable geometric characteristics and, consequently, behaviour under loading (in particular at a temperature exceeding that one of the processing procedure). In a related study of the as-pressed ECAP aluminium bullets after two and four passes of the type B was found even broader range of CV $a(\bullet)$, namely 2.7 - 14.2 and the whole observed section area of size exceeding $10^4 \mu\text{m}^2$ was occasionally an undefined part of one profile only [4]. Consequently, the conclusions of the present and similar studies are - in spite of great efforts - very uncertain and in fact only qualitative because the small parts of the specimens examined in reasonable time and at tolerable costs are completely insufficient to characterize the structural variability. Perhaps a direct computerized analysis of the EBSD data would be more reliable than the stereological examination of the images constructed on their base. EBSD is a brand new technique and a deeper experience with it is still lacking. However, even when a software making such an approach possible was not yet developed, it can appear out of the blue very soon.

Reference

- [1] ASTM E 112 (1988). *Standard methods for determining average grain size*. ASTM 1982.
- [2] Beneš V. (1998). *Stereologie a výběr*. Proceedings ROBUST'98, JČMF, Praha, 43–50.
- [3] Beneš V., Saxl I. (2005). *Stereological estimation of the rose of directions from the rose of intersections*. In: R. Baeza-Yates, J. Glaz, H. Gzyl, J. Hüslér and J.L. Palacios (eds), *Recent Advances in Applied Probability*, Springer-Verlag, 65–96.
- [4] Ilucová L., Saxl I., Svoboda M., Sklenička V., Král P. (2006). *Inhomogeneity and anisotropy of ECAP aluminium*. In: R. Lechnerová, I. Saxl, V. Beneš, Proceedings of S⁴G. JČMF, Praha 2006 (in press).
- [5] Miles R.E. (1980). *On the underlying relationship of plane section stereology to statistical sampling theory*. *Mikroskopie* **37** Suppl. 13–18.
- [6] Rataj J., Saxl I. (1989). *Analysis of planar anisotropy by means of the Steiner compact*. *J. Appl. Probab.* **26**, 490–502.
- [7] Saxl I., Ponížil P. (2002). *Classification of 3D tessellations*. Proceedings ROBUST'2002, JČMF, Praha, 268–277.
- [8] Saxl I., Ponížil P., Sülleiová K. (2005). *Grain size estimation in anisotropic materials*. *Mat. Sci. Forum* **482**, 239–253.
- [9] Sklenička V., Dvořák J., Král P., Stonawská Z., Svoboda M. (2005). *Creep processes in pure aluminium processed by equal-channel angular pressing*. *Mater. Sci. Eng. A* **410-411**, 408–412.
- [10] Sklenička V., Král P., Ilucová L., Saxl I., Dvořák J., Svoboda M. (2006). *Inhomogeneity of microstructure and creep of ECAP Aluminium*. *Mat. Sci. Forum* **503**, 245–250.
- [11] Stoyan D., Kendall W.S., Mecke J. (1995). *Stochastic geometry and its applications*. J. Wiley & Sons, New York.
- [12] Zhu Y.T., Langdon T.G., Valiev R.Z., Semiatin S.L., Lowe T.C. (eds) (2004). *Ultrafine grained materials III*. The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, USA.

Acknowledgement: The authors acknowledge the financial support for this work provided by the GAAV ČR (grant A 204 1301), by the GAČR (grant 201/06/0302), by the grant MSM 0021620839 and by the Academy of Sciences of the Czech Republic, Institutional Research Plan No. AV0Z10190503.

Address: I. Saxl, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín; L. Ilucová, I. Saxl, Mathematical Institute, Academy of Sciences of the Czech Republic, Žitná 25, 115 67 Praha 1; V. Sklenička, M. Svoboda, P. Král, Institute of Physics of Materials, Academy of Sciences of the Czech Republic, Žižkova 22, 616 62, Brno

E-mail: saxl@math.cas.cz

STOCHASTICKÁ VERZE KLASICKÉHO MODELU VÝVOJE EPIDEMIE

Jakub Staněk

Klíčová slova: Kermackův-McKendrikův model, model vývoje epidemie.

Abstrakt: Vývoj epidemie v populaci, jejíž velikost je náhodná (tj. je brán v úvahu vliv migrace), je zde popsán 3-dimenzionální stochastickou diferenciální rovnicí. Je ukázáno, za jakých podmínek existuje jednoznačné silné řešení této rovnice.

Vychází se z publikace Štěpán, J., Hlubinka, D.(2006): Kermack-McKendrick epidemic model revisited. (Preprint)

1 Úvod

Tento článek se zabývá stochastickou verzí modelu vývoje epidemie, která vychází z klasického Kermackova-McKendrickova modelu. Tato verze je dána soustavou SDE

$$\begin{aligned} dX_t &= -\beta(X_t, Y_t, Z_t)X_tY_tdt + X_t\sigma(X_t + Y_t + Z_t)dW_t, & X_0 &= x_0 > 0 \\ dY_t &= \beta(X_t, Y_t, Z_t)X_tY_tdt - \gamma Y_tdt + Y_t\sigma(X_t + Y_t + Z_t)dW_t, & Y_0 &= y_0 > 0 \\ dZ_t &= \gamma Y_tdt + Z_t\sigma(X_t + Y_t + Z_t)dW_t, & Z_0 &= 0, \end{aligned}$$

kde X_t je počet zdravých jedinců, u kterých hrozí nákaza, Y_t je počet infikovaných jedinců, Z_t je počet imunních jedinců, W_t je Wienerův proces a pro velikost populace $N_t = X_t + Y_t + Z_t$ požadujeme, aby $a \leq N_t \leq b \forall t$ pro nějaké kladné konstanty a a b .

Za podmínek lipschitzovskosti koeficientu β a lipschitzovskosti a omezenosti koeficientu σ , kde $\text{supp}(\sigma) \subset [a, b]$, je ukázána existence a jednoznačnost silného řešení výše uvedené soustavy. Uvedené podmínky jsou shrnuty do věty, která postihuje všechny následující tvary koeficientu β : $\beta \in \mathbf{R}^+$, $\beta \in \mathcal{C}(\mathbf{R}, \mathbf{R}^+)$, $\beta \in \mathcal{C}(\mathbf{R}^3, \mathbf{R}^+)$, $\beta \in \mathcal{C}(\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^+, \mathbf{R}^+)$, kde $\mathcal{C}(\mathbf{R}, \mathbf{R}^+)$, resp. $\mathcal{C}(\mathbf{R}^3, \mathbf{R}^+)$, resp. $\mathcal{C}(\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^+, \mathbf{R}^+)$ je spojitě zobrazení z \mathbf{R} do \mathbf{R}^+ , resp. \mathbf{R}^3 do \mathbf{R}^+ , resp. $\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^+$ do \mathbf{R}^+ , a $\beta(x, y, z, t)$ funkcional z $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) \times \mathbf{R}^+$ do \mathbf{R}^+ .

2 Kermack-McKendrikův model

Kermackův-McKendrikův model je klasický deterministický model vývoje epidemie. Tento model uvažuje v čase konstantní velikost populace N , která je rozdělena do tří skupin, jejichž velikost se v čase mění. Pro pevné t je $x(t)$ počet jedinců, kteří jsou zdraví, ale mohou být nakaženi (dále jen *zdraví*),

$y(t)$ je počet nakažených jedinců, kteří jsou přenašeči nemoci (dále jen *nemocní*) a $z(t)$ je počet jedinců, kteří již nemoc prodělali, nemohou být znova nakaženi a nejsou infekční (dále jen *imunní*). Tento model je popsán 3-dimenzionální diferenciální rovnicí:

$$\begin{aligned} dx(t) &= -\beta x(t)y(t), & x(0) &= x_0 > 0 \\ dy(t) &= \beta x(t)y(t) - \gamma y(t), & y(0) &= y_0 > 0 \\ dz(t) &= \gamma y(t), & z(0) &= 0, \end{aligned}$$

kde $\beta > 0$ a $\gamma > 0$.

Koeficient β popisuje intenzitu přenosu sledované nemoci v populaci, tj. zahrnuje jak intenzitu kontaktů v dané populaci, tak intenzitu přenosu nemoci v případě setkání infikovaného jedince s jedincem, který je zdravý, ale není imunní. Koeficient γ je pak intenzita uzdravování.

3 Stochastická verze klasického modelu vývoje epidemie

Uvažujme model vývoje epidemie s proměnlivou velikostí populace N_t , pro kterou požadujeme, aby $0 < a \leq N_t \leq b < \infty$ v každém čase $t > 0$. Dále pak předpokládejme nekonzstantní intenzitu přenosu nemoci.

K popisu modelu nejprve uvedeme následující definici:

Definice Zobrazení $\beta(x, y, z, t)$ nazveme progresivní funkcionál z $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) \times \mathbf{R}^+$ do \mathbf{R}^+ , jestliže $\beta(l, t)$ je \mathcal{C}_t progresivní proces na $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3)$, kde \mathcal{C}_t je nejmenší zprava spojitá filtrace obsahující kanonickou filtraci \mathcal{H}_t na $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3)$, tzn. $\mathcal{H}_t \equiv \sigma\{u_s : s \leq t\}$ a $u_t(w) = w(t)$ pro $t \geq 0$, $w \in \mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3)$.

Stochastická verze klasického modelu vývoje epidemie je pak popsána následující 3-dimenzionální stochastickou diferenciální rovnicí:

$$\begin{aligned} dX_t &= -\beta(X_t, Y_t, Z_t, t)X_t Y_t dt + X_t \sigma(X_t + Y_t + Z_t) dW_t, & X_0 &= x_0 > 0 \\ dY_t &= \beta(X_t, Y_t, Z_t, t)X_t Y_t dt - \gamma Y_t dt + Y_t \sigma(X_t + Y_t + Z_t) dW_t, & Y_0 &= y_0 > 0 \\ dZ_t &= \gamma Y_t dt + Z_t \sigma(X_t + Y_t + Z_t) dW_t, & Z_0 &= 0, \end{aligned} \tag{R1}$$

přičemž $N_0 = x_0 + y_0 \in [a, b]$. Analogicky k předchozímu modelu X_t značí počet zdravých, Y_t počet nemocných, Z_t počet imunních jedinců v čase t a intenzitu přenosu $\beta(x, y, z, t)$ zde uvažujeme jako progresivní funkcionál z $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) \times \mathbf{R}^+$ do \mathbf{R}^+ . Stejně jako v předešlém je $\gamma > 0$. Navíc v tomto modelu uvažujeme intenzitu migrace $\sigma(x + y + z)$ jako omezenou měřitelnou funkci na \mathbf{R}^+ , která splňuje $\text{supp}(\sigma) \subset [a, b]$.

Migrace v tomto modelu ovlivňuje pouze velikost celé sledované populace, nikoliv poměr jednotlivých skupin v populaci. To znamená, že uvažujeme migraci pouze v rámci území, na kterém se epidemie šíří všude stejným způsobem.

3.1 Existence a jednoznačnost silného řešení

Označme $\Delta_{ab} := \{(x., y., z.) \in \mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) : a \leq x_t + y_t + z_t \leq b \text{ a } x_t, y_t, z_t \geq 0 \forall t \geq 0\}$. Uvažujme β a σ splňující následující podmínky:

- (i) $\beta(x., y., z., t)$ je progresivní funkcionál z $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) \times \mathbf{R}^+$ do \mathbf{R}^+ ,
- (ii) β je lokálně omezený a lokálně lipschitzovský na Δ_{ab} , tj. $\forall N \in \mathbf{N}$ existuje konstanta K_N taková, že $\forall l., \tilde{l}. \in \Delta_{ab}$, pro které $\|l\|_s^* \vee \|\tilde{l}\|_s^* \leq N$ a $0 \leq s \leq N$, platí

$$\begin{aligned} |\beta(l., s) - \beta(\tilde{l}., s)| &\leq K_N \|l - \tilde{l}\|_s^*, \\ |\beta(l., s)| &\leq K_N, \end{aligned}$$

kde $l. = (x., y., z.)$ je spojitá funkce z \mathbf{R}^+ do \mathbf{R}^3 , $|\cdot|$ je Eukleidova norma na \mathbf{R}^3 a $\|f\|_s^* \equiv \sup\{|f(t)| : t \leq s\}$,

- (iii) σ je omezená měřitelné funkce na \mathbf{R}^+ , splňující $\text{supp}(\sigma) \subset [a, b]$,
- (iv) σ je lokálně lipschitzovská na \mathbf{R}^+ .

Věta: Předpokládejme, že σ a β splňují podmínky (i)-(iv). Pak má rovnice (R1) jednoznačné silné řešení a libovolné řešení $L_t = (X_t, Y_t, Z_t)$ je nezáporný proces na $(0, \infty)$.

Důkaz: Uvažujme omezené, lokálně lipschitzovské a progresivní funkcionály φ_i na $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) \times \mathbf{R}^+$, $i = 1, 2$, pro které platí:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x., y., z., t) &= -\beta(x., y., z., t) \cdot y_t, \\ \varphi_2(x., y., z., t) &= \beta(x., y., z., t) \cdot x_t \end{aligned}$$

pro $(x., y., z., t)$ splňující $a \leq x_{\tilde{t}} + y_{\tilde{t}} + z_{\tilde{t}} \leq b$ a $x_{\tilde{t}}, y_{\tilde{t}}, z_{\tilde{t}} \geq 0 \forall \tilde{t} \in [0, t]$. Z podmínky (ii) $\forall l., \tilde{l}. \in \Delta_{ab}$, pro které $\|l\|_s^* \vee \|\tilde{l}\|_s^* \leq N$ a $0 \leq s \leq N$, platí

$$\begin{aligned} |\varphi_1(l., s) - \varphi_1(\tilde{l}., s)| &= |\beta(\tilde{l}., s)\tilde{y}_s - \beta(l., s)y_s| \\ &= |(\beta(\tilde{l}., s) - \beta(l., s))\tilde{y}_s + \beta(l., s)(\tilde{y}_s - y_s)| \\ &\leq K_N \|l - \tilde{l}\|_s^* \|\tilde{y}\|_s^* + K_N \|\tilde{y} - y\|_s^* \\ &\leq (K_N N + K_N) \|l - \tilde{l}\|_s^*, \end{aligned}$$

tedy je definice φ_1 korektní. Obdobně lze dokázat korektnost definice φ_2 .

Dále uvažujme stochastickou diferenciální rovnici

$$\begin{aligned} dX_t &= \varphi_1(X., Y., Z., t)X_t dt + X_t \sigma(N_t) dW_t, & X_0 &= x_0 \\ dY_t &= \varphi_2(X., Y., Z., t)Y_t dt - \gamma Y_t dt + \sigma(N_t) dW_t, & Y_0 &= y_0 \\ dZ_t &= \gamma Y_t dt + Z_t \sigma(N_t) dW_t, & Z_0 &= 0. \end{aligned} \quad (\text{R2})$$

Označíme-li $L_t = (X_t, Y_t, Z_t)$, pak můžeme rovnici (R2) psát ve tvaru

$$dL_t = b(L_t, t)dt + a(L_t)dB_t, \quad L_0 = (x_0, y_0, 0), \quad (\text{R3})$$

kde

$$b(l, t) = \begin{pmatrix} b_1(l, t) \\ b_2(l, t) \\ b_3(l, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1(l, t)x_t \\ \varphi_2(l, t)y_t - \gamma y_t \\ \gamma y_t \end{pmatrix} : \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{R}^3,$$

$$a(l) = \begin{pmatrix} x\sigma(x+y+z) & 0 & 0 \\ y\sigma(x+y+z) & 0 & 0 \\ z\sigma(x+y+z) & 0 & 0 \end{pmatrix} : \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{M}^3,$$

kde \mathbf{M}^3 značí matici typu 3×3 , a $B_t = (W_t, W_t^2, W_t^3)$ je třídímní Wienerův proces. Jelikož φ_1, φ_2 jsou progresivní funkcionály na $\mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) \times \mathbf{R}^+$ a σ je měřitelná, pak $b(l, t)$ je progresivní funkcionál

$$b : \mathcal{C}(\mathbf{R}^+, \mathbf{R}^3) \times \mathbf{R}^+ \rightarrow \mathbf{R}^3$$

a $a(l)$ je měřitelná fce

$$a : \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{M}^3.$$

Jelikož $\varphi_i(l, t)$ jsou omezené a lokálně lipschitzovské, lze ukázat, že i $b(l, t)$ je lokálně lipschitzovská. Z lokální lipschitzovskosti σ dostaneme lokální lipschitzovskost $a(l)$ a navíc lze ukázat, že pro libovolné N a $0 \leq t \leq N$ platí:

$$|a(l)| + |b(l, t)| \leq C_N \|l\|_t^*,$$

kde konstanta $C_N \in \mathbf{R}^+$ závisí na N a $|\cdot|$ a $\|\cdot\|_t^*$ jsou normy uvedené v podmínce (ii).

Pak z věty (12.1) v [2], str. 132, plyne, že rovnice (R3), resp. rovnice (R2), má jednoznačné silné řešení.

Nyní ukážeme nezápornost X_t, Y_t a Z_t ze soustavy (R2). Lze ukázat, že

$$X_t = x_0 \exp \left\{ \int_0^t \varphi_1(X_u, Y_u, Z_u, u) - \frac{1}{2} \sigma^2(N_u) du + \int_0^t \sigma(N_u) dW_u \right\}.$$

Vskutku, označíme-li $U_t := \int_0^t \varphi_1(X_u, Y_u, Z_u, u) - \frac{1}{2} \sigma^2(N_u) du$ a $V_t := \int_0^t \sigma(N_u) dW_u$, pak $X_t = x_0 \exp \{U_t + V_t\}$, tudíž dle Itôovy formule máme

$$\begin{aligned} dX_t &= x_0 \exp \{U + V\} (dU_t + dV_t + \frac{1}{2} d\langle U \rangle_t + \frac{1}{2} \langle V \rangle_t + \langle U, V \rangle_t) \\ &= X_t (dU_t + dV_t + \frac{1}{2} d\langle V \rangle_t) = X_t (\varphi_1(X_t, Y_t, Z_t, t) dt + \sigma(N_t) dW_t). \end{aligned}$$

Tedy X_t je řešením první rovnice soustavy (R2). Obdobně dostaneme vztah

$$Y_t = y_0 \exp \left\{ \int_0^t \varphi_2(X_u, Y_u, Z_u, u) - \frac{1}{2} \sigma^2(N_u) du - \gamma t + \int_0^t \sigma(N_u) dW_u \right\}.$$

Označíme-li nyní $U_t := \int_0^t \gamma Y_u du$, $V_t := \int_0^t \sigma(N_u) dW_u$,
 $S_t := \exp \left\{ V_t - V_0 - \frac{1}{2} \langle V \rangle_t \right\}$ a $R_t := \int_0^t S_u^{-1} dU_u - \int_0^t S_u^{-1} d\langle U, V \rangle_u$, pak dle
 věty (2.2.13) v [3], str. 292, dostaneme, že $\tilde{Z}_t := S_t R_t$ je řešením rovnice

$$\tilde{Z}_t = U_t + \int_0^t \tilde{Z}_u dV_u = \int_0^t \gamma Y_u du + \int_0^t \tilde{Z}_u \sigma(N_u) dW_u. \quad (\text{R4})$$

Jelikož rovnice (R4) odpovídá poslední rovnici soustavy (R2), a tedy Z_t je
 řešením rovnice (R4), pak z jednoznačnosti Z_t dostáváme

$$\begin{aligned} Z_t = \tilde{Z}_t = S_t R_t &= \exp \left\{ V_t - V_0 - \frac{1}{2} \langle V \rangle_t \right\} \cdot \int_0^t S_u^{-1} dU_u \\ &= \exp \left\{ V_t - \frac{1}{2} \langle V \rangle_t \right\} \cdot \int_0^t \exp \left\{ -V_u + \frac{1}{2} \langle V \rangle_u \right\} \gamma Y_u du \\ &= \exp \left\{ \int_0^t \sigma(N_u) dW_u - \frac{1}{2} \int_0^t \sigma^2(N_u) du \right\} \\ &\quad \cdot \int_0^t \exp \left\{ - \int_0^u \sigma(N_w) dW_w + \frac{1}{2} \int_0^u \sigma^2(N_w) dw \right\} \cdot \gamma Y_u du, \end{aligned}$$

tedy $X_t, Y_t, Z_t \geq 0 \forall t \geq 0$.

Na závěr označme $\Delta^{ab} := \{(x, y, z) \in [0, b]^3, a \leq x + y + z \leq b\}$ a definujme
 $\tau := \inf\{t > 0 : L_t \notin \Delta^{ab}\}$ první výstup $L = (X, Y, Z)$ z Δ^{ab} . Pak dostáváme

$$\begin{aligned} X_{t \wedge \tau} &= x_0 + \int_0^{t \wedge \tau} -\beta(X., Y., Z., u) X_u Y_u du + \int_0^{t \wedge \tau} X_u \sigma(N_u) dW_u \\ &= x_0 + \int_0^{t \wedge \tau} \varphi_1(X., Y., Z., u) X_u du + \int_0^{t \wedge \tau} X_u \sigma(N_u) dW_u \\ Y_{t \wedge \tau} &= y_0 + \int_0^{t \wedge \tau} (\beta(X., Y., Z., u) X_u Y_u - \gamma Y_u) du + \int_0^{t \wedge \tau} Y_u \sigma(N_u) dW_u \\ &= y_0 + \int_0^{t \wedge \tau} (\varphi_2(X., Y., Z., u) Y_u - \gamma Y_u) du + \int_0^{t \wedge \tau} Y_u \sigma(N_u) dW_u \\ Z_{t \wedge \tau} &= \gamma \int_0^{t \wedge \tau} Y_u du + \int_0^{t \wedge \tau} Z_u \sigma(N_u) dW_u. \end{aligned}$$

Jelikož má rovnice (R2) jednoznačné silné řešení, pak má z předchozí
 rovnosti i rovnice (R1) jednoznačné silné řešení na intervalu $[0, \tau)$.

Zbývá ukázat, že $\tau = \infty$. Nechť pro nějaké $t > 0$ je $N_t > b$. Pak označme
 τ_b čas posledního vstupu procesu N_t do b na intervalu $[0, t]$. Jelikož $N_0 \leq b$,
 pak $\tau_b \in [0, t]$, a s využitím vlastnosti $\text{supp}(\sigma) \subset [a, b]$ dostaneme

$$\begin{aligned} N_t &= n_0 + \int_0^t N_u \sigma(N_u) dW_u = b + \int_{\tau_b}^t N_u \sigma(N_u) dW_u \\ &= b + \int_{\tau_b}^t 0 dW_u = b \text{ s.j.}, \end{aligned}$$

tedy $N_t \leq b \forall t \geq 0$ s.j. Obdobně dostaneme vztah $N_t \geq a \forall t \geq 0$ s.j., tedy $a \leq N_t \leq b \forall t \geq 0$ s.j. Protože navíc $X_t, Y_t, Z_t \geq 0 \forall t \geq 0$ s.j., pak dostáváme $\tau = \infty$ s.j.

Tedy rovnice (R1) má jednoznačné silné řešení na $(0, \infty)$, čímž je důkaz hotov.

Poznámka: Ve větě byl uvažován koeficient β jako funkcionál. Každý z výše uvažovaných tvarů β , tj. $\beta \in \mathbf{R}^+$, $\beta \in \mathcal{C}(\mathbf{R}, \mathbf{R}^+)$, $\beta \in \mathcal{C}(\mathbf{R}^3, \mathbf{R}^+)$ a $\beta \in \mathcal{C}(\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^+, \mathbf{R}^+)$, lze však zapsat ve tvaru funkcionálu, a tedy předchozí věta lze aplikovat na všechny uvažované tvary koeficientu β .

3.2 Příklady

V klasickém Kermackově-McKendrickově modelu je koeficient β konstantní. To znamená, že přírůstek nemocných (dX_t) v čase t závisí pouze na počtu nemocných (Y_t) a počtu zdravých (X_t) jedinců v tomto čase. Ve skutečnosti však závisí počet nově nakažených na stavu populace po celý časový interval $[t - \tilde{t}, t]$, kde \tilde{t} je inkubační doba sledované nemoci. Proto může být vhodné použít například model s volbou koeficientu

$$\beta(x, y, z, t) = C \int_{t-\tilde{t}}^t y_u du,$$

kde C je kladná konstanta, a dodefinovat $Y_s = y_0$ na $(\tilde{t}, 0)$.

Při této volbě je koeficient β větší, resp. menší, pokud bylo během inkubační doby více, resp. méně, nemocných. Tato volba koeficientu β splňuje podmínku (ii), jelikož $|\beta(l, t)| \leq Cb\tilde{t}$ a $|\beta(l, t) - \beta(\tilde{l}, t)| \leq C\tilde{t} \|l - \tilde{l}\|_t^* \forall l, \tilde{l} \in \Delta_{ab}$. Vlastnost (i), tj. \mathcal{C}_t -progresivita procesu β_t , plyne ze spojitosti a \mathcal{C}_t -adaptovanosti procesu β_t , která plyne z \mathcal{C}_t -měřitelnosti zobrazení $l \mapsto y_t$ a z vlastností Lebesqueova interálu.

Další možné volby koeficientu β jsou:

$$\beta(x, y, z, t) = C \int_{t-\tilde{t}}^t \frac{y_u}{x_u + y_u + z_u} du,$$

$$\beta(x, y, z, t) = C \int_{t-\tilde{t}}^t \frac{x_u y_u}{(x_u + y_u + z_u)^2} du,$$

kde velikost koeficientu β nezávisí přímo na počtu nakažených, ale na poměru nakažených jedinců v populaci, resp. na součinu poměrů nakažených a zdravých jedinců, po celou inkubační dobu nemoci.

4 Závěr

Je zde ukázán stochastický model vývoje epidemie, který zobecňuje klasický Kermackův-McKendrickův model. Toto zobecnění je dáno jednak přidáním stochastické složky, která může zahrnovat například vliv migrace, a jednak zobecněním koeficientu β .

Dále je možné se zabývat limitním chováním populace nebo tím, jak do tohoto modelu zahrnout vliv očkování, popř. jak změnit stochastickou složku v tomto modelu tak, aby měla vliv i na poměry sledovaných skupin. Některé z těchto otázek jsou již řešeny v [1].

Reference

- [1] Štěpán J., Hlubinka D. (2006). *Kermack-McKendrick epidemic model revisited*. Preprint.
- [2] Rogers L.C.G., Williams D. (1994). *Diffusions, Markov processes and martingales, volume 2 - Itô calculus*. John Wiley and Sons, Chisenter, New York, Brisbane, Toronto, Singapore.
- [3] Dupačová J., Hurt J., Štěpán J. (2002). *Stochastic modeling in economics and finance*. John Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London.

Poděkování: Výzkum byl podporován grantem GA ČR 201-05-H007. Autor by také rád poděkoval panu prof. Štěpánovi za věcné připomínky a odbornou pomoc.

Adresa: J. Staněk, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: stanekj@karlin.mff.cuni.cz

GENE EXPRESSION DATA ANALYSIS FOR IN VITRO TOXICOLOGY

Petr Šimeček

Keywords: Skin sensitisation, microarrays, ANOVA.

Abstract: Microarray analyses have been performed on CD34⁺-progenitor derived dendritic cells that have been exposed to chemical skin sensitizers; allergens (4) and irritants (2). The aim of this work is to identify genes whose expression is affected by exposure to the allergens but not by the irritants. The inference is based on a dataset containing 72 microarrays.

1 Introduction

Skin sensitisation resulting in *allergic contact dermatitis* is an important health issue. As the name implies, it is the consequence of a direct contact of an allergen with the skin of a susceptible individual. The symptoms are itching, pain, redness, swelling and the formation of small blisters on the skin. Hundreds of chemicals are known to cause skin sensitisation. Currently, new chemicals are tested on animals like guinea pigs and there is a growing interest to substitute these animal testing methods by *in vitro* testing.

The crucial step in the process of developing *allergic contact dermatitis* is an activation of *Langerhans cells*, which are antigen presenting dendritic cells (DC) of the skin. The DC are capable of taking up foreign compounds (antigens), processing them and subsequently to present them on their surface membrane. During this process, the DC start to mature and they migrate to the lymph nodes, where they present the antigen to T-cells. Antigen specific T-cells will then mount the immune reaction. The Langerhans cells therefore play an important role in the initiation of the immune response and may be a logical choice as a biological cell model to be used for the development of an *in vitro* test for contact sensitisation. Unfortunately, obtaining a sufficient number of Langerhans cells from skin for *in vitro* testing is extremely difficult. That is why resembles are used instead. In this experiment CD34-DC cells have been chosen as a suitable biological cell model (cf. [3] and [7]).

The **CD34-DC cells** were derived from cord blood samples of 20 individuals. Each individual was exposed to one of the 6 chemicals tested for several timepoints ranging from 0.5 up to 24 hours. From the same individual, a control sample (exposure to the solvent of the chemical) was also taken for each timepoint.

After exposure, the mRNA of the corresponding pair of experimental and control sample is extracted, purified, amplified, reverse transcribed and indirectly labeled with fluorescent dyes Cy5 (red) and Cy3 (green), respectively. Equal amounts of both samples are then pooled and poured over a microarray glass slide where *hybridisation* can take place. The *microarray slide*

consists of a large number of single stranded DNA spots arranged in a grid. Each spot contains millions of copies of a DNA sequence corresponding to one gene. The number of genes that can be analyzed in an experiment is therefore dependent on the number of genes that are spotted on the microarray slide. During hybridisation the labeled cDNA sequences present in the pooled mixture will bind to their complementary sequences on the microarray. Unhybridized cDNA is washed off and the microarray is scanned in a laser scanner. Two images are obtained (1 red laser and 1 green laser) and a composed image is formed. The spot's intensity is related to the amount of the gene that has hybridized to the spot. The spot's color indicates if the gene was more abundant in the experimental sample (red spot) or in the control sample (green spot). More about a microarray methodology can be found in [4] and [1].

The main interest of this study is to identify the genes that are influenced by four of the inspected chemical **allergens** but not by the remaining two **irritants**.

Allergens	Abbreviation	Chemical formula
nickel sulfate	Nickel	$NiSO_4$
dinitrochlorobenzene	DNCB	$C_6H_3Cl(NO_2)_2$
eugenol	Eug	$CH_2CH_2CH_2C_6H_3(OCH_3)OH$
oxazolone	OXA	$C_{13}H_{18}N_2O_5S$
Irritants		
benzalkonium chloride	BC	$C_{24}H_{42}IN$
sodium dodecyl sulfate	SDS	$CH_3(CH_2)_{10}CH_2OH$

Table 1: List of chemical compounds.

Let us agree that the term “microarray” will referred to a scanned image for the given dye and the term “slide” will be used for a corresponding pair of control and experimental microarrays.

The thesis is divided in four sections. The first section introduces the problem and dataset. The methodology of preprocessing arrays and statistical tests is explained in the second section. The third section presents the results of the methods presented in the second part. Conclusions and discussion can be found in the last section.

2 Methodology

2.1 Background correction

The raw intensity of the spots is strongly associated with the background intensity (that is mean intensity in the neighborhood of the spot) as can be seen on Figure 1.

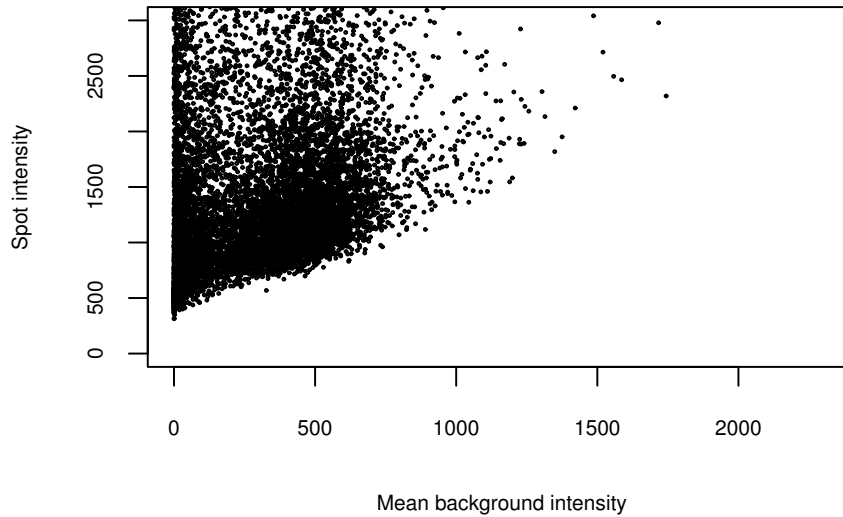


Figure 1: Scatter plot of intensities of spots and background for microarray 3, control sample.

That calls for a background adjustment. Let us denote R_i the raw spot intensity of the i^{th} gene, and B_i the mean background intensity for the i^{th} gene.

The most simple background adjustment is a calculation of a net intensity N_i as a difference of the raw spot intensity and the background intensity $N_i = R_i - B_i$. However, B_i can be larger than R_i due to a random variability. To avoid problems we should adjust for this

$$N'_i = \max(T, R_i - B_i), \quad (1)$$

where the threshold T is a low percentile (e.g. the fifth) of $R_i - M$ values and $M = \min_j(R_j)$.

2.2 Logarithmic transformation

Even after background adjustment, the difference between the net intensity of the experimental sample $N_i^{(1)}$ and the control sample $N_i^{(2)}$ is not nicely distributed. Hence the log-transformation is used to stabilize variance and normality (see Figure 2 for microarray 3).

2.3 Normalization

Due to technology imperfections, substantial differences in shape and support of the intensity distribution occur even among microarrays that are generated under exactly the same conditions. The purpose of normalization is to suppress such errors. Many choices of a normalization procedure can be found in the literature. Here, at first LOESS regression is used for within slide normalization (correction for location and scale) and then median correction is used for between slides normalization (correction for location).

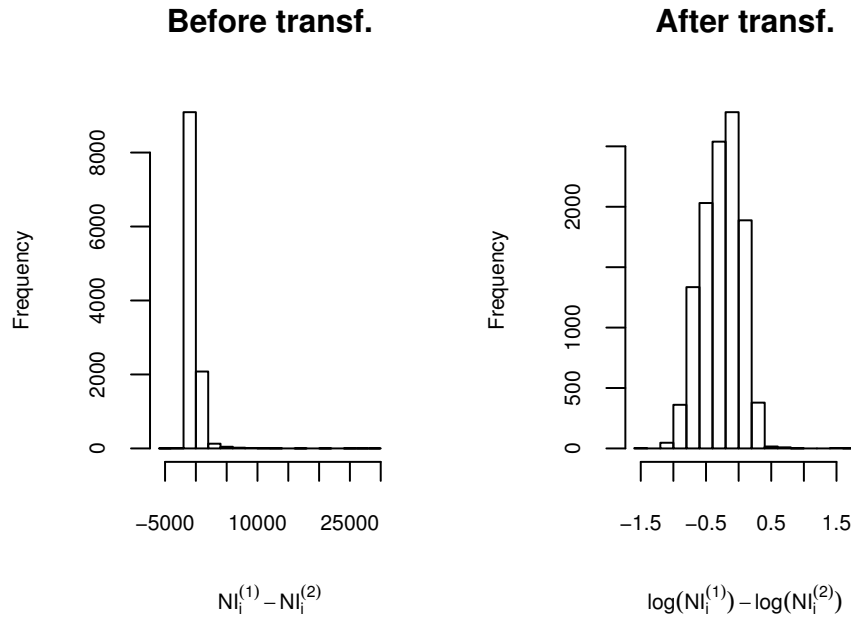


Figure 2: Histograms of $N_i^{(1)} - N_i^{(2)}$ and $\log(N_i^{(1)}) - \log(N_i^{(2)})$.

Let us denote log-transformed background adjusted arrays by $X^{(1)}, \dots, X^{(k)}, \dots, X^{(m)}$, where $X^{(k)} = (X_1^{(k)}, \dots, X_I^{(k)}) = (\log N_1^{(k)}, \dots, \log N_I^{(k)})$ and I is the number of investigated genes.

2.3.1 Median normalization The most simple normalization scheme transforms the arrays in such a way that mean, median or a few quantiles have the same value for all arrays. In this work a *median normalization* will be used, that is

$$\tilde{X}_i^{(k)} = X_i^{(k)} - \underset{j}{\text{median}} X_j^{(k)}, \quad k = 1, \dots, m.$$

2.3.2 Loess normalization Another possibility is to fit a linear model

$$X_i^{(2k-1)} = a_{2k} + b_{2k} \cdot X_i^{(2k)} + \epsilon_i^{(2k)}, \quad k = 1, \dots, \frac{m}{2},$$

where $\epsilon_i^{(2k)}$ is an error term, a_{2k} and b_{2k} are coefficients for $2k^{\text{th}}$ array. The arrays can then be normalized as

$$\tilde{X}_i^{(2k-1)} = a_{2k} + b_{2k} \cdot X_i^{(2k)}, \quad k = 1, \dots, \frac{m}{2}. \quad (2)$$

Instead of a global model, the normalization can be done locally, either piecewisely or by a *weighted local polynomial regression*. The later case is easily implementable by the function `loess` in [6]. Such regression assumes that a relation between $X^{(2k-1)}$ and $X^{(2k)}$ is smooth, and it is resistant to a small percentage of outliers, especially when the M-estimation option is used (ie. family=“symmetric”).

2.4 Quality assessment

In a microarray experiment, the quality of slides is usually graphically examined using scatter plots. This becomes difficult when the number of arrays is large like in this study. A helpful solution is to construct over-all arrays diagnostic plots as proposed in [5].

If, for a given array, $X_i^{(1)}$ and $X_i^{(2)}$ denote the log-intensities of i^{th} gene for the first and the second dye, respectively, then let

$$Y_i = X_i^{(1)} - X_i^{(2)} - A_i,$$

where the correction term A_i is an estimate of $X_i^{(1)} - X_i^{(2)}$ based on $X_i^{(1)} + X_i^{(2)}$ by the LOESS regression.

The idea is to divide A_i into two parts

$$\begin{aligned}\tilde{X}_i^{(1)}(\lambda) &= X_i^{(1)} - \lambda \cdot A_i, \\ \tilde{X}_i^{(2)}(\lambda) &= X_i^{(2)} + (1 - \lambda) \cdot A_i.\end{aligned}$$

Note that the difference $\hat{X}_i^{(1)}(\lambda) - \hat{X}_i^{(2)}(\lambda) = X_i^{(1)} - X_i^{(2)} - A_i = Y_i$ does not depend on λ .

The first diagnostic plot shows a correlation of $\hat{X}^{(1)}(\lambda)$ and $\hat{X}^{(2)}(\lambda)$ in dependence on λ (see Figure 3). The arrays with low variability produce lines near one, the high variability slides have lines near zero. If the dependencies between dye intensities is nonlinear then the graph becomes more curved and non-parallel with the x-axes.

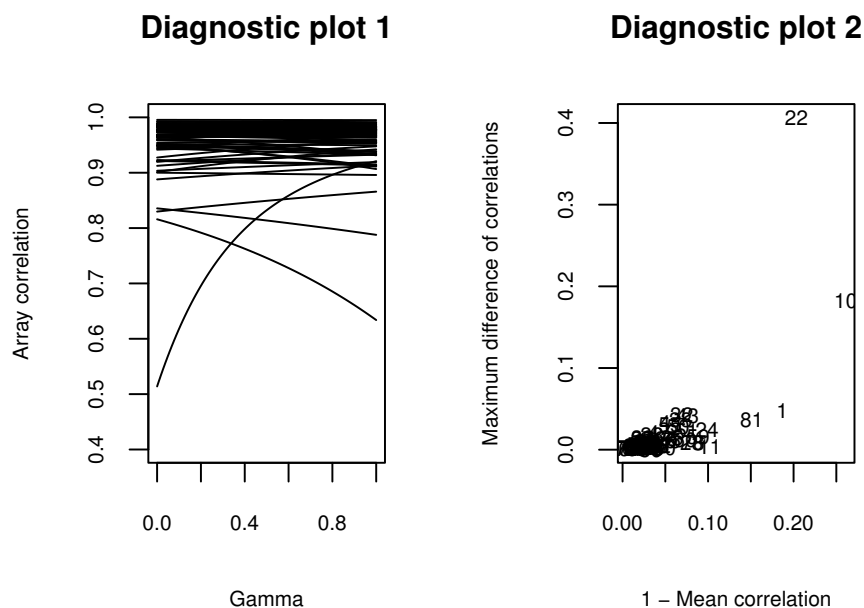


Figure 3: Diagnostic plots.

The second diagnostic plot is a scatter plot of pairs $(1 - \bar{\rho}, \rho_{\max})$, where $\bar{\rho}$ is the mean correlation of $\widehat{X}^{(1)}(\lambda)$ and $\widehat{X}^{(2)}(\lambda)$ over λ and it corresponds to the variability within the array; and ρ_{\max} is a maximum difference of correlations and corresponds to the linearity of the dependence. The outlying slides can be easily detected visually as those more distant from the origin. Under the assumption of normality a statistical test, whether the slide is outlying or not, is easy to conduct.

Both diagnostic plots (Figure 3) point to four obviously outlying arrays: 1, 10, 22 and 81. These arrays contain substantially more noise than the others and are therefore omitted in the rest of the analyses.

2.5 Statistical tests

When thousands of genes are tested for a change in expression due to an exposure, it can easily happen that a gene is marked as significant just by chance. Extra attention must be paid to multiplicity adjustment of the test level (e.g. Bonferroni, Šidák or Holm procedure).

The Holm–Šidák’s correction is used in the following analysis (cf. chapter 7 in [1]).

Let us consider a model

$$X_i^{(k)} = A_k + G_i + (GHM)_{i,h(k),m(k)} + \epsilon_i^{(k)}, \quad (3)$$

where $X_i^{(k)}$ stands for a log-intensity of i^{th} gene spot of the array k , A_k is an effect of k -array, G_i is a specific effect for i^{th} gene, $(GHM)_{i,h(k),m(k)}$ is an interaction effect corresponding to $h(k)$ hours exposure to $m(k)$ chemical (if k is an experimental array) to an expression of gene i and $\epsilon_i^{(k)}$ ’s are normal, mutually independent, identically distributed errors,

$$\epsilon_i^{(k)} \sim N(0, \sigma^2).$$

The object of main interest is a term $(GHM)_{i,h(k),m(k)}$ that is non-zero, if an expression of the gene i is touched by a chemical $m(k)$. In another words, for the given chemical we expect an expression of a gene to be constant up to array and error terms under the null hypothesis and we allow gene’s expression to vary in time under the alternative hypothesis. It is implicitly assumed that the time of exposure to water (in control sample) does not influence the gene expression.

It would be also imaginable to include a random effect $\pi_{i,p(k)}$ for a person $p(k)$ to acknowledge possible correlation of residuals for a given person. However, such mixed models are very hard to fit due to a size of the study and will not be examined here. Moreover, the small pilot study [2] found this effect as insignificant.

As we will see it is infeasible to fit the model (3) directly by standard R-functions (`lm` or `aov`) because of its memory requests (only the data structure

needs more than 100 MB of memory and other gigabytes are asked for a model matrix).

However, a fitting of model (3) is easy to implement. Let I stands for a number of genes and Π_j denotes a set of array numbers under conditions j (chemical, exposure time); $n(j)$ a number of elements of Π_j . If $k \in \Pi_j$, then an estimator of $X_i^{(k)}$

$$\widehat{X}_i^{(k)} = \frac{1}{n(j)} \sum_{l \in \Pi_j} X_i^{(l)}.$$

The residual sum of squares $RSS = \sum_{i,k} (\widehat{X}_i^{(k)} - X_i^{(k)})^2$ divided by σ^2 is χ^2 -distributed with $I \sum_j (n_j - 1)$ degrees of freedom.

For each gene i and chemical c the test of a submodel

$$\forall k, m(k) = c : (GHM)_{i,h(k),m(k)} = 0 \quad (4)$$

is performed. That means the new model $\widehat{X}_i^{(k)}(c, i)$ derived from (3) by substituting (4) is fitted and under an assumption that (4) truly holds

$$\frac{\frac{\sum_k (\widehat{X}_i^{(k)}(c, i) - \widehat{X}_i^{(k)})^2}{n^{(c)}}}{\frac{RSS}{I \sum_j (n_j - 1)}} \sim F \left(n^{(c)}, I \sum_j (n_j - 1) \right), \quad (5)$$

where $n^{(c)}$ is the number of non-zero exposure times for the chemical c .

Too high number on the left side of (5) leads to rejection of the null hypothesis (4) that the chemical c does not influence expression of the gene i .

3 Results

In this section, gene numbers from the data analysis described in Section 2 are reported (see Table 2 below).

67363	76647	77539	78869	120306	121251	144926
148421	159118	191519	191572	195357	198580	203008
203791	203805	204444	206632	241171	245299	246276
256984	262231	283099	293306	293755	293804	323500
324255	327337	365665	429448	429574	490811	530185
745347	755578	768168	770969	781233	783697	786674
810600	811126	825335	837908	858153	882548	897774

Table 2: List of gene numbers of 49 genes differently expressed after exposure to allergen but not to irritants.

4 Conclusion

This paper contains basic building blocks for a microarray methodology for the identification of genes whose expression is influenced by some treatment. The key goal has been to identify genes that are differently expressed after an exposure to any of four allergic chemical compounds while their expression seems not to be significantly changed by an exposure to irritants (see Table 1 for a list of chemicals). The list of 49 genes that have been found to be significantly differentially expressed is shown in Table 2. Translation of gene number to other formats (gene name, gene bank accession number, . . .) could be done via [8].

The main drawback of the study design is that the experimental sample has always been colored by the fluorescent Cy5-dye and the control sample by Cy3-dye. If there is a gene-specific effect of the dyes, then this effect would be indistinguishable from an exposure effect.

Reference

- [1] Amaratunga D., Cabrera J. (2003). *Exploration and analysis of DNA microarray and protein array data*. Wiley & Sons. ISBN 0-471273-98-8.
- [2] Van Broekhoven W.(2004). Statistical issues in cDNA microarray data analysis. Master's thesis, Hasselt University.
- [3] Casati S., Aeby P., Basketter D.A., Cavani A., Gennari A., Gerberick G.F., Griem P., Hartung T., Kimber I., Lepoittevin J.-P., Meade B.J., Pallardy M., Rougier N., Rousset F., Rubinstenn G., Sallusto F., Verheyen G.R., Zuang V. (2005). *Dendritic cells as a tool for the predictive identification of skin sensitisation hazard*. In The Report and Recommendation of EVCAM Workshop.
- [4] Draghici S. (2003). *Data analysis tools for DNA microarrays*. Chapman & Hall/CRC. ISBN 1-584883-15-4.
- [5] Park T., Yi S.-G., Lee S.Y., Lee J.K. (2005). *Diagnostic plots for detecting outlying slides in a cDNA microarray experiment*. *BioTechniques* **38**, 463–471.
- [6] R Development Core Team (2005). *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0.
- [7] Ryan C.A., Gildea L.C., Hulette B.C., Dearman R.J., Kimber I., Gerberick G.F. (2004). *Gene expression changes in peripheral blood-derived dendritic cells following exposure to a contact allergen*. *Toxicology Letters* **150**, 301–316.
- [8] Vmsr gene content database.
http://array.mc.vanderbilt.edu/clone_db/VMSR_clonedb.

Acknowledgement: I would like to thank dr. Verheyen for introducing me to the problem and an anonymous reviewer for his/her comments. This paper was supported by the grant GA ČR n. 201/05/H007.

Address: P. Šimeček, ÚTIA AV ČR, Pod Vodárenskou věží 4, 182 00 Prague

E-mail: simecek@atrey.karlin.mff.cuni.cz

STATISTICAL ANALYSIS OF COMPULSIVE CHECKING BEHAVIOR IN RODENTS – FRAILTY MODELS

Marie Šimečková

Keywords: Frailty model, Cox proportional hazard model, compulsive checking behavior.

Abstract: The influence of quinpirole (QNP) induced obsessive-compulsive disorder on the behavior of rodents is studied in a Morris water maze. The behavior of the QNP-sensitized animals is compared to the behavior of the control animals. Each animal was measured 24 times, the measurements were realized in four days. The frailty model, i.e. Cox proportional hazards model with random effects, was used to model the time which the animals need to find the hidden platform. It is concluded that the learning process is similar in the QNP-sensitized and in the control rodents. On the contrary, the memory is worse in the QNP-sensitized rodents.

1 Introduction

Obsessive-compulsive disorder (OCD) is an anxiety disorder. It is manifested in a variety of forms, but is most commonly characterized by a subject's obsessive drive to perform a particular task or set of tasks. To other people, these tasks may appear unnecessary and stupid, e.g. repeatedly checking that one's parked car has been locked before leaving it, but for the patient, such tasks can be felt critically important, and must be performed in particular ways for fear of dire consequences and to stop the stress build up. More about this disease can be found e.g. in [5].

To study the effect of disease on behavior under different types of conditions and to develop effective therapies, the animal model is used in some cases in the beginning of development, instead of human experiments. Here the impact of stress on the OCD complications is studied, using the quinpirole-induced compulsive checking model as is described and validated in [3]. Also, the rats' orientation and learning skills are observed.

In the experiment, 22 rats were included. To 10 of them the quinpirole (QNP) was administered, to the rest the saline solution was applied for control. All rats were tested in a Morris water maze.

The water maze is a round water tank with a hidden platform. The rat can swim but it is stressed by the water and wants to find the platform as quickly as possible. Each rat was put to the tank repeatedly and its learning process and spatial memory were studied.

Each animal was measured 24 times, the measurements were done in four days, six times each day. The time needed to find the platform was recorded.

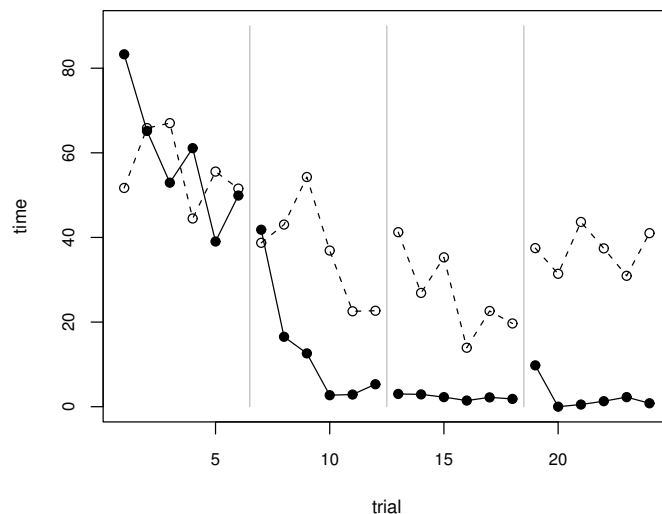


Figure 1: The mean profiles of the time that animals need to find the platform. Dashed lines are for QNP-sensitized and solid lines for control animals. The vertical lines separate different days. The censoring was ignored.

Animals failing to find the platform within 90 seconds were placed on the platform and left there for about fifteen seconds to orient. So the data are right censored. There are 26 % censorings in the QNP-sensitized animals and 13 % censorings in the control animals. On Figure 1 the mean profiles of time needed for finding the platform are plotted.

2 Statistical methodology

Frailty models offer the tool for handling the longitudinal character of the data in the survival framework. The notation commonly used in the survival analysis will be used below.

The commonly used procedure for modeling the relationship between the covariates and the censored outcome is the Cox proportional hazards model. It assumes the hazard function of the i -th individual as

$$\lambda_i(t) = \lambda_0(t)e^{\mathbf{x}'_i\boldsymbol{\beta}}, \quad (1)$$

where $\lambda_0(t)$ is an unspecified nonnegative function of time called the baseline hazard. The \mathbf{x}_i is vector of explanatory variables for the i -th observation and $\boldsymbol{\beta}$ the vector of parameters to be estimated, both of length p .

To estimate the unknown vector of coefficients $\boldsymbol{\beta}$ the maximization of partial likelihood is used. Its definition can be found e.g. in [1] or [4].

Although the partial likelihood function is not a likelihood function in the sense of being proportional to the probability of an observed dataset, it can be treated as likelihood for purposes of asymptotic inference. Denote the first derivative of log partial likelihood $l(\boldsymbol{\beta})$ as score vector $U(\boldsymbol{\beta})$ and

the negative second derivative of log partial likelihood as information matrix $\mathcal{I}(\boldsymbol{\beta})$. The estimator $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ of coefficients $\boldsymbol{\beta}$ is solution of the equation $U(\boldsymbol{\beta}) = 0$ and is consistent and asymptotically normally distributed, with mean $\boldsymbol{\beta}$ and variance equal to the inverse of expected value of the information matrix $(E\mathcal{I}(\boldsymbol{\beta}))^{-1}$. It is estimated as the inverse of observed information matrix $\mathcal{I}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}})$.

The frailty models introduce the random effects into the Cox regression. We include the random term specific for the animal into the Cox model to take the correlation between measurements corresponded to one individual into account. Then the hazard function for the j -th measurement of the i -th animal has the form

$$\lambda_{ij}(t) = \lambda_0(t)e^{\mathbf{x}'_{ij}\boldsymbol{\beta} + \zeta_i}. \quad (2)$$

The $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_1, \dots, \zeta_n)$ is a vector of entirely independent normally distributed random variables with zero mean and variance θ^2 . Other possible distribution of random effects is the gamma distribution of the $e^{\boldsymbol{\zeta}}$. For our data, the results are almost identical in both these cases.

The estimation of parameters in this model is based on the penalized Cox model. It assumes the variables $\boldsymbol{\zeta}$ are latent variables that need to be estimated. The estimators of parameters $\boldsymbol{\beta}$ and $\boldsymbol{\zeta}$ are found by maximization of so called penalized partial likelihood, defined as $pl(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\zeta}; \gamma) = l(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\zeta}) - g(\boldsymbol{\zeta}; \gamma)$. The $l(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\zeta})$ is the Cox partial likelihood, and the penalty function $g(\boldsymbol{\zeta}; \gamma)$ add the penalty to "less desirable" values of $\boldsymbol{\zeta}$. Using different types of the penalty function, the priority is given for some values of $\boldsymbol{\zeta}$. The γ is nuisance parameter, it can balance the properties of the penalty function. In the case of frailty models the function g depends on the distribution of $\boldsymbol{\zeta}$, the parameter γ controls the variance of the random effects.

The negative second derivation of penalized partial log likelihood is equal to

$$H(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\zeta}) = \mathcal{I}(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\zeta}) - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -g''(\boldsymbol{\zeta}) \end{pmatrix} = \mathcal{I}(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\zeta}) + G(\boldsymbol{\zeta}).$$

The matrix $\mathcal{I}(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\zeta})$ is the information matrix of Cox model (1). Denote the matrices $H = H(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\boldsymbol{\zeta}})$, $\mathcal{I} = \mathcal{I}(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\boldsymbol{\zeta}})$, and $G = G(\hat{\boldsymbol{\zeta}})$. Instead of the inverse of matrix H , the matrix $V = H^{-1}\mathcal{I}H^{-1}$ is used as the estimator of variance matrix of parameter estimators $(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\boldsymbol{\zeta}})$. The number of degrees of freedom for the model is equal to trace of the matrix $H \cdot V$.

To test the significance of the covariates the Wald type test or the likelihood ratio test can be used. Let assume that the null hypothesis is written as $C \cdot (\boldsymbol{\beta}', \boldsymbol{\zeta}')' = 0$, C is the contrast $(p + n) \times k$ matrix. The Wald test statistic is suggested as $(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\boldsymbol{\zeta}})(CH^{-1}C')^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}}', \hat{\boldsymbol{\zeta}})'$. The likelihood ratio statistics is equal to two times the difference of penalized log-likelihoods of the model and of the submodel defined by the null hypothesis.

The distribution of these two test statistics is more complicated than in the model without random effect. In [2] the distribution of the Wald statistic is derived for the case the nuisance parameter γ is known. In that case the

distribution of the test statistics under the null hypothesis is asymptotically the same as the distribution of random variable

$$\sum_{i=1}^k t_i X_i^2, \quad (3)$$

where t_i 's are the eigenvalues of the matrix $(CH^{-1}C')^{-1}(CVC')$, and X_i 's are independent standard normal distributed random variables. Using the usual χ^2 distribution with degrees of freedom equal to difference of degrees of freedom in the model and the submodel is too conservative in this case.

In our study the variance of random effect, and consequently the parameter γ , is unknown. As is written in [4], the formal justification of the asymptotic distribution of the test statistics in this case is lacking. We used both mentioned distributions, the χ^2 distribution and the distribution defined in (3), for evaluation of the p-values of the tests. We also proposed a simulation method for the testing of submodel.

In this simulation procedure the Wald or the likelihood ratio test statistic is compared to the test statistics computed from generated data. More precisely, the submodel is fitted, and the survival function is estimated. New values of survival times are generated based on this submodel, and the test statistic is calculated for this new data. The generation process is repeated many times. The percentage of the values of the test statistic computed for the generated data that have been greater than the value of the original test statistic is taken as the p-value of the test. That means that the submodel is rejected if less than five percent of the generated statistics are greater than the original one. In this study the generation was repeated 5,000 times.

Both, the Wald test and the likelihood ratio test were used. Fortunately, the conclusions based on these two tests using all three mentioned possibilities of evaluation of the p-values are consistent for our models.

An auxiliary way to recognize the optimal model is offered by the Akaike information criterion (AIC), $AIC = -2pl(\hat{\beta}, \hat{\zeta}) + k \cdot df$. The $pl(\beta, \zeta)$ is the penalized log likelihood, df is the number of degrees of freedom in the model. The constant k was taken equal to 2 in this study. In addition, the conclusions based on the AIC with this constant equal to 3, which is recommended in the survival analysis framework e.g. in [1], are identical.

More information about survival analysis and Cox model can be found e.g. in [1] or [4], about penalized and frailty models in [4].

The frailty models were fitted in the environment R, using the function `coxph` in package `survival`, with the term `frailty` included into the formula.

3 Results

Figure 1 of mean profiles on page 314 clearly show, that the time decreases as the sequence number of trial increases, and this decrease is not linear. Consequently, we include the sequence number of trial and its second power

to our model. The variable *number of trial* range from 1 to 24. Figure 1 also shows that the result is influenced by the day; notice the skips between the last observation in one day and the first observation in the following day, especially for the QNP-sensitized animals. So the unordered factor variable *day* is included in the model too. The interactions between the *day* and the variable *number of trial* and *number of trial squared* are added to allow the change of effect of day in later trials. Finally, the mean profiles differs for the two treatment groups (control and QNP-sensitized) and so the variable *treatment* and its interactions with all variables mentioned above are included too.

In our richest model the hazard function for the j -th measurement of the i -th animal is modeled as

$$\begin{aligned} \lambda_{ij}(t) \sim \lambda_0(t) \cdot \exp \left(\text{trt}_i + \text{trial}_j + \text{trial}_j^2 + \text{day}_j + \text{trt}_i : \text{trial}_j + \right. \\ \left. + \text{trt}_i : \text{trial}_j^2 + \text{trt}_i : \text{day}_j + \text{trial}_j : \text{day}_j + \text{trial}_j^2 : \text{day}_j + \right. \\ \left. + \text{trt}_i : \text{trial}_j : \text{day}_j + \text{trt}_i : \text{trial}_j^2 : \text{day}_j + \zeta_i \right), \end{aligned} \quad (4)$$

where the variable t means the time the animal needs to find the platform. The random effect is assumed to be normally distributed.

Many submodels of this model were tried, let us mention three of them. The richest submodel without the variable *trial squared* can be pointed out, i.e. the model

$$\begin{aligned} \lambda_{ij}(t) \sim \lambda_0(t) \cdot \exp \left(\text{trt}_i + \text{trial}_j + \text{day}_j + \text{trt}_i : \text{trial}_j + \text{trt}_i : \text{day}_j + \right. \\ \left. + \text{trial}_j : \text{day}_j + \text{trt}_i : \text{trial}_j : \text{day}_j + \zeta_i \right). \end{aligned} \quad (5)$$

To identify the optimal submodel the Akaike information criterion and the likelihood ratio test of submodels were used.

The lowest submodel derived from model (4) is model which includes the *trial*, *trial squared*, *day*, *treatment* and interaction between *treatment* and *day*, i.e.

$$\lambda_{ij}(t) \sim \lambda_0(t) \cdot \exp \left(\text{trt}_i + \text{trial}_j + \text{trial}_j^2 + \text{day}_j + \text{trt}_i : \text{day}_j + \zeta_i \right). \quad (6)$$

The lowest submodel without the *trial squared* term includes all non-interaction terms and interaction between *trial* and *day* and between *time* and *treatment*, i.e.

$$\lambda_{ij}(t) \sim \lambda_0(t) \cdot \exp \left(\text{trt}_i + \text{trial}_j + \text{day}_j + \text{trt}_i : \text{trial}_j + \text{trial}_j : \text{day}_j + \zeta_i \right). \quad (7)$$

The model (6) is clearly the best, using the AIC criterion and the test of submodels. So our conclusions about the dependence of time the animal need to find the platform on the treatment and the sequence number of trial

Effect	coefficient	standard error	hazard ratio	p-value
trt QNP	-0.0358	0.2601	0.9648	0.9113
trial	0.3115	0.0683	1.3655	< 0.0001
trial ²	-0.0070	0.0023	0.9930	0.0026
day 2	0.7579	0.3027	2.1339	0.0125
day 3	0.7854	0.4369	2.1933	0.0728
day 4	0.5584	0.5429	1.7480	0.3052
trt QNP, day 2	-1.2016	0.3081	0.3007	0.0001
trt QNP, day 3	-1.6718	0.3091	0.1879	< 0.0001
trt QNP, day 4	-2.0829	0.3211	0.1246	< 0.0001
θ^2	0.2977			

Table 1: The parameter estimates in the model (6). The p-values are based on the Wald test with the test statistic χ^2 distributed.

are based on this model. The parameter estimates can be found in Table 1. Let us note that all the results are almost identical in the case the random effect is supposed to be gamma distributed.

The distribution of the test statistic in the case when the variance of random effect is unknown is problematic, as is explained above. Both the likelihood ratio test and the Wald test were used to test the submodels, and the three mentioned ways of evaluation their p-values were examined. The results are shown in Table 2. The only important difference in the conclusions comes in the tests for model (7). In this case the likelihood ratio test with the distribution (3) shows significant difference between the model (4) and the submodel (7), in contradiction to the other distributions and the Wald test. However, we are interested mostly in the test for the submodel (6) and the conclusions are consistent in that case.

On figure 2 the fitted values of hazards, multiplied by (-1) , in different trials and for control and QNP-sensitized animals are plotted.

The estimates of the hazard ratios in Table 1 can be interpreted in the sense of risk that the animal find the platform.

In the first trial, the risk of finding the platform is almost identical for the QNP-sensitized and the control animals. But, in the last trial an important difference in risks for these two groups is developed. The risk of finding is much lower for the QNP-sensitized, it is equal to 12% of the risk for the control animals.

Now we focus on improvement in finding between the first and the last trial, in both treatment groups separately. For the QNP-sensitized animals, the risk of finding is 5.08 times higher in the last trial than in the first trial. For the control animals, the improvement is much more important, the risk in the last trial is 40.79 times higher than in the first trial.

The effects of variable day can be understood as the effect of forgetting

Wald test		p-values		
	Test statistic	χ^2 distr.	distr. (3)	simulation
Submodel (5)	12.828	0.1191	0.12	0.0944
Submodel (6)	17.881	0.2316	0.21	0.1752
Submodel (7)	22.062	0.0911	0.08	0.0667
Likelihood ratio test		p-values		
	Test statistic	χ^2 distr.	distr. (3)	simulation
Submodel (5)	13.094	0.1098	0.11	0.1631
Submodel (6)	19.443	0.1640	0.15	0.1772
Submodel (7)	24.045	0.0542	0.04	0.0830

Table 2: The test statistics and p-values of the Wald and the likelihood ratio tests of submodels of the model (4).

or relaxation during the night. This effect is different for the QNP-sensitized and for the control animals. For the control animals only the first night has significant influence on the risk function. The results in the second day are more than two times better than the results in the first day. Between the third and the fourth day the risk of finding the platform decrease to its 80 %. Other situation becomes for the QNP-sensitized animals. In that case during all the nights the risk is decreased. The decreasing takes 64 % between the first and the second days and between the second and the third day. Between the third and the fourth day the risk decrease to its 0.53 %. (Note that because of the number of trials' influence the actual decrease is a bit lower.)

From this results we can conclude both the QNP-sensitized and the control animals learn the arrangement of water maze. But for the QNP-sensitized animals the skills to find the platform change in time much less.

4 Conclusions

We conclude that the animal with quinpirole-induced obsessive-compulsive disorder behave differently than the control animal.

It was found out that the trends in the time needed to find the platform are different for the two treatment groups. The difference lies not in the effect of the sequential number of trial but in the effect of the day.

If we interpret the effect of the sequential number of trial as the learning skills and the effect of day as the spatial memory, it can be concluded that the learning skills are similar in the animals with induced OCD and in the control animals but the memory is significantly worse in the animals with induced OCD.

For the QNP-sensitized animals, the rest between two days affect the animals' results significantly. The time which these animals need to find the platform increases between the last observation in the one day and the first

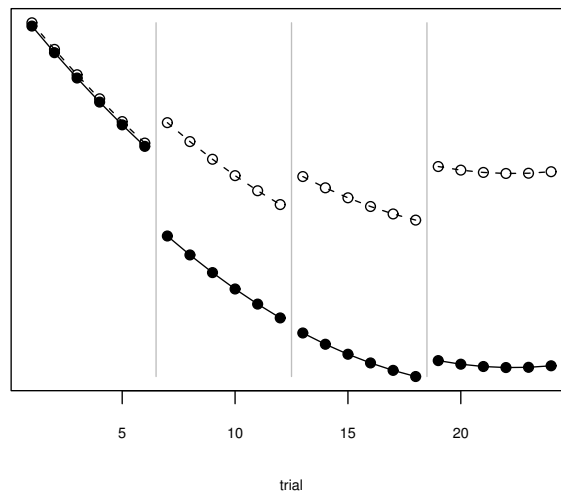


Figure 2: The fitted values of hazards, multiplied by (-1) . The black circles and the solid line correspond to the control animals, the white circles and the dashed line correspond to the QNP-sensitized animals. On the y -axis is minus logarithm of the mean values of the ratio of hazard function for the QNP-sensitized or control animal in the given trial and the baseline hazard.

observation in the following day. In the control animals, only the effect of the first night is significant, and, on the contrary to the QNP-sensitized animals, it improves the results.

Reference

- [1] Collett D. (2003). *Modelling survival data in medical research* (Second edition). Chapman & Hall/CRC.
- [2] Gray R.J. (1992). *Flexible methods for analyzing survival data using splines, with applications to breast cancer prognosis*. J. Amer. Stat. Assoc. **87**, 942–951.
- [3] Szechtman H., Sulis W., Eilam D. (1998). *Quinpirole induces compulsive checking behavior in rats: a potential model of obsessive-compulsive disorder (OCD)*. Behav. Neurosci. **112**, 1475–85.
- [4] Therneau T.M., Grambsch P.M. (2000). *Modeling survival data: extending the Cox model*. Springer-Verlag, New York.
- [5] Wikipedia, the free encyclopedia (2005). http://en.wikipedia.org/wiki/Obsessive-compulsive_disorder.

Acknowledgement: The paper was supported by grant GA ČR 402/06/0408. It is based on my master project at Hasselt University in Belgium.

Address: M. Šimečková, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8

E-mail: simecko@karlin.mff.cuni.cz

PŘÍSPĚVEK K DIDAKTICE PRAVDĚPODOBNOСТИ A STATISTIKY

Milena Špínková

Klíčová slova: Statistické myšlení, statistická gramotnost.

Abstrakt: Vliv náhodných jevů na současnou společnost a především množství dat statistického charakteru, s nimiž je občan denně konfrontován a jimiž by se měl řídit, klade značné nároky na statistické myšlení každého jednotlivce. Současná rodinná i školní výchova však vytvoření tohoto způsobu myšlení nenapomáhá. Zlepšení této situace je dlouhodobý proces vyžadující především výchovu učitelů, kteří by měli mít alespoň základní znalosti o roli náhodných jevů v lidské historii, o různých interpretacích pojmu pravděpodobnosti a o metodách sběru, úpravy, interpretace a prezentace dat.

1 Úvod

V pedagogice v poslední době převládá názor, že každý vědní obor, resp. každý obor lidské činnosti, od nás vyžaduje jistou specifickou formu myšlení, usnadňující studium, rychlé proniknutí do zkoumané problematiky a dosažení kvalitních výsledků. Úkolem základní a střední školy je pak spíše než nakupení konkrétních znalostí výchova k základním formám myšlení o přírodních i společensko-vědních jevech. Obecně negativní vztah k pravděpodobnosti a statistice není a nemůže být chybou či nedostatkem občanů. K plné zodpovědnosti za něj je třeba povolat naše školství – od tvůrců osnov a učebních plánů po jednotlivé učitele.

Teorie pravděpodobnosti je základem pro modelování náhodných procesů, tj. souborů dějů s nejistým výsledkem, které se s různě silnou vzájemnou vazbou realizují v diskrétním nebo spojitém čase. Takové děje neustále probíhají v našich soukromých životech i ve společnosti. Řada z nich je plynule zpracovávána a občan žijící v současné informační civilizaci je vystaven neustálému tlaku nejrůznějších statistických dat i jejich interpretací. Měl by resp. často nevyhnutelně musí o ně opírat svá občasná i každodenní rozhodnutí. Uvedme alespoň nejběžnější příklady těchto informací: veřejné mínění o různých problémech, doporučení k nákupům, politické preference, údaje o zločinnosti a dopravních nehodách, podmínky a přednosti různých uložení úspor, data o nemocnosti, populačních tendencích, nezaměstnanosti, daňovém zatížení, pracovních příležitostech, vzdělávacím procesu a společenské objednávce profesí.

Pravděpodobnostní a statistické myšlení je od občanů tedy sice neustále požadováno, ale jak k němu vychovávat, jak mu učit, zatím zdaleka není jasné. Výuce pravděpodobnosti nebyla nikdy věnována příliš velká pozornost. Ještě stále ji spojujeme především s hrami, kterým se sice lidstvo věnuje po velkou část svého vývoje, ale nijak jej neurčují. Sledování vztahu společnosti

k náhodným jevům nám odkryje některé specifické stránky našeho myšlení a jednání, např. lpění na kauzalitě a spoléhání resp. neodůvodněné očekávání pro nás příznivého výsledku náhodného jevu. Proto vyučování historie teorie pravděpodobnosti do školní výuky jistě patří.

Vůbec žádná pozornost není ve výuce, a to ani ve vysokoškolské, věnována různým možnostem přístupu k náhodným dějům, jimž odpovídají různé interpretace pojmu pravděpodobnosti [3]. Přitom matematická teorie pravděpodobnosti vychází z velmi obecného a dalo by se říci až hluboce formálního pojetí náhodných jevů na straně jedné, a ve statistické praxi naopak používá řady omezujících předpokladů, které v konkrétních případech nemohou být splněny. Je například patrné, že interpretace náhodných dějů vhodné pro vědecké a průmyslové využití lze stěží aplikovat na konkrétní individuální životy ovlivněné rodinou i společenskou výchovou počínaje a léčením chorob zděděných i osobním a společenským způsobem života vyvolaných končce. Tedy i tato problematika by nesporně měla být obsahem obecného vzdělání.

Třetí okruh otázek představuje zpracování náhodných dějů probíhajících v rámci početných souborů jedinců, tedy statistickou úpravu dat. I ta má svou historii a přináší množství obtížných problémů, o nichž by občané měli mít alespoň zběžnou představu. Její výsledky je totiž systematicky ovlivňují. Povšimneme si níže alespoň její role ve společenských vědách.

2 Poučení z historie pravděpodobnosti

Záliba lidí v hrách založených na náhodě je velmi stará (podle archeologů se hrálo již před 40 000 lety); v nejstarších dobách převažovaly hry založené na házení kostek. V historických dobách byl vztah společnosti ke hrám vesměs negativní vzhledem k jejich průvodním zjevům (ruinování hráčů, spory a rvačky, odvádění od jiných činností). Bible hru přímo zakazovala, v antickém Římu se smělo hrát pouze v čase Saturnalií, později hry zakazovali králové a potírala církev v kázáních i na koncilech. V současné době je vztah společnosti ke hrám shovívavý. Hry umožňují poměrně málo škodlivé trávení volného času a jsou předmětem rozsáhlého podnikání. Zábavní průmysl vyrábí nepřeborné množství moderních her, které spotřebou času a dynamickým působením na peněžní oběh zcela vytlačují historické způsoby náhodou řízené zábavy.

Počátek teorie pravděpodobnosti se objevuje teprve v 17. století. a je spojován se jmény Blaise Pascala a Pierra Fermata, kteří problémy týkající se hry v kostky a dělení sázky v roce 1654 řešili ve své korespondenci. První veřejně dostupnou publikací byla krátká práce Huyghensova *De ratiociniis in ludo aleae* dokončená v roce 1665. Jedním z vysvětlení pozdního objevení teorie je, že hráči dávali přednost spoléhání na štěstí před zkoumáním neúprosných zákonitostí.

Náhodné jevy byly využívány také k věštbám – u Řeků, Římanů i Germánů. Obdobu věštění můžeme nalézt v dnešní době na stránkách internetu (Tarot, Runy, I-Ťing). Populární bylo věštění z Vergilia: Aeneida, byla ote-

vřena na náhodné stránce, poslepu vybrán řádek a interpretován. U křesťanů byla (a možná stále je) k podobným účelům používána Bible.

Skutečné pravděpodobnosti úvahy se však vyskytují v tóře a v rabínské literatuře. Náhoda je tam využívána jako prostředek k řešení mnohoznačných situací, přičemž její rozhodnutí bylo považováno za vyjádření boží vůle ve věcech podstatných a za nestranný soud v záležitostech denního života. V liturgii i pro nalezení práva bylo nejvíce rozšířeno losování z urny (dělení majetku, dědictví). Losem se řídily také zvířecí oběti, služby v chrámu, dělení masa obětovaných zvířat mezi sloužící kněžstvo. Jsou zde rozebírána pravidla dělení majetku, výjimky z povinné obřizky v případě, že předchozí synové po ní zemřeli i pravidla vyhlášení epidemie v závislosti na podílu (relativní četnosti) onemocněvších lidí.

Vidíme, tedy, že uplatnění pravděpodobnosti pro řešení obtížných reálných problémů je daleko starší, než její použití v hráčské praxi. Stojí také za úvahu se zamyslet a studentům připomenout, kolik rozhodujících momentů historie (ztracených bitev a neúspěšných tažení, dynastických sporů, státních krizí) bylo způsobeno nepředvídanými změnami počasí, propuknutím epidemie či jinými náhodnými jevy.

3 Různá pojetí pravděpodobnosti

Epistemologická interpretace pravděpodobnosti je založena na představě, že bez člověka by pravděpodobnosti nebylo třeba a že je důsledkem jeho neúplných znalostí. Dělí se do tří hlavních směrů. Prvním z nich je *klasická interpretace* zastoupená především P.-S. Laplacem a A. de Moivreem a omezující se na soubory stejně možných elementárních jevů. Druhý směr představuje *logická interpretace* spojená se jmény W. E. Johnsona, J. M. Keynesa, H. Jeffreya a R. Carnapa. Posledním směrem je *interpretace subjektivní*, jejímiž předními zastánci byli F. P. Ramsay a B. de Finetti; již několik desítek let před nimi však tyto myšlenky zpracoval ve své knize *Síla přesvědčení* (1881) český katolický kněz a matematik Václav Šimerka.

Logická interpretace vychází z představy, že pravděpodobnost lze studovat rozšířením postupů deduktivní logiky. J. M. Keynes v knize *Treatise on probability* (1921) píše: *Teorie pravděpodobnosti je logická, protože se zabývá stupněm přesvědčení, které je rozumné mít za daných podmínek, a ne pouze okamžitými přesvědčeními jednotlivců, které mohou nebo nemusejí být rozumné.* Podle něj tedy existuje schopnost logické intuice, kterou alespoň někdy nebo někteří z nás dokážeme logickou pravděpodobnost vnímat.

Právě tuto schopnost však silně zpochybnil F. P. Ramsey v práci *Truth and probability* (1931) kde píše: *Ve skutečnosti se nezdá, že by existovaly takové pravděpodobnostní relace, sám je nevnímám a navíc ve mně bují podezření, že ostatní také ne.* Logická interpretace byla rozvojem interpretace subjektivní na čas zatlačena do pozadí.

Subjektivní interpretace reprezentuje naše každodenní pravděpodobnostní uvažování nad možnými situacemi typu „tak pozdě už pravděpodobně

nepojede žádný autobus“. Pravděpodobnost je tedy stupeň osobního přesvědčení či víry v jednu nebo jinou možnost. Velkou roli v logické i subjektivní interpretaci hrají pravděpodobnosti podmíněné: pravděpodobnost $P(H|S)$ je stupeň přesvědčení o hypotéze H za situace S . Např. naše osobní přesvědčení o možnosti cesty autobusem se změní, když si vzpomeneme, že je neděle.

Objektivní interpretace pravděpodobnosti (též se užívá termínu *fyzikální pravděpodobnost*) se nejvíce uplatňuje ve vědě i v jejích průmyslových aplikacích. Podle ní jsou náhodné jevy na lidském poznání a lidské existenci zcela nezávislé. Dělí se do dvou hlavních směrů: *četnostní interpretace* je spojena se jmény J. Venn, F. Y. Edgeworth, R. von Mises a R. Carnap a *propenzitní interpretace* pochází od K. Poppera, který zpočátku vycházel z interpretace četnostní, ale posléze ji opustil.

Četnostní interpretace vnímá pravděpodobnost jevu jako limitu jeho relativní četnosti pro vysoký počet pokusů. Je ovšem zřejmé, že není v našich silách zajistit, aby pokusy probíhaly v naprosto identických podmínkách. Je známo, že vynecháním libovolně vysokého konečného počtu počátečních členů posloupnosti nezměníme její limitu, avšak právě pouze tyto „nedůležité“ členy posloupnosti jsme schopni opakováním pokusu zjistit. Proto četnostní interpretace musela od samého počátku řešit problém, jak vybrat posloupnosti pokusů - *kolektivy*, zajišťující stabilitu relativních četností. Četnostní interpretace samozřejmě ztrácí smysl pro konkrétní neopakovatelné jevy (např. konkrétní osoba a její zdravotní stav a ovšem také působení léků a léčebných procedur na konkrétní kolektiv pokusných osob). Na četnostní interpretaci je založena řada dnes široce využívaných statistických metod, např. intervaly spolehlivosti odhadu střední hodnoty a další.

Propenzitní interpretace je chápána jako vnitřní dispozice (*propensita*) děje stát se s jistou pravděpodobností. Tento typ děje můžeme sledovat např. ve fyzice u rozpadu radioaktivních atomů, v biologii u genetického výběru transformací DNA, ale také v sociologii a u dopravních nehod.

4 Statistika v lidské společnosti

Souvislost mezi pravděpodobností a statistikou byla zpočátku velmi volná, možná dokonce žádná. Slovo statistika jako první patrně použil Girolamo Ghilini (1589 - 1669) v nevydané práci *Ristretto della civile, politica, statistica e militare scienza* popisující nenumerické znalosti o státu, jeho obyvatelstvu, životních podmínkách, právu, obchodu a výrobě. Až v polovině 18. stol. se při snaze jednotlivé státy vzájemně porovnat objevují číselné údaje a posléze se stávají hlavním obsahem tzv. tabulkové statistiky rozvíjející se intenzivně s nástupem absolutistických vlád a jejich snahou o získání co nejširších podkladů pro vybírání daní.

V roce 1660 začíná vyučovat statistiku Hermann Conring na universitě v Helmstadtu, zpočátku je přísně nenumerická a pro rozlišení od úřední tabulkové je nazývána statistikou univerzitní a stává se součástí právního a posléze i historického vzdělání. Díky rostoucím finančním požadavkům monar-

chí však univerzitní statistika postupně zaniká a celé 19. století je obdobím rozvoje státní tabulkové statistiky.

Mimořádnou zásluhu o rozvoj statistiky má belgický astronom L.A.J. Quetelet (1796 - 1874), který začal aplikovat numerické postupy nejen na různé stránky společenského života (především na zločinnost), ale i na jednotlivé občany a přichází s myšlenkou *průměrného člověka*.

Charakteristické znaky společenských náhodných jevů, především jejich variabilita, byly v té době zanedbávány a pozornost byla věnována hledání analogií k fyzikálním zákonům, v nichž by střední hodnoty, odvozené z dat a relativního zastoupení jejich různých složek, hrály roli fyzikálních konstant. To je ostatně dodnes přetrvávající laická představa o statistice. Teprve na sklonku 19. století přicházejí s novými výukovými koncepcemi F. Galton (pod vlivem Darwinovy teorie o přírodním výběru) a K. Pearson v souvislosti s aplikacemi statistiky v biologii. Vzniká biometrická statistická škola, považující biologické charakteristiky za nezávislé stejně rozdělené jevy, a věnující pozornost pravděpodobnostním rozdělením, variabilitě jevů, regresi, statistickým testům. Ve dvacátých a třicátých letech 20. století vytváří R.A. Fischer statistiku malých výběrových souborů s aplikacemi v zemědělství. Zároveň je znovu navázáno úzké spojení s teorií pravděpodobnosti, jež bylo koncem 18. století přerušeno na základě představy, že teorie založená na hrách nemůže být aplikována na společenské jevy.

Díky axiomatickému základu vybudovanému Kolmogorovem ve třicátých letech 20. století se pravděpodobnost se statistikou stávají obecně uznávanou a respektovanou částí matematiky. Od té doby je statistika pevnou součástí vysokoškolského vzdělání (přírodovědecké fakulty, sociální, ekonomické a technické školy), velmi zvolna se prosazuje i v základním školství. Dnes je ovšem blízkost pravděpodobnosti i statistiky k matematice zpochybňována vzhledem k tomu, že se opírají o různé typy logiky.

5 Poznámky k výuce pravděpodobnosti a (matematické) statistiky

Koncem minulého století došlo k prudkému nárůstu výzkumu a prací zaměřených na pojem *statistické myšlení*. Přestože se statistika ve školách v různé míře a na různé úrovni vyučuje už přes tři sta let, o podstatě a složkách výuky nebylo nikdy dostatečně podrobně uvažováno. Mezi vědci a pedagogy zabývajícími se touto problematikou neexistuje názorová jednota a současný stav lze charakterizovat jako tříšť více či méně správných postřehů bez jednoznačných doporučení pro výuku [1], [4], [5].

Rozsah výuky je dnes velmi různý a zhruba se omezuje na návody k formálnímu zpracování datových souborů a provedení testů nejjednodušších hypotéz. Na základních školách bývají pravděpodobnost se statistikou často tou částí látky, kterou se z časových důvodů nedaří podrobněji probrat. Navíc ji mnozí učitelé neradi učí, protože ji sami dobře nerozumějí a i proto je její obliba u žáků minimální. Nelze se tedy divit, že vztah celé společnosti ke sta-

tistice není kladný. Všeobecně je rozšířen názor, že je prostředkem k důkazu libovolného tvrzení, a skutečnost, že všechny statistické výroky mají pouze pravděpodobnostní charakter, není obecně známa. Naopak jsou oblíbená kategorická tvrzení „podpořená“ statistickými daty bez jakékoliv statistické interpretace a často i bez formálních testů, jen na základě pohledu do tabulky či na obrázek.

Úzké spojení mezi teorií pravděpodobnosti a matematickou statistikou, a především jejich pevné začlenění do matematiky, je právě jedna ze skutečností, jejíž výhodnost a účelnost pro obě disciplíny zkoumající náhodné jevy je v poslední době zpochybňována. Axiomatický a striktně deduktivní přístup není patrně vhodnou metodou pro porozumění společenským, biologickým a patrně i mnohým fyzikálním jevům.

Statistické myšlení je považováno za základní myšlenkovou aktivitu zpracovávající informaci v nedeterministickém prostředí. To konkrétně znamená, že ne každý jev má svou příčinu a že některé jevy lze považovat za působení náhody. Judea Pearl v *Probabilistic learning* píše: *Lidské bytosti projevují téměř obsesivní puzení směřovat empirické jevy do koncepčních vztahů příčina – následek. Tento sklon je tak silný, že je mu někdy obětována i přesnost a často vyžaduje vymyšlení hypotetických nepozorovatelných entit (jako ego, elementární částice, nejvyšší bytost) jen proto, aby teorie měly formu příčinných schémat.*

Primární a nezřídka výhradní pozornost věnovaná středním hodnotám a ztotožňování variability s „chybou“ je rozšířeno ve školách stejně jako ve fyzice a v technických vědách. Variabilita dějů či procesů však musí být chápána jako jejich základní a vždy přítomný prvek, jemuž má zpracování dat umožnit, aby se co nejvýrazněji projevil. Statistické myšlení je zpětnovazební smyčkou následujícího typu: vyčerpávajícím způsobem jsou zpracována data, na základě indukce je předložena hypotéza, ta je deduktivně ověřena a jsou formulovány důsledky, jež jsou konfrontovány s výchozí hypotézou. Není-li plně potvrzena, je pozměněna a cyklus se opakuje. Přitom je důležité, aby indukci předcházelo podrobné seznámení se situací, kterou má úloha vyřešit, včetně průvodních okolností způsobu získání dat. Důležitá je průběžná úvaha nad problémem a jeho řešením s řadou složek, jako zájem o problém a jeho řešení, posouzení výsledku zdravým rozumem, představivost, skryté významy dat (data mohou vypovídat i o tom, nač jsme se neptali) a závěrů. Snee [6] navíc upozorňuje na skutečnost, že každá naše činnost se skládá z posloupnosti vzájemně souvisejících procesů. Při konkrétní aplikaci na usměrňování společenských činností pak konstatuje, že jejich *identifikace, charakterizace, kvantifikace, kontrola a omezení variability* vedou ke zlepšení výsledku (např. ke snížení výrobních nákladů). Snižování variability však nesmí být obecným cílem. Například v zemědělství se křížením různých druhů rostlin i zvířat dosahuje zvýšení kvality produktů a naopak rozmnožování jedinců probíhající v omezené skupině vede k většímu výskytu dědičných chorob a k degeneraci.

Při výchově v rodině i ve škole je třeba respektovat, že se děti s náhodou a rizikem setkávají již v předškolním věku - v rodině, v dětském kolektivu a i při hrách. Proto se u nich vyvíjí intuitivní chápání nejistoty některých dějů, v méně přesné podobě i jejich jistoty či naopak nemožnosti („maminka bude určitě doma“, „s III.B nemůžeme prohrát“). Rozvoj tohoto intuitivního myšlení je třeba včas správným způsobem ovlivňovat vhodným výkladem. Pokud se studentů zeptáme, kde se setkali s pravděpodobností a statistikou, většinou se jim vybaví hod kostkou a sázkové hry. Jen malá část z nich si uvědomuje, že se s těmito jevy setkávají v každodenním životě (jízdy dopravními prostředky, navazování známostí, utváření vztahů mezi lidmi atd.) a že se s nimi intuitivně dovedou vyrovnávat. Pokud si toto při výuce neuvědomíme, existuje nebezpečí, že životem již ověřené zkušenosti nahradíme formálními školskými pojmy a postupy, v čemž ostatně v matematice máme velkou a prokazatelně negativní praxi. Je dobré si stále připomínat výrok Galilea Galilei: *Není možné člověka něco naučit, lze mu pouze pomoci objevit znalosti v něm samém.*

Řešené úlohy musejí být konkrétní a měly by se žáků bezprostředně dotýkat, data si mají žáci připravovat sami, optimální je, když sami navrhnou, jaký typ dat potřebují pro řešení dané úlohy. Statistické zpracování tabulek uvedených v učebnici je pro žáky nutně zcela nezajímavé. Takové tabulky mají sloužit pouze jako inspirace pro vytvoření podobných datových souborů popisujících např. navštěvovanou školu, její žákovský kolektiv, město či kraj, v němž žáci žijí nebo jejich rodiny. Data, která si žáci připraví sami, dobře znají, baví je s nimi pracovat, protože jsou o nich, a mají k nim osobní vztah (viz např. [2]). Podrobná diskuse se žáky nejen zajistí korektnost pokusu, ale naučí je určité skepsi ve vztahu k akcím různých agentur. Žáci se naučí respektovat pravidlo, že neznáme-li přesnou formulaci otázky, nepřijímáme nekriticky výsledky výzkum a že sugestivní otázka spolu s nevhodnou volbou místa a času výsledek výzkumu zcela znehodnocují. Skeptický vztah k datům je důležitou složkou statistického myšlení vedoucí především k rozpoznání nevhodné volby sledované náhodné veličiny či jejího chybného zjišťování. Dalším zajímavým poznatkem je, že zatímco u učebnicových úloh, případně her mají žáci tendenci aplikovat představy o stejných pravděpodobnostech jevů, a z nich plynoucí variabilitu výsledků uvažovat, pro variabilitu reálných jevů se vesměs pokoušejí hledat kauzální vysvětlení (viz např. [4]). Podobný sklon je pozorován zcela obecně. I při běžné variabilitě lokálního výskytu určitého onemocnění je pozitivní odchylka zhusta považována za předzvěst epidemie či důkaz globálního oteplování. Zvláště rádi se k těmto interpretacím přiklánějí media, pro něž je to atraktivní téma.

Důležitou součástí statistického vzdělání je tvorba a interpretace grafů. Zkušenosti získané při jejich vytváření jsou pro občany důležité hlavně proto, že mnoho statistických výsledků je v odborné literatuře a především v médiích prezentováno nevhodnou, zjednodušující a často i záměrně zavádějící formou (záměrná volba měřítko či kombinace několika měřítek v jednom grafu).

Výsledkem výchovy ke statistickému myšlení by mělo být dosažení *statistické gramotnosti* sestávající ze znalosti metod sběru, úpravy a interpretace dat, jejich grafických znázornění, testováním hypotéz a prezentací závěrů. Presidentem Americké statistické společnosti byla definována takto [7]: *Statistická gramotnost je schopnost porozumět a kriticky zhodnotit statistické výsledky, které prostupují náš každodenní život, společně se schopností docenit významu statistického myšlení ve veřejném i soukromém životě, v profesionálních i osobních rozhodnutích.* Patrně lze přijmout tvrzení, že se jedná o specifickou gramotnost informačního věku, a připustit skutečnost, že naše školy opouštějí absolventi v tomto směru negramotní.

Můžeme se také zamyslet nad výukou matematiky, jejíž význam pro rozvoj exaktního myšlení je nesporný. Kolik žáků ve svém životě po ukončení školy vyřeší alespoň jednu kvadratickou rovnici, provede řez krychle a zderivuje funkci? Naproti tomu pravděpodobnostní a statistické myšlení od něj bude požadováno po celý život. Jeho výuka by bez ohledu na osnovy měla být průběžnou snahou všech učitelů matematiky od první do poslední třídy. Měli by se také snažit zapojit do ní i učitele ostatních předmětů, resp. jim v ní pomoci upozorněním, kde v jejich předmětech lze či je vhodné tento typ myšlení uplatnit.

Reference

- [1] Ben-Zvi D., Friedlander A. (1997). *Statistical thinking in a technological environment.* In: J. Garfield a G. Burrill (Eds.): Research on the role of technology in teaching and learning statistics. Voorburg, The Netherlands: International Statistical Institute, 45–55.
- [2] Dunkels A. (1989). *The teaching of statistics.* Studies In Mathematics Education, UNESCO.
- [3] Gillies D. (2000). *Philosophical theories of probability.* Routledge, London.
- [4] Pfannkuch M. (1999). *Characteristics of statistical thinking in empirical inquiry.* Doctoral Thesis. The University of Auckland.
- [5] Pfannkuch M., Wild C. (2002). *Statistical thinking models.* In: B. Phillips (ed.): ICOTS 6, Proceedings of the 6th International Conference of Teaching Statistics.
- [6] Snee R.D. (1990). *Statistical thinking and its contribution to total quality.* The American Statistician **44**, 116–121.
- [7] Watson J.M., Kelly B.A. (2003). *The vocabulary of statistical literacy.* In: Educational Research, Risks, Dilemmas. Proceedings of the point conferences of the New Zealand Association for Research in Education and the Australian Association for Research in Education [CD-ROM]. Auckland, New Zealand.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GAČR č. 201/06/0302 a výzkumným záměrem AVOZ 10190503.

Adresa: M. Špínková, Matematický ústav AV ČR, Žitná 25, 115 67 Praha 1

E-mail: milena.sp@centrum.cz

EVOLUČNÍ ALGORITMY

Josef Tvrđík

Klíčová slova: Globální optimalizace, náhodné prohledávání, genetické algoritmy, evoluční strategie, diferenciální evoluce, konvergence stochastických algoritmů, soutěžící heuristiky.

Abstrakt: Článek se zabývá účelem a principy evolučních algoritmů. Principy evolučních algoritmů jsou ukázány na několika typech těchto algoritmů, a to na genetických algoritmech, evoluční strategii, diferenciální evoluci, migračním algoritmu a na adaptivních algoritmech se soutěžícími heuristikami lokálního prohledávání. V článku jsou stručně uvedeny i výsledky experimentálního porovnání spolehlivosti nalezení globálního minima a rychlost konvergence několika algoritmů na různých úlohách.

Abstract: This paper deals with goals and principles of evolutionary algorithms. The principles are shown on several types of these algorithms like genetic algorithms, evolutionary strategy, differential evolution, self-organizing migration algorithm and self-adaptive algorithm with competition of local-search heuristics. Some experimental results concerning reliability of the search for the global minimum and convergence rate are also briefly presented.

1 Globální optimalizace

Pro účelovou funkci

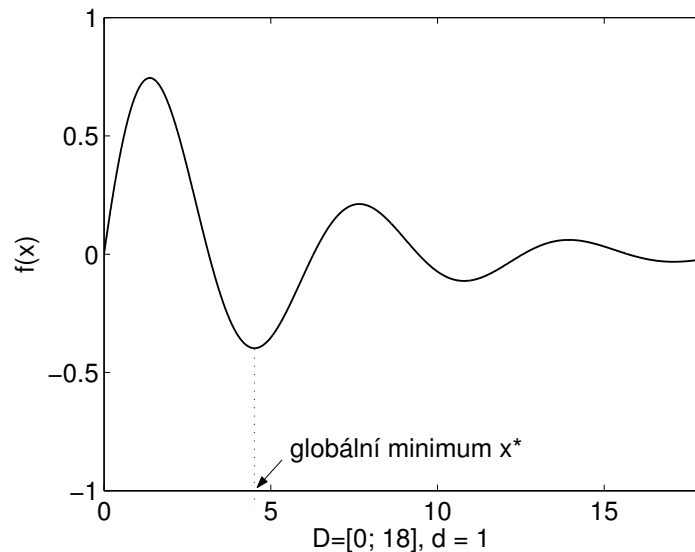
$$f : D \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}, \quad D \neq \emptyset$$

je hodnota $f^* := f(\mathbf{x}^*) > -\infty$ globální minimum právě tehdy, když

$$\forall \mathbf{x} \in D : f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x}).$$

Problém určení \mathbf{x}^* se nazývá problém globální optimalizace [2]. Chceme-li nalézt globální maximum, pak jej nalezneme jako globální minimum účelové funkce $-f(\mathbf{x})$.

Jednoduchou úlohu nalezení globálního minima ukazuje obr. 1. Zdálo by se, že nalézt bod, ve kterém má funkce globální extrém, je velmi jednoduché. Bohužel tomu tak není. Nalézt obecné řešení takto jednoduše vypadajícího problému může být obtížné, zvláště když účelová funkce není diferencovatelná, spojitá, je multimodální, případně má další nepříjemné vlastnosti. Analýza problému globální optimalizace ukazuje, že neexistuje deterministický algoritmus řešící každou úlohu globální optimalizace v polynomiálním čase. Problém globální optimalizace je tedy NP-obtížný. Podrobnější diskusi této problematiky uvádí Bäck [2], str. 35–57. Přitom globální optimalizace je úloha, kterou je nutno řešit v mnoha praktických problémech, mnohdy



Obrázek 1: Globální minimum.

s velmi významným ekonomickým efektem, takže je nutné hledat algoritmy, které jsou pro řešení konkrétních problémů použitelné. Algoritmy pro řešení problému globální optimalizace se podrobně zabývá celá řada monografií, např. Törn a Žilinskas [24] nebo Spall [22].

V tomto článku se soustředíme na problémy, kdy hledáme globální minimum v uzavřené souvislé oblasti

$$D = \prod_{j=1}^d \langle a_j, b_j \rangle, \quad a_j < b_j, \quad j = 1, 2, \dots, d, \quad (1)$$

(tzv. box constraints, oblast D je vymezena jako d -rozměrný kvádr) a účelovou funkci $f(\mathbf{x})$ umíme vyhodnotit s požadovanou přesností v každém bodě $\mathbf{x} \in D$. Pro úlohy řešené numericky na počítači nepředstavuje podmínka (1) žádné podstatné omezení, neboť hodnoty a_j, b_j jsou tak jako tak omezeny datovými typy užitými pro \mathbf{x} a $f(\mathbf{x})$.

2 Stochastické algoritmy pro globální optimalizaci

Nemožnost nalézt deterministický algoritmus obecně řešící úlohu globální optimalizace vedla k využití algoritmů stochastických. Stochastické algoritmy pro globální optimalizaci *heuristicky* prohledávají prostor D . Heuristikou rozumíme postup, ve kterém se využívá náhoda, intuice, analogie a zkušenost. Rozdíl mezi heuristikou a deterministickým algoritmem je v tom, že na rozdíl od deterministického algoritmu heuristika nezajišťuje nalezení řešení. Heuristiky jsou v praktickém životě zcela samozřejmě užívané postupy. Jako příklady můžeme uvést hledání hub, lov ryb na udici, výběr partnera nebo pokus o výhru ve sportovním utkání.

Většina stochastických algoritmů pro hledání globálního minima v sobě obsahuje zjevně či skrytě proces učení. Inspirace k užití heuristik jsou často odvozeny ze znalostí přírodních nebo sociálních procesů. Např. simulované

žihání je modelem pomalého ochlazování tuhého tělesa, tabu-search modeluje hledání nějakého předmětu v neznámém terénu tak, že v krátkodobé paměti si zapamatovává zakázané kroky vedoucí k již dříve prošlým stavům – podrobněji viz Kvasnička et al. [9]. Podobné postupy učení najdeme snad ve všech známých stochastických algoritmech s výjimkou slepého náhodného prohledávání.

Mezi stochastické algoritmy pro hledání globálního extrému patří *evoluční algoritmy*. Podrobný popis této problematiky nalezneme v monografiích Goldberga [5], Michalewicze [12] nebo Bäcka [2]. Rozvoj evolučních algoritmů je záležitostí posledních desetiletí a je podmíněn rozvojem počítačů a pokroky v informatice. Přelomovými pracemi zavádějícími biologickou terminologii do modelů hledání globálního extrému byly diplomová práce Schwefela a zpráva Rechenberga ze šedesátých let minulého století o evoluční strategii (citováno podle [2]) a Hollandova práce [7], která odstartovala rozvoj genetických algoritmů.

Evoluční algoritmy jsou ve své podstatě jednoduchými modely Darwinovy evoluční teorie vývoje populací. Charakteristické pro ně je to, že pracují s *populací* jedinců (jedincem se obvykle rozumí bod v D) a využívají *evoluční operátory*, což jsou především:

- *selektce* – nejsilnější jedinci z populace mají větší pravděpodobnost přežití a předání svých vlastností, výběr se realizuje buď turnajem (tj. silnější vítězí) nebo tak, že pravděpodobnost výběru jedince je úměrná jeho síle,
- *křížení* (rekombinace) – dva nebo více jedinců z populace si vymění informace (geny) a vzniknou tak noví jedinci kombinující vlastnosti rodičů,
- *mutace* – genetická informace zakódovaná v jedinci může být náhodně modifikována,
- *migrace* – pokud model využívá více paralelně existujících populací, pak jedinci se mezi těmito populacemi vyměňují.

Evoluční algoritmy jsou heuristiky, které nějakým způsobem modifikují populaci tak, aby se její vlastnosti zlepšovaly. Příklady evolučních algoritmů jsou uvedeny v sekcích 4 až 8. O některých třídách evolučních algoritmů je dokázáno, že nejlepší jedinci populace se skutečně přibližují ke globálnímu extrému, pro genetický algoritmus takový důkaz nalezneme např. v [7] a [2], pro různé typy náhodného prohledávání v [21] a pro dosti širokou třídu evolučních algoritmů v [14].

3 Náhodné prohledávání a konvergence stochastických algoritmů

Náhodné prohledávání se také nazývá slepý algoritmus, neboť v něm se opakovaně generuje náhodné řešení, tj. nový bod y v souvislé oblasti D z rovnoměrného spojitého rozdělení a pokud je nový bod lepší než dosud nejlepší

nalezený bod, nahradí jej. Počet opakování t je vstupním parametrem algoritmu. Náhodné prohledávání (algoritmus 1) je příkladem velmi jednoduchého stochastického algoritmu pro hledání globálního minima využívající velmi prostou lokální heuristiku, kterou bychom mohli slovně vyjádřit jako „zkus bez rozmyslu cokoliv, dosavadní zkušenost ignoruj“.

Algoritmus 1. Slepé náhodné prohledávání

```

 $f(\mathbf{x}) = \infty;$ 
for  $i := 1$  to  $t$  do
    generuj vektor  $\mathbf{y}$  náhodně v  $D$ ;
    if  $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x})$  then
         $\mathbf{x} := \mathbf{y}$ 
         $f(\mathbf{x}) := f(\mathbf{y})$ 
    endif;
endfor;

```

Platí, že s rostoucím počtem iterací se nalezené řešení \mathbf{x} přibližuje globálnímu minimu \mathbf{x}^* :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \varepsilon \mid t) = 1 \quad \varepsilon > 0, \quad (2)$$

kde $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|$ je vzdálenost nalezeného řešení \mathbf{x} od globálního minima \mathbf{x}^* (norma vektoru $\mathbf{x} - \mathbf{x}^*$) a $P(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \varepsilon \mid t)$ je pravděpodobnost jevu $(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \varepsilon)$ za podmínky, že bylo provedeno t iterací.

K tvrzení (2) dojdeme následující úvahou: Všechny body splňující podmínku $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \varepsilon$ jsou vnitřními body d -rozměrné koule D_ε o poloměru ε , případně sjednocení všech takových koulí, pokud je minimální hodnota účelové funkce ve více než jednom bodě. Jelikož $\varepsilon > 0$, je míra této množiny $\lambda(D_\varepsilon) > 0$. Označme dále míru množiny D jako $\lambda(D)$. Generujeme-li bod $\mathbf{y} \in D$ z rovnoměrného rozdělení, pak pravděpodobnost jevu $A \equiv \{\mathbf{y} \in D_\varepsilon\}$ a pravděpodobnost jevu opačného jsou

$$P(A) = \frac{\lambda(D_\varepsilon)}{\lambda(D)}, \quad P(\bar{A}) = 1 - \frac{\lambda(D_\varepsilon)}{\lambda(D)}.$$

Pravděpodobnost, že jev \bar{A} nastane ve všech t po sobě jdoucích opakováních $P(\bar{A} \mid t) = [1 - \lambda(D_\varepsilon)/\lambda(D)]^t$. Jelikož $0 < [1 - \lambda(D_\varepsilon)/\lambda(D)] < 1$, je potom

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\bar{A} \mid t) = \left[1 - \frac{\lambda(D_\varepsilon)}{\lambda(D)}\right]^t = 0$$

a (2) tedy platí. Bohužel (2) vypovídá pouze limitně a neposkytuje nám žádnou informaci o kvalitě řešení nalezeného po konečném počtu iterací. S podobným problémem se setkáváme i u dalších stochastických algoritmů. Teoretická konvergence algoritmu podle (2) je z praktického hlediska velmi slabé tvrzení a pro porovnání efektivity stochastických algoritmů jsou většinou důležitější experimentální výsledky na testovacích funkcích než teoretický důkaz konvergence ve tvaru (2) nebo podobném.

4 Genetické algoritmy

Podle Darwinovy teorie přirozeného výběru přežívají nejlépe přizpůsobení jedinci populace. Mírou přizpůsobení je *fitness* jedince. V biologii je fitness chápána jako relativní schopnost přežití a reprodukce genotypu jedince. Biologická evoluce je změna obsahu genetické informace populace v průběhu mnoha generací směrem k vyšším hodnotám fitness. Jedinci s vyšší fitness mají větší pravděpodobnost přežití a větší pravděpodobnost reprodukce svých genů do generace potomků. Kromě reprodukce se v populačním vývoji uplatňuje i mutace, což je náhodná změna genetické informace některých jedinců v populaci.

V genetických algoritmech je fitness kladné číslo přiřazené genetické informaci jedince. Tato genetická informace jedince (chromozóm) se nejčastěji vyjadřuje bitovým řetězcem. Populaci jedinců pak modelujeme jako populaci chromozómů a každému chromozómu (bitovému řetězci) umíme přiřadit hodnotu účelové funkce a podle vhodného předpisu umíme přiřadit i jeho fitness. Chromozómem je obvykle binární vektor konstantní délky k

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) \in \{0, 1\}^k$$

a populace velikosti N je potom množina takových chromozómů

$$P = \{\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \dots, \boldsymbol{\alpha}_N\}$$

Pokud hledáme globální minimum účelové funkce f , fitness F je zobrazení, které vyhovuje podmínce

$$f(\boldsymbol{\alpha}_i) \leq f(\boldsymbol{\alpha}_j) \Rightarrow F(\boldsymbol{\alpha}_i) \geq F(\boldsymbol{\alpha}_j) > 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, N$$

Nejjednodušší způsob, jak vyhovět této podmínce, je lineární zobrazení funkcí hodnot na fitness, kdy hodnotu fitness určíme podle vztahu

$$F(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{F_{\max} - F_{\min}}{f_{\max} - f_{\min}} f(\boldsymbol{\alpha}) + \frac{f_{\max} F_{\min} - f_{\min} F_{\max}}{f_{\max} - f_{\min}},$$

kde f_{\min} a f_{\max} je nejmenší a největší hodnota funkce v populaci, F_{\min} a F_{\max} je minimální a maximální hodnota fitness. Obvykle se volí $F_{\max} = 1$ a $F_{\min} = \varepsilon$, kde ε je malé kladné číslo, např. $\varepsilon = 0.01$. Pak vztah pro fitness má tvar

$$F(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{f_{\max} - f_{\min}} [(1 - \varepsilon)f(\boldsymbol{\alpha}) + \varepsilon f_{\max} - f_{\min}].$$

Hodnoty fitness můžeme renormalizovat, aby jejich součet byl roven jedné. Renormalizovaná fitness i -tého jedince je

$$F'(\boldsymbol{\alpha}_i) = \frac{F(\boldsymbol{\alpha}_i)}{\sum_{j=1}^N F(\boldsymbol{\alpha}_j)}$$

a tato hodnota udává pravděpodobnost účasti jedince na reprodukci jeho genetické informace, tj. vytvoření potomka, případně i pravděpodobnost přežití jedince do další generace.

Reprodukce probíhá křížením dvou chromozómů tak, že si vymění své geny (části bitových řetězců). Ze dvou rodičů α, β v jednobodovém křížení vzniknou dva potomci podle následujícího schématu:

$$\begin{array}{ccc} (\alpha_1, \dots, \alpha_l, \alpha_{(l+1)}, \dots, \alpha_k) & \searrow & (\alpha_1, \dots, \alpha_l, \beta_{(l+1)}, \dots, \beta_k) \\ (\beta_1, \dots, \beta_l, \beta_{(l+1)}, \dots, \beta_k) & \nearrow & (\beta_1, \dots, \beta_l, \alpha_{(l+1)}, \dots, \alpha_k) \end{array}$$

Bod křížení l se volí náhodně. Někdy se také užívá dvoubodové křížení, ve kterém se určí náhodně dvě pozice pro křížení, l_1, l_2 , $l_2 > l_1$ a v bitových řetězcích se vymění úseky

$$\alpha_{l_1}, \dots, \alpha_{l_2} \leftrightarrow \beta_{l_1}, \dots, \beta_{l_2}.$$

Mutace je v genetických algoritmech obvykle implementována jako změna hodnoty náhodně vybraného bitu v chromozómu, tj. hodnota 0 se změní na 1, hodnota 1 na 0. Mutace zajišťuje, že v populaci může vzniknout genetická informace, která tam v předcházejících generacích nebyla, nebo může být obnovena genetická informace ztracená v průběhu dosavadního vývoje. V důsledku toho pak algoritmus může uniknout z oblasti lokálního minima různého od globálního, ke kterému by směřoval, pokud bychom užívali pouze křížení. Naopak, pokud bychom užívali pouze mutaci, chování genetického algoritmu by se blížilo slepému náhodnému prohledávání.

Lze ukázat, že genetický algoritmus konverguje ke globálnímu extrému, viz [7], [9]. Genetické algoritmy na rozdíl od ostatních algoritmů uváděných v tomto článku reprezentují jedince jako bitový řetězec, nikoliv jako vektor hodnot v pohyblivé řádové čáře. To je často výhodou při řešení tzv. diskrétních úloh globální optimalizace (kombinatorické úlohy jako je problém obchodního cestujícího), ale přináší to komplikace v problémech, kdy prohledávaná oblast D možných řešení je spojitá. Pokud bychom úseky chromozómu interpretovali jako celá čísla (datový typ integer) a ty pak transformovali na racionální hodnoty z D , pak se potýkáme s obtíží, že sousední číselné hodnoty se jsou reprezentovány řetězci, které se mohou podstatně lišit, dokonce i ve všech bitech. Např. dekadická hodnota 7 je binárně (0111), následující číselná dekadická hodnota 8 je binárně (1000). Tuto nepříjemnost je nutno v genetických algoritmech nějak ošetřit, pokud mají být úspěšně používány i pro řešení spojitých problémů globální optimalizace. Obvykle se to řeší použitím Grayova kódu [9], kdy řetězce reprezentující sousední celočíselné hodnoty se liší jen v jednom bitu, ale přináší to další časový nárok na konverzi do Grayova kódu a zpět. Jinou možností jsou varianty genetických algoritmů s reprezentací jedince jako vektoru číselných hodnot v pohyblivé čáře (tzv. real-coded GA, viz např. [3], [32]). Pak ale je nutno užívat jiné evoluční operátory křížení a mutace než ty, které byly uvedeny pro bitovou reprezentaci chromozómů.

5 Evoluční strategie

Původní nejjednodušší verze evoluční strategie byla navržena v šedesátých letech minulého století Schwefelem a Rechenbergem, viz [2]. Základní myšlenka je podobná slepému náhodnému prohledávání, ale rozdíl je v tom, že nový bod \mathbf{y} se generuje jako mutace bodu \mathbf{x} tak, že jednotlivé složky vektoru \mathbf{x} se změní přičtením hodnot normálně rozdělených náhodných veličin

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{u}, \quad \mathbf{u} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}). \quad (3)$$

Současnou evoluční terminologií může být algoritmus popsán tak, že z rodičovské populace velikosti 1 vzniká populace potomků rovněž velikosti 1, potomek vzniká z jednoho rodiče mutací podle (3) a operátorem selekce turnajový výběr, tj. výběr lepšího jedince z dvojice.

Zajímavou otázkou je, jak volit hodnoty směrodatných odchylek pro mutaci. V rovnici (3) jsou všechny σ_j , $j = 1, 2, \dots, d$ shodné a konstantní po celý proces hledání. To samozřejmě není nutné, pro každou dimenzi můžeme mít jinou hodnotu směrodatné odchylky, tedy budeme pracovat s vektorem směrodatných odchylek

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_d),$$

a navíc, vektor směrodatných odchylek nemusí být v každém iteračním kroku stejný, ale hodnoty jeho prvků se mohou *adaptovat* podle průběhu procesu vyhledávání. Rechenberg [19] (citováno podle [6]) studoval vliv velikosti mutace při generování potomka, tj. hodnot směrodatné odchylky σ na rychlost konvergence algoritmu. Na dvou jednoduchých funkcích odvodil tzv. *pravidlo jedné pětiny* úspěšnosti. Empiricky byla ověřena užitečnost tohoto pravidla i pro jiné funkce. Hodnoty směrodatných odchylek se v k -té iteraci hledání upravují podle pravidla vyjádřeného rovnicí (4)

$$\sigma_j^{(k)} = \begin{cases} c_1 \sigma_j^{(k-1)} & \text{když } \varphi(n) < \frac{1}{5} \\ c_2 \sigma_j^{(k-1)} & \text{když } \varphi(n) > \frac{1}{5} \\ \sigma_j^{(k-1)} & \text{jinak,} \end{cases} \quad (4)$$

$c_1 < 1$ a $c_2 > 1$ jsou vstupní parametry, kterými se řídí zmenšování či zvětšování hodnot směrodatných odchylek podle relativní četnosti úspěchu $\varphi(n)$ v předcházejících n krocích. Úspěchem se rozumí to, že $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x})$. Počet kroků n je vstupní parametr. Obvykle se volí hodnoty $c_1 = 0.82$, $c_2 = 1/c_1 = 1.22$ a $n > 10d$, zdůvodnění viz [20].

Pod vlivem rozvoje jiných evolučních algoritmů bylo dalším krokem v evoluční strategii užití populací velikosti větší než jedna. Označíme-li velikost rodičovské populace N a velikost populace potomků L , $L > N$, pak můžeme uvažovat o dvou variantách algoritmu evoluční strategie, v literatuře obvykle označovaných jako ES(N+L) a ES(N,L):

- ES(N+L) - generace potomků je vytvořena N jedinci s nejmenšími funkčními hodnotami ze všech $N + L$ jedinců jak rodičovské populace, tak populace potomků. V této variantě se uplatňuje tzv. elitismus, tj. nejlepší dosud nalezený jedinec vždy přežívá a přechází do nové generace.
- ES(N,L) - generace potomků je vytvořena N jedinci s nejmenšími funkčními hodnotami z L jedinců populace potomků. Rodičovské generace tedy je kompletně nahrazena nejlepšími jedinci z populace potomků. Dosud nejlepší nalezené řešení tedy může být ztraceno, tj. elitismus se v této variantě neuplatňuje.

Doporučuje se, aby velikost populace potomků L byla volena několikanásobně větší než velikost rodičovské populace N . Varianta ES(N,L) obvykle konverguje pomaleji než ES(N+L), ale s menší tendencí ukončit prohledávání v lokálním minimu různém od globálního.

Zastánci evoluční strategie museli v minulosti čelit výtkám, že evoluční strategie z osvědčených evolučních operátorů nevyužívá křížení. Proto byly navrženy pokročilejší varianty evoluční strategie, ve kterých je křížení obsaženo. Základní idea takového křížení spočívá v tom, že u každého jedince v populaci se kromě souřadnic v prostoru D uchovává v paměti i vektor směrodatných odchylek. Vektor směrodatných odchylek potomka se pak generuje křížením s náhodně vybraným jiným jedincem. Máme-li dva rodiče a , b s vektory směrodatných odchylek σ_a , σ_b , pak vektor směrodatných odchylek jejich potomka je určován např. jako

$$\sigma = \frac{\sigma_a + \sigma_b}{2},$$

což je tzv. křížení průměrem, případně podle nějaké obdobného o trochu komplikovanějšího pravidla pro křížení.

Pro funkce, u kterých je jejich globální minimum je v protáhlém údolí, jehož směr není rovnoběžný se žádnou dimenzí prostoru D , je někdy vhodné užít důmyslnější variantu evoluční strategie, v níž u každého jedince v populaci se kromě souřadnic v prostoru D a jeho vektoru směrodatných odchylek uchovávají i tzv. směrové úhly, které lze určit z kovarianční matice (korelační koeficient je roven kosinu směrového úhlu). Křížení probíhá nejen na vektorech směrodatných odchylek, ale na celé matici směrových úhlů, podrobnější popis je např. v [2] a [9]. Takové varianty evoluční strategie jsou však nejenom implementačně náročnější, ale také mají podstatně větší paměťové nároky i větší časovou spotřebu na jeden iterační krok, neboť je nutno opakovaně přepočítávat kovarianční matice.

6 Diferenciální evoluce

Diferenciální evoluce (DE) je postup k heuristickému hledání minima multimodálních funkcí, který navrhli Storn a Price [23] v 90. letech. Algoritmus DE

dosáhl značné popularity, je často aplikován a dále rozvíjen. Přehled prací o diferenciální evoluci je na stránkách Lampinena [10]. Experimentální výsledky i zkušenosti z četných aplikací ukazují, že často konverguje rychleji než jiné stochastické algoritmy pro globální optimalizaci. Algoritmus diferenciální evoluce vytváří novou populaci Q velikosti N tak, že postupně pro každý bod \mathbf{x}_i ze staré populace $P = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ vytvoří jeho potenciálního konkurenta \mathbf{y} a do nové populace z této dvojice zařadí bod s nižší funkční hodnotou. Přesněji je tento postup zapsán v pseudokódu jako algoritmus 2.

Algoritmus 2. Diferenciální evoluce

generuj $P = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$; (N bodů náhodně v D)

repeat

for $i := 1$ **to** N **do**

 vytvoř vektor \mathbf{u} ;

 vytvoř vektor \mathbf{y} křížením \mathbf{u} a \mathbf{x}_i ;

if $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x}_i)$ **then** do Q zařaď \mathbf{y}
 else do Q zařaď \mathbf{x}_i

endif;

endfor;

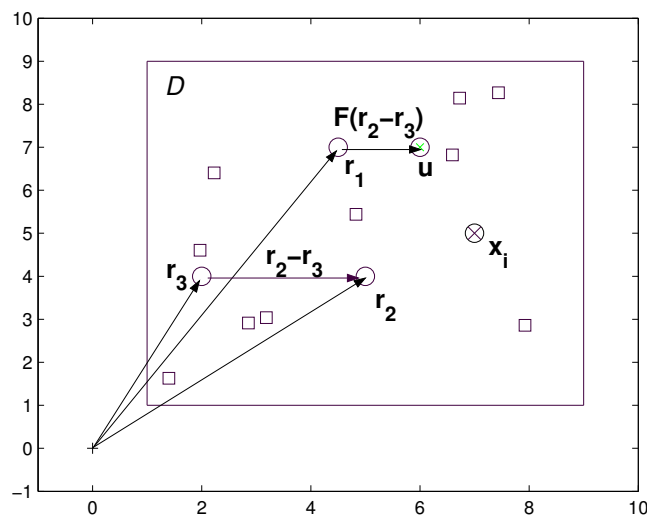
$P := Q$;

until podmínka ukončení;

Je řada způsobů, jak vytvořit nový bod \mathbf{u} . Nejčastěji užívaný postup označovaný *rand* generuje bod \mathbf{u} ze tří bodů staré populace podle vztahu

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}_1 + F(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3), \quad (5)$$

$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ jsou navzájem různé body náhodně vybrané z populace P různé od aktuálního bodu \mathbf{x}_i , $F > 0$ je vstupní parametr. Generování bodu \mathbf{u} podle rovnice (5) je graficky znázorněno na obr. 2.



Obrázek 2: Generování bodu \mathbf{u} – postup *rand*.

V postupu označovaném *best* se pro generování využívá bod \mathbf{x}_{\min} s nejnižší funkční hodnotou z celé populace P . Bod \mathbf{u} je určen vztahem

$$\mathbf{u} = \mathbf{x}_{\min} + F(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4), \quad (6)$$

kde $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4$ jsou navzájem různé body náhodně vybrané z populace P různé od aktuálního bodu \mathbf{x}_i i od bodu \mathbf{x}_{\min} , $F > 0$ je opět vstupní parametr.

Nový vektor $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_d)$ vznikne křížením vektoru \mathbf{u} a vektoru \mathbf{x}_i podle pravidla

$$y_j = \begin{cases} u_j & \text{když } U_j \leq C \quad \text{nebo } j = l \\ x_{ij} & \text{když } U_j > C \quad \text{a } j \neq l, \end{cases} \quad (7)$$

kde l je náhodně vybrané celé číslo z $\{1, 2, \dots, d\}$, $U_j \sim \text{Unif}(0, 1)$ jsou nezávislé a $C \in \langle 0, 1 \rangle$ je vstupní parametr, který udává pravděpodobnost zařazení u_j do \mathbf{y} . Pravidlo (7) zabezpečuje, že nejméně jedna u_j je zařazena.

V diferenciální evoluci generování \mathbf{u} podle rovnic (5) nebo (6) představuje mutaci, křížení probíhá podle (7), selekce jedince pro novou populaci Q je turnajový výběr lepšího bodu z dvojice \mathbf{y} a \mathbf{x}_i . V diferenciální evoluci jsou tedy využívány všechny tři nejdůležitější evoluční operace.

Ali a Törn [1] nedávno navrhli zavést do diferenciální evoluce další možnost adaptivního ovlivňování procesu hledání. Hodnota parametru F se v každém iteračním kroku přizpůsobuje podle pravidla

$$F = \begin{cases} \max(F_{\min}, 1 - |\frac{f_{\max}}{f_{\min}}|) & \text{if } |\frac{f_{\max}}{f_{\min}}| < 1 \\ \max(F_{\min}, 1 - |\frac{f_{\min}}{f_{\max}}|) & \text{jinak,} \end{cases} \quad (8)$$

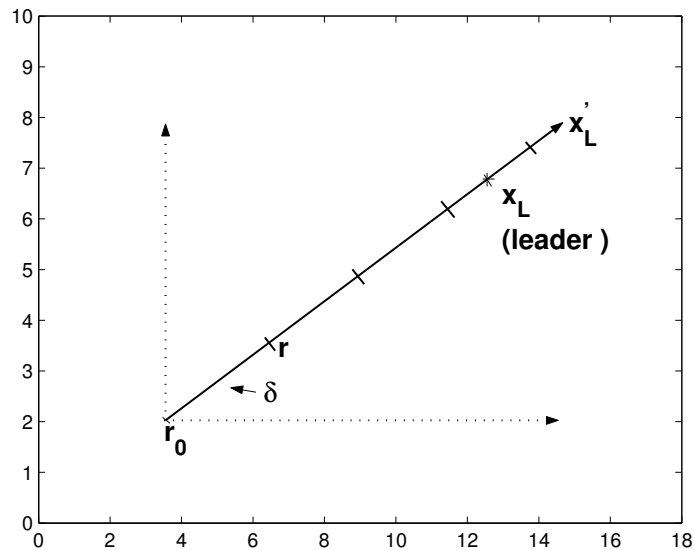
kde f_{\min} , f_{\max} jsou minimální a maximální funkční hodnoty v populaci P a F_{\min} je vstupní parametr, který zabezpečuje, aby bylo $F \in \langle F_{\min}, 1 \rangle$. Autoři doporučují volit hodnotu $F_{\min} \geq 0.45$. Předpokládá se, že tento způsob výpočtu F udržuje prohledávání diverzifikované v počátečním stádiu a intenzivnější (koncentrované) v pozdější fázi prohledávání, což má zvyšovat spolehlivost hledání i rychlost konvergence.

Výhodou algoritmu diferenciální evoluce je jeho jednoduchost a výpočetně nenáročné generování nového bodu \mathbf{y} , které lze navíc velmi efektivně implementovat. Nevýhodou je poměrně velká citlivost algoritmu na nastavení hodnot vstupních parametrů F a C . Storn a Price doporučují volit hodnoty $N = 10d$, $F = 0.8$ a $C = 0.5$ a pak tyto hodnoty modifikovat podle empirické zkušenosti z pozorovaného průběhu hledání. To je ovšem doporučení dosti vágní. K tomu, aby bylo užitečné, je nutná zkušenost a dobrá intuice řešitele problému. V testovacích úlohách v článku [23] autoři užívají pro různé úlohy velmi odlišné hodnoty těchto parametrů, a to $0.5 \leq F \leq 1$ a $0 \leq C \leq 1$. Také velikost populace N volí v mnoha úlohách menší než doporučovanou hodnotu $10d$.

7 Algoritmus SOMA

Algoritmus SOMA – Zelinka a Lampinen [34] – je příkladem stochastického algoritmu, ve kterém se modeluje proces spolupráce jedinců. Dostí podrobně, ale nepřiliš přehledně je popsán v české knize jednoho z autorů tohoto algoritmu [35]. SOMA je zkratka jména algoritmu (Self-Organizing Migration Algorithm), které vystihuje jeho základní principy.

Na algoritmus můžeme nahlížet jako na jednoduchý model lovicí smečky. Ve smečce je N jedinců a ti se pohybují (migrují) po oblasti D tak, že každý jedinec skáče směrem k vůdci smečky, prověří místo doskoku (tj. vyhodnotí účelovou funkci) a zapamatuje si nejlepší místo do dalšího migračního kola. Vůdcem je obvykle jedinec v místě s nejlepší hodnotou účelové funkce v celé populaci (smečce). Pohyb migrujícího jedince nemusí probíhat ve všech dimenzích prostoru D , ale jen v některých dimenzích, tedy v prostoru s dimenzí menší než d . Migraci jedince k vůdci ukazuje obr. 3. Jedinec z výchozího bodu \mathbf{r}_0 skáče skoky velikosti δ směrem k vůdci, případně ho může i o trochu přeskočit. Pohyb jedince je buď ve směru naznačeném plnou šipkou, tedy v prostoru dimenze d nebo jen v podprostoru menší dimenze, tedy v některém ze směrů vyznačených tečkovaně.



Obrázek 3: Migrace za nejlepším jedincem.

Kromě vstupních parametrů obvyklých u všech evolučních algoritmů, tj. specifikace problému (funkce, prohledávaný prostor, podmínka ukončení) a velikost populace N má algoritmus SOMA ještě tři vstupní parametry popisující pohyb jedince za vůdcem. Označení těchto parametrů ponecháme shodné s [35]:

- **mass** – relativní velikost přeskočení vůdce

$$\text{mass} = \frac{\| \mathbf{x}'_L - \mathbf{r}_0 \|}{\| \mathbf{x}_L - \mathbf{r}_0 \|},$$

kde $\| \mathbf{x}_L - \mathbf{r}_0 \|$ je norma vektoru $(\mathbf{x}_L - \mathbf{r}_0)$, podobně $\| \mathbf{x}'_L - \mathbf{r}_0 \|$ je norma vektoru $(\mathbf{x}'_L - \mathbf{r}_0)$. Geometrický význam je zřejmý z obrázku 3. Doporučeny jsou hodnoty $\text{mass} \in \langle 1.1; 3 \rangle$.

- **step** – určuje velikost skoků δ , tj. délku směrového vektoru skoku podle následujícího vztahu

$$\delta = \text{step} * (\mathbf{x}_L - \mathbf{r}_0),$$

tedy čím je hodnota parametru **step** menší, tím podrobněji je prozkoumávána cesta k vůdci. Doporučené hodnoty jsou $\text{step} \in \langle 0.11; \text{mass} \rangle$, autoři algoritmu doporučují volit hodnotu parametru **step** tak, aby $1/\text{step}$ nebylo celé číslo, tzn. aby jedinec na své cestě za vůdcem zbytečně nenavštívil místo už prozkoumané vůdcem.

- **prt** – parametr pro určení dimenzí směru pohybu jedince za vůdcem, $\text{prt} \in \langle 0; 1 \rangle$. Je to pravděpodobnost výběru dimenze prostoru D , ve které bude pohyb jedince probíhat. Pro směr pohybu se vyberou náhodně ty dimenze, pro které $U_j < \text{prt}$, $j = 1, 2, \dots, d$, kde U_j jsou nezávislé rovnoměrně rozdělené náhodné veličiny, $U_j \sim \text{Unif}(0, 1)$. Pokud žádné $U_j < \text{prt}$ (např. při volbě $\text{prt} = 0$), vybere se jedna dimenze náhodně.

Směr pohybu, tzn. ty dimenze, ve kterých probíhají skoky, se volí vždycky pro každý pohyb jedince k vůdci znovu, zatímco velikost skoků δ je stejná pro celý běh algoritmu SOMA. Autoři rozlišují tři základní varianty algoritmu:

- *all-to-one* – základní verze algoritmu SOMA, kdy postupně za vůdcem v každém migračním kole putují všichni ostatní jedinci.
- *all-to-all* – v každém migračním kole se vůdcem stávají postupně všichni jedinci a ostatní putují za nimi. Populace se aktualizuje nově nalezenými body až po skončení migračního kola, tj. po dokončení putování všech ke všem.
- *all-to-all-adaptive* – podobně jako u předchozí varianty v každém migračním kole se vůdcem stávají postupně všichni jedinci a ostatní putují za nimi, ale jedinec v populaci je nahrazen bezprostředně po ukončení jeho migrace za vůdcem pokud při této migraci byl nalezen bod s lepší funkční hodnotou, takže další jedinci v průběhu migračního kola už putují k tomuto novému vůdci.

8 Adaptivní algoritmy – soutěž a spolupráce

Dosud uvedené algoritmy jsou založeny především na adaptaci populace a jen výjimečně umožňují i měnit strategii prohledávání během procesu. Touto výjimkou je jen pravidlo jedné pětiny v evoluční strategii (4) nebo adaptace hodnoty F v diferenciální evoluci (8). Z experimentálních výsledků se ukazuje, že algoritmy, které obsahují i adaptaci strategie prohledávání, jsou pro dosti širokou třídu problémů efektivnější, tj. nacházejí globální extrém spolehlivěji a s menšími časovými nároky. To dokonce téměř navzdory teoretickým

výsledkům Wolperta a Macreadyho [33], podle jejichž tzv. No Free Lunch teorémů by měly být všechny stochastické algoritmy pro vyhledávání globálního minima stejně účinné, uvažujeme-li jejich aplikaci na všechny možné optimalizační úlohy.

Adaptace strategie prohledávání může být založena na vhodné implementaci spolupráce nebo soutěže do jádra algoritmu. Příkladem implementace spolupráce je výše uvedený algoritmus SOMA nebo algoritmus mravenčí kolonie [4]. Jednoduchou implementací soutěže je evoluční algoritmus se soutěžícími heuristikami [25], [26]. V poslední době se objevují komplikovanější přístupy k implementaci soutěže a spolupráce do stochastických algoritmů pro globální optimalizaci. Návrh adaptivního generátoru optimalizačních algoritmů popisuje Deb [3], agentový přístup k implementaci spolupráce a soutěže uvádí Winter et al. [32].

Principy soutěže lokálních heuristik vysvětlíme na algoritmu řízeného náhodného prohledávání (Controlled Random Search, CRS), kde v každém cyklu algoritmu se nahrazuje nejhorší bod populace novým bodem, pokud tento nový bod populaci zlepšuje. Tak se populace postupně „smršťuje“ do oblasti s nižšími hodnotami účelové funkce.

Algoritmus 3. Řízené náhodné prohledávání

```

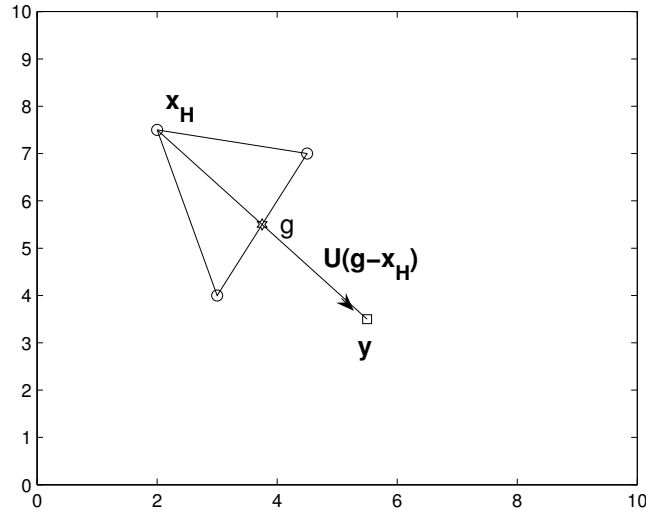
1   generuj populaci  $P$ , tj.  $N$  bodů náhodně v  $D$ ;
2   najdi  $\mathbf{x}_{\max} \in P$ ,  $f(\mathbf{x}_{\max}) \geq f(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in P$ ;
3   repeat
4     uži lokální heuristiku k vygenerování nového bodu  $\mathbf{y} \in D$ ;
5     if  $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x}_{\max})$  then
6        $\mathbf{x}_{\max} := \mathbf{y}$ ; (nejhorší bod populace nahrazen novým)
7       najdi nové  $\mathbf{x}_{\max} \in P$ ,  $f(\mathbf{x}_{\max}) \geq f(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in P$ ;
8     endif;
9   until podmínka ukončení;
```

Lokální heuristikou na řádku 4 rozumíme libovolný nedeterministický předpis pro vygenerování nového bodu \mathbf{y} . V klasické variantě algoritmu CRS (Price [18]) se nový bod generuje reflexí v simplexu S , který je tvořen $d+1$ body v D (Nelder a Mead [15]). V CRS se $d+1$ bodů simplexu S vybírá z populace náhodně. Samozřejmě je možné ke generování bodu \mathbf{y} užít i jinou heuristiku, např. znáhodněnou reflexi podle [8],

$$\mathbf{y} = \mathbf{g} + U(\mathbf{g} - \mathbf{x}_H), \quad (9)$$

kde $\mathbf{x}_H = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} f(\mathbf{x})$, \mathbf{g} je těžiště zbývajících d bodů simplexu S a U je náhodná veličina vhodného rozdělení, např. rovnoměrně rozdělená na $(s, \alpha-s)$, $\alpha > 0$ a s jsou vstupní parametry, $0 < s < \alpha/2$ [28]. Reflexe v simplexu je graficky znázorněna na obr. 4.

Bod \mathbf{y} lze však generovat jakoukoli jinou lokální heuristikou nebo dokonce tyto heuristiky střídat. Pokud v tomto střídání heuristik budou preferovány ty heuristiky, které byly v dosavadním průběhu hledání úspěšnější, je naděje,



Obrázek 4: Reflexe v simplexu.

že algoritmus bude konvergovat rychleji. V takovém algoritmu heuristiky soutěží o to, aby byly vybrány pro generování nového bodu. Mějme k dispozici h heuristik a v aktuálním kroku algoritmu vybíráme náhodně i -tou heuristiku s pravděpodobností q_i , $i = 1, 2, \dots, h$. Pravděpodobnosti q_i měníme v závislosti na úspěšnosti i -té heuristiky v dosavadním průběhu vyhledávacího procesu. Heuristiku považujeme za úspěšnou, když generuje nový bod \mathbf{y} takový, že $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x}_{\max})$. Různým hodnocením této úspěšnosti dostaneme různé varianty algoritmu se soutěžícími heuristikami. Nejjednodušší je určovat q_i jako relativní četnost dosavadní úspěšnosti i -té heuristiky

$$q_i = \frac{n_i + n_0}{\sum_{j=1}^h (n_j + n_0)}, \quad (10)$$

kde n_i je dosavadní počet úspěchů i -té heuristiky, $n_0 > 0$ je vstupní parametr algoritmu. Nastavením $n_0 \geq 1$ zabezpečíme, aby jeden náhodný úspěch heuristiky nevyvolal příliš velkou změnu v hodnotě q_i . Jinou možností, jak ohodnotit úspěšnost heuristiky, je vážit úspěšnost relativní změnou hodnoty funkce. Váha w_i se určí jako

$$w_i = \frac{f_{\max} - \max(f(\mathbf{y}), f_{\min})}{f_{\max} - f_{\min}}. \quad (11)$$

Hodnoty w_i jsou v intervalu $(0, 1)$ a pravděpodobnost q_i se pak vyhodnotí jako

$$q_i = \frac{W_i + w_0}{\sum_{j=1}^h (W_j + w_0)}, \quad (12)$$

kde W_i je součet vah w_i v předcházejícím hledání a $w_0 > 0$ je vstupní parametr algoritmu.

Aby se zabránilo potlačení možnosti výběru některé z heuristik, lze zadat vstupní parametr $\delta > 0$ a klesne-li kterákoli hodnota q_i pod tuto hodnotu, jsou pravděpodobnosti výběru heuristik nastaveny na jejich počáteční hodnoty $q_i = 1/h$.

Pro různé varianty algoritmu můžeme také volit různé množiny soutěžících lokálních heuristik. Kromě reflexe v simplexu to mohou být např. heuristiky vycházející z diferenciální evoluce, kdy bod \mathbf{u} se generuje podle (5) nebo (6) a nový vektor \mathbf{y} vznikne křížením vektoru \mathbf{u} a z populace náhodně vybraného vektoru. Jinou možností jsou heuristiky inspirované evoluční strategií, které generují nový bod \mathbf{y} podle pravidla

$$y_j = x_j + Y, \quad j = 1, 2, \dots, d,$$

kde x_j je j -tá souřadnice náhodně vybraného bodu \mathbf{x} z populace a Y je náhodná veličina, $Y \sim N(0, \sigma_j^2)$. Zatímco v evoluční strategii je hodnota parametru σ_j^2 adaptována v průběhu procesu vyhledávání podle pravidla jedné pětiny (4), zde může odvozena přímo z aktuální populace

$$\sigma_j = c \left(\max_{\mathbf{x} \in P} x_j - \min_{\mathbf{x} \in P} x_j \right) + \varepsilon, \quad j = 1, 2, \dots, d,$$

operátory \max , \min znamenají největší, resp. nejmenší hodnotu j -té souřadnice v aktuální populaci P , $\varepsilon > 0$ zabezpečuje, že hodnota σ_j je kladná, $c > 0$ je vstupní parametr. Heuristikou může být samozřejmě také náhodné generování bodu \mathbf{y} ze spojitého rovnoměrného rozdělení na D , které se užívá ve slepém náhodném prohledávání.

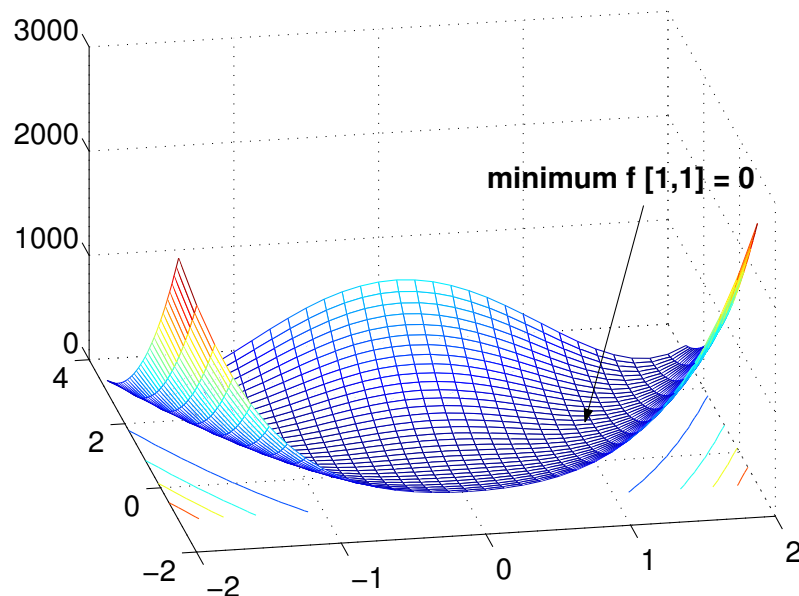
Z výsledků [21], [13] a [14] vyplývá, že algoritmus se soutěžícími lokálními heuristikami je konvergentní ve smyslu rovnice (2), když

- (a) mezi soutěžícími lokálními heuristikami je alespoň jedna zaručující kladnou pravděpodobnost vygenerování nového bodu $\mathbf{y} \in S$, kde S je libovolná otevřená podmnožina D mající Lebesgueovu míru $\lambda(S) > 0$.
- (b) pravděpodobnosti výběru takové heuristiky q_t v každém z t kroků hledání tvoří divergentní řadu ($\sum_{t=1}^{\infty} q_t = \infty$).
- (c) nejlepší bod staré populace vždy přechází do nové populace (je uplatněn elitismus).

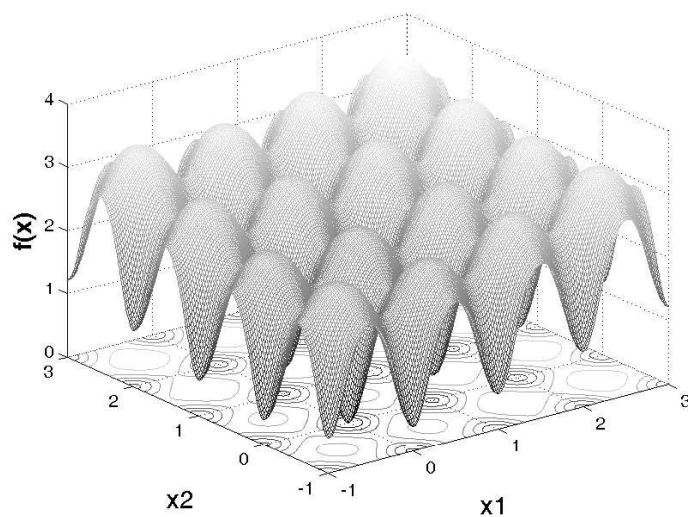
Podmínku (a) lze zabezpečit zařazením heuristiky, která náhodně generuje bod \mathbf{y} ze spojitého rozdělení, jehož sdružená hustota $f_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}) > 0$ pro $\forall \mathbf{y} \in D$. Těto podmínce vyhovuje např. rovnoměrné rozdělení užívané ve slepém náhodném prohledávání. Podmínku (b) lze zajistit volbou kladné limitní hodnoty δ pro změnu dosažených hodnot pravděpodobnosti výběru soutěžících heuristik na počáteční hodnoty v průběhu vyhledávacího procesu, podmínka (c) je u CRS splněna z definice.

9 Experimentální porovnávání algoritmů

Porovnávat rychlost konvergence a spolehlivost nalezení globálního minima různých stochastických algoritmů jen jejich teoretickým rozbohem je obtížné, ne-li nemožné. Proto je nutno tyto algoritmy porovnávat experimentálně, obvykle na sadách testovacích funkcí různého stupně obtížnosti. Dosud sice nebyly vytvořeny zcela standardizované sady testovacích funkcí, ale situace se takové standardizaci postupně přibližuje. Sady testovacích funkcí lze sestavit z funkcí užívaných v člancích zabývajících se testováním a porovnáváním algoritmů pro globální optimalizaci, např. [1], [3], [23] a [32]. Grafy dvou typických testovacích funkcí pro $d = 2$ jsou na obrázcích 5 a 6. Vzhledem



Obrázek 5: Rosenbrockova funkce (banánové údolí).



Obrázek 6: Ackleyho funkce - výřez.

k tomu, že algoritmy jsou stochastické, je nutno na každé úloze je testovat opakovaně. Nejdůležitějšími charakteristikami procesu hledání je spolehlivost přiblížení ke globálnímu minimu a počet vyhodnocení účelové funkce, který vyjadřuje časovou náročnost dosažení podmínky ukončení.

V tabulce 1 je ukázka porovnání výsledků čtyř evolučních algoritmů (CRS se čtyřmi soutěžícími lokálními heuristikami, SOMA a dvě varianty diferenciální evoluce), kterých bylo dosaženo na několika testovacích funkcích. Pro každou úlohu bylo provedeno sto nezávislých opakovaných vyhledávání, R je procento úspěšných nalezení globálního minima, ne je průměrný počet vyhodnocení účelové funkce potřebný pro dosažení podmínky ukončení. Popis nastavení experimentu a podrobnější výsledky i pro další algoritmy a funkce jsou uvedeny v [29], zdrojový text algoritmů v Matlabu [11] je v rozšířené CD verzi [29], která je dostupná i na webové stránce autora článku. Z údajů v tab. 1 vidíme, že v těchto úlohách byl jak nejspolehlivější, tak i nejrychlejší algoritmus CRS se čtyřmi soutěžícími lokálními heuristikami, zatímco ostatní algoritmy v úlohách s větší dimenzí prohledávané oblasti D selhávaly.

Algoritmus		DER		DEADP		SOMA		CRS4HC	
Funkce	d	R	ne	R	ne	R	ne	R	ne
DeJong1	3	100	2676	100	3156	100	3420	100	1777
Ackley	2	100	2369	100	2452	78	3539	100	1713
Rosenbrock	2	100	4061	100	4843	48	4288	100	1156
Ackley	10	0		0		11	43624	100	20798
Rosenbrock	10	0		0		0		100	19686

Tabulka 1: Porovnání výsledků algoritmů na testovacích funkcích.

V tabulce 2 je uvedeno porovnání několika optimalizačních algoritmů na úlohách odhadu parametrů nelineárních regresních modelů metodou nejmenších čtverců. Uvažujeme aditivní nelineární regresní model

$$Y_i = g(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (13)$$

kde $\mathbf{x}_i^T = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ je i -tý řádek matice regresorů \mathbf{X} , $\boldsymbol{\beta}$ je vektor parametrů, g je daná nelineární funkce parametrů, a ε_i jsou stejně rozdělené nezávislé náhodné veličiny s nulovou střední hodnotou. Odhad parametrů nelineárního modelu metodou nejmenších čtverců znamená najít globální minimum reziduálního součtu čtverců

$$Q(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \sum_{i=1}^n \left[Y_i - g(\mathbf{x}_i, \hat{\boldsymbol{\beta}}) \right]^2. \quad (14)$$

Je známo, že na těchto úlohách deterministické algoritmy užívané ve statistickém software někdy selhávají [27]. Zde jsou uvedeny výsledky pro úlohy vyšší obtížnosti z databáze NIST [17]. Porovnávány byly Levenberg-Marquardtův

Algoritmus	<i>nlinfit</i>	CRS4HC		CRS4HCe		DER		CRSH1	
Úloha	výsledek	<i>R</i>	<i>ne</i>	<i>R</i>	<i>rne</i>	<i>R</i>	<i>rne</i>	<i>R</i>	<i>rne</i>
bennett5	L	100	41335	100	-11	5	190	1	-69
boxbod	X	100	1308	100	-37	100	206	90	-1
eckerle4	L	100	2629	100	-35	100	140	94	3
mgh09	L	100	10422	100	-15	100	1427	0	184
mgh10	L	100	20761	100	1	0	478	0	-50
rat42	OK	100	2942	100	-35	100	474	81	42
rat43	OK	100	4807	100	-39	100	904	87	83
thurber	OK	100	13915	100	-30	0	1912	1	824

Tabulka 2: Porovnání algoritmů v odhadu parametrů nelineární regrese.

algoritmus, který je jako funkce *nlinfit* součástí statistického toolboxu Matlabu, a čtyři stochastické algoritmy. CRS1H je řízené náhodné prohledávání s reflexí simplexu jako jedinou lokální heuristikou, DER je standardní diferenciální evoluce, CRS4HC a CRS4HCe jsou algoritmy se čtyřmi soutěžícími heuristikami, v CRS4HCe je navíc ještě zabudována adaptace podmínky ukončení podle dosažené hodnoty indexu determinace. Pro snadnější porovnání časových nároků jsou ve sloupcích *rne* uvedeny průměrné hodnoty relativního rozdílu *ne* vzhledem k CRS4HC v procentech, takže záporné hodnoty znamenají menší časovou náročnost než má CRS4HC, kladné hodnoty naopak náročnost vyšší. Ve sloupci *nlinfit* výsledek L znamená ukončení iterace mimo globální minimum, X je numerický kolaps procedury a OK je správný výsledek. Vidíme, že Levenberg-Marquardtův algoritmus selhal v pěti úlohách z osmi a podobně neúspěšné byly i algoritmy DER a CRSH1, zatímco adaptivní algoritmy CRS4HC a CRS4HCe se soutěžícími lokálními heuristikami nacházely v těchto úlohách úspěšně globální minimum s přijatelnými časovými nároky (1000 vyhodnocení funkce na PC trvá okolo 1 vteřiny). Adaptace podmínky ukončení v CRS4HCe navíc ve většině úloh umožnila zmenšit časovou náročnost oproti CRS4HC zhruba o třetinu.

Podrobnější výsledky stochastických algoritmů v odhadu parametrů nelineárních regresních modelů na všech úlohách NIST jsou uvedeny v [30]. Popis adaptivního algoritmu CRS4HCe pro odhad parametrů nelineární regresních modelů je v [31], zdrojový text v Matlabu je dostupný k volnému využití na webové stránce autora článku (<http://albert.osu.cz/tvrdik/>).

10 Závěr

Tento článek je jen stručným úvodem do problematiky stochastických algoritmů pro globální optimalizaci. Pozornost je věnována především základním principům evolučních algoritmů užívaných v řešení spojitých optimalizačních problémů se zřetelem na jejich možné využití ve výpočetní statistice. Podrob-

nější informace najdete v citované a další literatuře. Řada prací je dostupná na webu, jako dobrý start mohou být užitečné stránky Neumaiera [16].

Snad se podařilo přesvědčit čtenáře, že uvedené heuristické postupy mohou být užitečné při řešení praktických problémů globální optimalizace, a že dokonce mohou pomoci tam, kde deterministické algoritmy pro lokální optimalizaci selhávají. Ve výpočetní statistice je takových úloh jistě více, než zde uvedený odhad parametrů nelineárních regresních modelů. Nevýhodou stochastických algoritmů je, že nemají zcela „neprůstředný“ teoretický základ, výhodou je jejich snadná implementace. Pokud se chcete vyhnout programování, je už řada stochastických algoritmů součástí komerčního softwaru nebo je volně dostupná na webu. Při použití heuristických postupů je sice nutno zachovávat jistou obezřetnost, ale pokud vybereme vhodný adaptivní algoritmus, není nutno mít přehnané obavy.

Reference

- [1] Ali M.M., Törn A. (2004). *Population set based global optimization algorithms: Some modifications and numerical studies*. Computers and Operations Research **31**, 1703–1725.
- [2] Bäck T. (1996). *Evolutionary algorithms in theory and practice*. Oxford University Press, New York.
- [3] Deb K. (2005). *A population-based algorithm-generator for real parameter optimization*. Soft Computing **9**, 236–253.
- [4] Dorigo M., Di Caro G., Gambardella L.M. (1999). *Ant algorithms for discrete optimization*. Artificial Life **5**, 137–172.
- [5] Goldberg D.E. (1989). *Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning*. Reading, Addison Wesley.
- [6] Hoffmeister F., Bäck T. (1992). *Genetic algorithms and evolution strategies: similarities and differences*. Report UNIDO SYS-1/92, University of Dortmund.
- [7] Holland J.H. (1975). *Adaptation in natural and artificial systems*. The University of Michigan Press, Ann Arbor.
- [8] Křivý I., Tvrđík J. (1995). *The controlled random search algorithm in optimizing regression models*. Comput. Statist. and Data Anal. **20**, 229–234.
- [9] Kvasnička V., Pospíchal J., Tiňo P. (2000). *Evoluční algoritmy*. STU, Bratislava.
- [10] Lampinen J. (2001). *A bibliography of differential evolution algorithm*. Technical Report. Lappeenranta University of Technology, Department of Information Technology, Laboratory of Information Processing, <http://www.lut.fi/~jlampine/debiblio.htm>. Cited 15/12/2004.
- [11] MATLAB, version 7, The MathWorks, Inc., 2005.
- [12] Michalewicz Z. (1992). *Genetic algorithms + data structures = evolution programs*. Berlin, Springer Verlag.

- [13] Mišík L. (2000). *On convergence of a class of evolutionary algorithms*. In: Ošmera P. (ed), MENDEL 2000, 6th International Conference on Soft Computing, University of Technology, Brno, 97–100.
- [14] Mišík L., Tvrđík J., Křivý I. (2001). *On convergence of a class of stochastic algorithms*. In: Antoch, J. and Dohnal, G. (eds.), ROBUST 2000, JČMF, Praha, 198–209.
- [15] Nelder J.A., Mead R. (1964). *A simplex method for function minimization*. Computer J. **7**, 308–313.
- [16] Neumaier A. (2005). *Global optimizamiton*.
<http://solon.cma.univie.ac.at/glopt.html>
- [17] NIST Information Technology Laboratory. (2001) *Statistical reference datasets. Nonlinear regression*.
<http://www.itl.nist.gov/div898/strd/>.
- [18] Price W.L. (1977). *A controlled random search procedure for global optimization*. Computer J. **20**, 367–370.
- [19] Rechenberg I. (1973). *Evolutionsstrategie: Optimierung technischer systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution*. Frommann-Holzboog, Stuttgart.
- [20] Schwefel H.-P. (1981). *Numerical optimization of computer models*. Wiley, Chichester.
- [21] Solis F.J., Wets R.J-B. (1981). *Minimization by random search techniques*. Mathematics of Operations Research **6**, 19–30.
- [22] Spall J. C. (2003). *Introduction to stochastic search and optimization*. Wiley-Interscience.
- [23] Storn R., Price K. (1997). *Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization*. J. Global Optimization **11**, 341–359.
- [24] Törn A., Žilinskas A. (1989). *Global optimization*. Lecture Notes in Computer Science, **350**, Springer.
- [25] Tvrđík J., Křivý I., Mišík L. (2001). *Evolutionary algorithm with competing heuristics*. In: Matoušek R. and Ošmera P. (eds), MENDEL 2001, 7-th Int. Conference on Soft Computing, University of Technology, Brno, 58–64.
- [26] Tvrđík, J. Mišík L., Křivý I. (2002). *Competing heuristics in evolutionary algorithms*. In: Sinčák P. et al. (eds.), 2nd Euro-ISCI Intelligent Technologies – Theory and Applications, IOS Press, Amsterdam, 159–165.
- [27] Tvrđík J., Křivý I., (2004). *Comparison of algorithms for nonlinear regression estimates*. In: Antoch J. (ed.), COMPSTAT 2004. Physica-Verlag, Heidelberg New York, 1917–1924.

- [28] Tvrdík J. (2004). *Generalized controlled random search and competing heuristics*. In: Matoušek R. and Ošmera P. (eds), MENDEL 2004, 10th International Conference on Soft Computing, University of Technology, Brno, 228–233.
- [29] Tvrdík J. (2005). *Competition and cooperation in evolutionary algorithms: A comparative study*. In: MENDEL 2005, Matoušek R. and Ošmera P. (eds), 11-th Int. Conference on Soft Computing, University of Technology, Brno, 108–113. Extended CD version available at http://albert.osu.cz/tvrdik/down/global_optimization.html
- [30] Tvrdík J., Křivý I., Mišík L. (2006). *Adaptive population-based algorithm for global optimization*. COMPSTAT 2006 (accepted).
- [31] Tvrdík J., Křivý I., Mišík L. (2006). *Adaptive population-based search: Application to nonlinear regression*. IRAFM Research Report No. 98, University of Ostrava. <http://ac030.osu.cz/irafm/resrep.html>
- [32] Winter G., Galvan B., Alonso S., Gonzales B., Jimenez J.I., Greimer D., (2005). *A flexible evolutionary agent: cooperation and competition among real-coded evolutionary operators*. Soft Computing **9**, 299–323.
- [33] Wolpert D.H., Macready W. G., (1997). *No free lunch theorems for optimization*. IEEE Transactions on Evolutionary Computation **1**, 67–82.
- [34] Zelinka I., Lampinen J. (2000). *SOMA – Self-organizing migrating algorithm*. In: Ošmera P. (ed.), MENDEL 2000, 6-th Int. Conference on Soft Computing, University of Technology, Brno, 177–187.
- [35] Zelinka I. (2002). *Umělá inteligence v problémech globální optimalizace*. BEN, Praha.

Poděkování: Tato práce byla podporována grantem GAČR 201/05/0284.

Adresa: J. Tvrdík, PřF OU, Katedra informatiky, 30. dubna 22,
701 03 Ostrava

E-mail: tvrdik@osu.cz

INTERVALOVÝ ODHAD PRAHOVÉHO PARAMETRU NĚKTERÝCH ROZDĚLENÍ

Vladimír Václavík, Jiří Reif

Klíčová slova: Logaritmicko-normální, Weibullovo a gama rozdělení, robustní intervalový odhad prahového parametru.

Abstrakt: Simulační studie ukazují, že pro náhodné výběry běžného rozsahu ($n \leq 100$) je obtížné odlišit logaritmicko-normální, Weibullovo a gama rozdělení. Uvažujeme tato rozdělení s prahovým parametrem. Navrhujeme intervalový odhad prahového parametru, který je v jistém smyslu robustní vůči chybnému výběru modelu ve třídě zahrnující tříparametrické varianty zmíněných rozdělení. Zkoumáme též chování tohoto odhadu v případech, že zpracovávaný statistický soubor je směsí v důsledku nehomogenity některého z parametrů, popř. je náhodným výběrem ze zobecněného (čtyřparametrického) logaritmicko-normálního rozdělení.

1 Rozdělení s prahovým parametrem

Pravděpodobně nejčastěji používanými modely pro shora neomezenou náhodnou veličinu, která je zdola omezena nějakou prahovou hodnotou, jsou rozdělení logaritmicko-normální, Weibullovo a gama rozdělení se třemi parametry, které se nazývají prahovým parametrem, parametrem tvaru a parametrem měřítka. Tato rozdělení se ukázala být užitečnými v mnoha aplikacích, viz např. [7], [12], [17]. Zatímco odhady parametrů těchto rozdělení byly studovány již v řadě prací (některé z nich uvádíme v seznamu literatury), poměrně málo prací je věnováno otázkám testů dobré shody a rozlišování těchto rozdělení ([4], [8], [10], [11], [15]). Jak nasvědčují dosavadní studie, pro tato rozdělení zřejmě neexistují testy shody, jejichž pravděpodobnosti chyb 1. druhu by nezávisely na parametrech tvaru.

Uvažujme následující parametrizace hustot pravděpodobnosti těchto rozdělení, ve kterých je prahový parametr jednotně označen γ a parametry tvaru jsou označeny σ , c a m :

- logaritmicko-normální rozdělení $LN(\gamma, \mu, \sigma^2)$

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } x \leq \gamma, \\ \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \frac{1}{x-\gamma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}[\ln(x-\gamma) - \mu]^2\right\} & \text{pro } x > \gamma, \end{cases}$$

kde $\gamma \in \mathbb{R}$, $\sigma > 0$ a $\mu \in \mathbb{R}$;

- Weibullovo rozdělení $W(\gamma, c, \theta)$

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } x \leq \gamma, \\ \frac{c}{\theta} \left(\frac{x-\gamma}{\theta}\right)^{c-1} \exp\left\{-\left(\frac{x-\gamma}{\theta}\right)^c\right\} & \text{pro } x > \gamma, \end{cases}$$

kde $\gamma \in \mathbb{R}$, $c > 0$ a $\theta > 0$;

- gama rozdělení $G(\gamma, m, \theta)$

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } x \leq \gamma, \\ \frac{1}{\theta\Gamma(m)} \left(\frac{x-\gamma}{\theta}\right)^{m-1} \exp\left\{-\left(\frac{x-\gamma}{\theta}\right)\right\} & \text{pro } x > \gamma, \end{cases}$$

kde $\gamma \in \mathbb{R}$, $m > 0$ a $\theta > 0$.

Používají se však i jiné parametrizace Weibullova a gama rozdělení, viz např. [1, str. 23 a 32], pro dvouparametrické varianty těchto rozdělení ($\gamma = 0$).

V literatuře se při numerických výpočtech a simulacích obvykle uvažují pro parametry tvaru nejvýše rozmezí $0,1 \leq \sigma \leq 3$ (např. [3], [6]), $0,3 \leq c \leq 5$ (např. [8], [9], [16]) a $0,5 \leq m \leq 64$ (např. [2], [13]).

Jak vyplývá ze známé podobnosti logaritmickeo-normálního, Weibullova a gama rozdělení, jejich správné rozlišení může být obtížné i v případě, že k dispozici máme náhodný výběr poměrně velkého rozsahu. Uvažujeme-li např. logaritmickeo-normální nebo Weibullovo rozdělení jako základní a druhé z těchto rozdělení jako alternativní, lze síly některých testů dobré shody najít v [14].

V následující sekci nabízíme intervalový odhad prahového parametru, který je dostatečně spolehlivý bez ohledu na skutečnost, ze kterého z uvedených tří rozdělení náhodný výběr pochází.

2 Robustní intervalový odhad prahového parametru

Při konstrukci odhadu prahového parametru je vzhledem k předchozímu vhodné vycházet z předpokladu, že není jisté, zda náhodný výběr pochází z logaritmickeo-normálního, Weibullova nebo gama rozdělení (budeme hovořit o třídě $\{LN, W, G\}$), případně z některého jiného rozdělení.

Popíšeme intervalový odhad pro prahový parametr logaritmickeo-normálního rozdělení, který podle našich simulací přibližně zajišťuje požadovanou spolehlivost i při případném chybném určení modelu ve třídě $\{LN, W, G\}$.

Při konstrukci intervalu spolehlivosti pro prahový parametr se zaměříme na dolní mez, protože shora je tento parametr triviálně omezen nejmenším prvkem realizace náhodného výběru.

Nechť X_1, \dots, X_n je náhodný výběr z rozdělení $LN(\gamma, \mu, \sigma^2)$. V dalším budeme značit \bar{X} , $X_{(1)}$ a S výběrový průměr, nejmenší prvek výběru a výběrovou směrodatnou odchylku. Je zřejmé, že rozdělení statistik

$$G = \frac{\bar{X} - X_{(1)}}{S} \quad \text{a} \quad H = \frac{\bar{X} - X_{(1)}}{\exp \mu}$$

nezávisí na volbě prahového parametru γ a parametru měřítka μ . S využitím této skutečnosti nalezneme ve 2. a 4. kroku níže uvedeného algoritmu dolní mez $\sigma_{(p)}$ a horní mez $\mu^{(p)}$ jednostranných přibližně $100p\%$ -ních intervalů spolehlivosti pro parametry σ a μ rozdělení $LN(\gamma, \mu, \sigma^2)$.

V 5. kroku algoritmu pak stanovíme vzorcem (2) dolní mez $\gamma_{(p)}$ přibližně alespoň $100p\%$ -ního intervalu spolehlivosti pro parametr γ tohoto rozdělení.

Motivace vzorce (2) pochází z vyjádření mediánu nejmenšího prvku náhodného výběru. Nechť F je distribuční funkce rozdělení $LN(\gamma, \mu, \sigma^2)$ a $F_{(1)}$ je distribuční funkce $X_{(1)}$. Pak pro každé reálné x platí

$$F_{(1)}(x) = 1 - [1 - F(x)]^n = 1 - \left[1 - \Phi \left(\frac{\ln(x - \gamma) - \mu}{\sigma} \right) \right]^n.$$

Z rovnice $F_{(1)}(\tilde{x}_{(1)}) = 0,5$ získáme medián $\tilde{x}_{(1)}$ veličiny $X_{(1)}$,

$$\tilde{x}_{(1)} = \gamma + \exp\{\mu + \sigma\Phi^{-1}(1 - 2^{-1/n})\}. \quad (1)$$

Jestliže ve vztahu (1) odhadneme medián $\tilde{x}_{(1)}$ hodnotou $X_{(1)}$ a parametry μ a σ nahradíme $\mu^{(p)}$ a $\sigma_{(p)}$, obdržíme pro γ dolní mez (2).

Algoritmus konstrukce dolní meze

Mějme k dispozici realizaci x_1, \dots, x_n náhodného výběru rozsahu n z rozdělení $LN(\gamma, \mu, \sigma^2)$ s výběrovým průměrem \bar{x} , výběrovou směrodatnou odchylkou s a nejmenším prvkem $x_{(1)}$. Nechť $p \in (0; 1)$ (řekněme $p = 0,95$) a chceme určit dolní mez (přibližně) alespoň $100p\%$ -ního intervalu spolehlivosti pro parametr γ , tedy hodnotu $\gamma_{(p)}$ takovou, aby přibližně platilo $P[\gamma > \gamma_{(p)}] \geq p$. Postupujeme následovně.

1. Simulujeme náhodné výběry $X_1, \dots, X_n \sim LN(0; 0; \sigma^2)$. Pomocí simulací zjistíme a v závislosti na parametru σ tabelujeme $100(1 - p)\%$ -ní kvantil $g_{p,n}$ statistiky

$$G = \frac{\bar{X} - X_{(1)}}{S},$$

(simulacemi se prokázalo, že např. pro $p = 0,95$ a $n \in \{30; 50; 100; 200\}$ je $g_{p,n} = g_{p,n}(\sigma)$ klesající funkcí proměnné σ v oboru $0,1 \leq \sigma \leq 3$, který uvažujeme).

2. Pomocí tabulky vytvořené v předchozím bodě určíme hodnotu

$$\sigma_{(p)} = g_{p,n}^{-1} \left(\frac{\bar{x} - x_{(1)}}{s} \right),$$

kde $g_{p,n}^{-1}$ je inverzní funkce k funkci $g_{p,n}(\sigma)$.

3. Simulacemi náhodných výběrů $X_1, \dots, X_n \sim LN(0; 0; \sigma_{(p)}^2)$ zjistíme $100(1 - p)\%$ -ní kvantil $h_{p,n}(\sigma_{(p)})$ statistiky

$$H = \bar{X} - X_{(1)}.$$

4. Určíme hodnotu $\mu^{(p)}$ podle vzorce

$$\mu^{(p)} = \ln \left(\frac{\bar{x} - x_{(1)}}{h_{p,n}(\sigma_{(p)})} \right).$$

5. Dolní mez $\gamma_{(p)}$ intervalu spolehlivosti pro γ definujeme předpisem

$$\gamma_{(p)} = x_{(1)} - \exp\{\mu^{(p)} + \sigma_{(p)}\Phi^{-1}(1 - 2^{-1/n})\}, \quad (2)$$

kde Φ je distribuční funkce normovaného normálního rozdělení.

V případě, že $n \in \{30; 50; 100; 200\}$ a x_1, \dots, x_n je realizací náhodného výběru z logaritmicko-normálního rozdělení, je $(\gamma_{(0,95)}, x_{(1)})$ přibližně alespoň 95%-ním intervalem spolehlivosti pro γ , jak vyplývá z tabulky 1.

Je zřejmé, že pro výběry z Weibullova a gama rozdělení závisí spolehlivost tohoto intervalu pro prahový parametr pouze na parametrech tvaru. Simulacemi jsme zjistili, že tato spolehlivost je nejméně 0,95, viz tabulky 2 a 3. Hodnotu $\gamma_{(0,95)}$ lze tedy doporučit ke stanovení dolní meze přibližně alespoň 95%-ního intervalu spolehlivosti pro prahový parametr rozdělení ze třídy $\{LN, W, G\}$.

Simulace rovněž potvrdily robustnost meze $\gamma_{(0,95)}$ vůči nehomogenitě dat x_1, \dots, x_n způsobené změnami parametrů μ nebo σ při generování logaritmicko-normálního rozdělení.

n	$\sigma = 0,1$	$\sigma = 0,5$	$\sigma = 1,0$	$\sigma = 2,0$	$\sigma = 3,0$
30	0,947	0,950	0,970	0,991	0,994
50	0,951	0,941	0,970	0,991	0,991
100	0,947	0,932	0,965	0,984	0,988
200	0,948	0,904	0,942	0,972	0,977

Tabulka 1: Relativní počet případů, kdy pro náhodný výběr z rozdělení $LN(\gamma, \mu, \sigma^2)$ platilo $\gamma_{(0,95)} < \gamma$, použito 1 000 simulací.

n	$c = 0,3$	$c = 0,5$	$c = 1,0$	$c = 2,0$	$c = 5,0$
30	1,000	1,000	1,000	1,000	0,999
50	1,000	1,000	1,000	1,000	0,999
100	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
200	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000

Tabulka 2: Relativní počet případů, kdy pro náhodný výběr z rozdělení $W(\gamma, c, \theta)$ platilo $\gamma_{(0,95)} < \gamma$, použito 1 000 simulací.

n	$m = 0,5$	$m = 1,0$	$m = 4,0$	$m = 16,0$	$m = 64,0$
30	1,000	1,000	0,993	0,979	0,968
50	1,000	1,000	0,996	0,976	0,966
100	1,000	1,000	1,000	0,990	0,970
200	1,000	1,000	0,999	0,991	0,983

Tabulka 3: Relativní počet případů, kdy pro náhodný výběr z rozdělení $G(\gamma, m, \theta)$ platilo $\gamma_{(0,95)} < \gamma$, použito 1 000 simulací.

3 Zobecněné (čtyřparametrické) LN rozdělení

V této části uvedeme příklad modelu, pro který již obecně neplatí doporučení použít $\gamma_{(0,95)}$ jako dolní mez pro přibližně alespoň 95%-ní interval spolehlivosti pro prahový parametr.

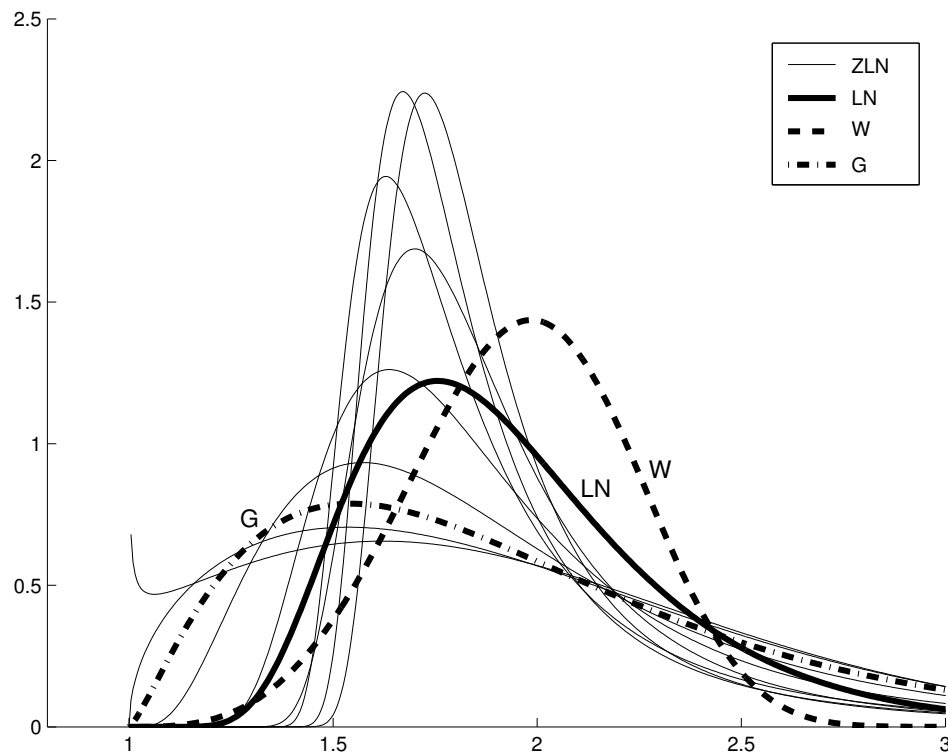
Náhodná veličina se řídí zobecněným (čtyřparametrickým) logaritmicke-normálním (ZLN) rozdělením s parametry $\gamma \in \mathbb{R}$, $\lambda \in \mathbb{R}$, $\mu \in \mathbb{R}$ a $\sigma > 0$ (viz např. [5]) s hustotou pravděpodobnosti $f(x)$, jestliže $f(x) = 0$ pro $x \leq \gamma$ a pro $x > \gamma$ je

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma \Phi([\mu + \lambda^{-1}]/\sigma)} \phi\left(\frac{x(\lambda) - \mu}{\sigma}\right) (x - \gamma)^{\lambda-1} & \text{pro } \lambda > 0, \\ \frac{1}{\sigma} \phi([\ln(x - \gamma) - \mu]/\sigma) (x - \gamma)^{-1} & \text{pro } \lambda = 0, \\ \frac{1}{\sigma \Phi(-[\mu + \lambda^{-1}]/\sigma)} \phi\left(\frac{x(\lambda) - \mu}{\sigma}\right) (x - \gamma)^{\lambda-1} & \text{pro } \lambda < 0, \end{cases}$$

kde Φ a ϕ jsou distribuční funkce a hustota pravděpodobnosti normovaného normálního rozdělení a $x(\lambda) = ([x - \gamma]^\lambda - 1)/\lambda$, tj. $x(\lambda)$ je Boxova-Coxova transformace hodnoty $x - \gamma$. Pro $\lambda = 0$ tedy jde o rozdělení LN.

Protože ZLN rozdělení není příliš známé, uvádíme na obrázku 1 některé tvary hustot tohoto rozdělení a pro srovnání též hustoty rozdělení uvažovaných v předchozích sekcích. Prahový parametr u zobrazených hustot je roven 1. Další parametry hustot jsou voleny tak, aby všechna rozdělení měla stejné střední hodnoty a rozptyly.

Simulace ukázaly, že zvolíme-li v ZLN rozdělení dostatečně záporná λ (např. $\lambda = -1$), padne hodnota $\gamma_{(0,95)}$ pro většinu realizací náhodných výběrů nad prahový parametr γ . Pro tento model tedy není vhodné používat pro určení dolní meze intervalu spolehlivosti pro prahový parametr algoritmus ze sekce 2 příspěvku.



Obrázek 1: Srovnání některých hustot ZLN rozdělení a hustot LN, W a G rozdělení, vždy $E(X) = 1,9$ a $var(X) = 0,065$.

Reference

- [1] Antoch J., Vorlíčková D. (1992). *Vybrané metody statistické analýzy dat*. Academia, Praha.
- [2] Balakrishnan N., Wang J. (2000). *Simple efficient estimation for the three-parameter gamma distribution*. J. Stat. Plan. Infer. **85**, 115–126.
- [3] Balakrishnan N., Wang J. (2000). *Simple efficient estimation for three-parameter lognormal distributions with applications to emissions data and state traffic rate data*. In: Selected Papers from the 3rd Workshop on Simulation (St. Petersburg, 28.6.–3.7.1998). Balakrishnan N., Melas V.B., Ermakov S. (eds), Birkhauser, Boston, 373–384.
- [4] Chen C. (2005). *Tests of fit for the three-parameter lognormal distribution*. Comput. Stat. Data Anal. **50**, 1418–1440.
- [5] Chen G. (1995). *Generalized log-normal distributions with reliability application*. Comput. Stat. Data Anal. **19**, 309–319.
- [6] Cohen A.C., Whitten B.J. (1980). *Estimation in the three-parameter lognormal distribution*. J. Amer. Statist. Assoc. **75**, 370, 399–404.
- [7] Crow E.L., Shimizu K. (eds) (1988). *Lognormal distributions. Theory and applications*. Marcel Dekker, New York.

- [8] Evans J.W., Johnson R.A., Green D.W. (1997). *Goodness-of-fit tests for two-parameter and three-parameter Weibull distributions*. In: Advances in the Theory and Practice of Statistics. Johnson N.L., Balakrishnan N.(eds), Wiley, New York, 159–178.
- [9] Gallagher M.A., Moore A.H. (1990). *Robust minimum-distance estimation using the 3-parameter Weibull distribution*. IEEE Trans. Reliab. **39**, 5, 575–580.
- [10] Kane V.E. (1982). *Standard and goodness-of-fit parameter estimation methods for the three-parameter lognormal distribution*. Comm. Statist. Theory Methods **11**, 17, 1935–1957.
- [11] Lockhart R.A., Stephens M.A. (1993). *Estimation and tests of fit for the three-parameter Weibull distribution*. J. Roy. Statist. Soc. Ser. B **56**, 3, 491–500.
- [12] Offinger, R. (1998). *Least squares and minimum distance estimation in the three-parameter Weibull and Fréchet models with applications to river drain data*. In: Advances in Stochastic Models for Reliability, Quality and Safety. Kahle W., von Collani E., Jensen U. (eds) Birkhauser, Boston, 81–97.
- [13] Pang W., Hou S., Yu B.W.T., Li K.W.K. (2004). *A simulation based approach to the parameter estimation for the three-parameter gamma distribution*. Eur. J. Oper. Res. **155**, 675–682.
- [14] Reif J., Václavík V. (2006). *Inference for the three-parameter Weibull and lognormal distributions*. In: 5th International Conference Aplimat, část II (sborník konference konané v Bratislavě, 7.–10. února 2006). Kováčová M. (ed.) FX spol. s r.o., Bratislava, 591–598.
- [15] Upadhyay S.K., Peshwani M. (2003). *Choice between Weibull and lognormal models: A simulation based Bayesian study*. Comm. Statist. Theory Methods **32**, 2, 381–405.
- [16] Wyckoff J., Bain L.J., Engelhardt M. (1980). *Some complete and censored sampling results for the three-parameter Weibull distribution*. J. Stat. Comput. Simul. **11**, 139–151.
- [17] Zikic A.M., Ristic R.I., Sherwood J.N. (1996). *Three-parameter distribution function fit to growth rate dispersion among small crystals*. J. Cryst. Growth **158**, 560–567.

Poděkování: Tato práce byla podporována výzkumným záměrem MSM 4977751301.

Adresa: V. Václavík, J. Reif, Katedra matematiky, FAV ZČU, Univerzitní 8, 306 14 Plzeň

E-mail: bos@kma.zcu.cz, reif@kma.zcu.cz

BEYOND CLASSIFICATION

Pavel Vaněček

Keywords: Data mining, genetic algorithm, classification.

Abstract: We present an algorithm for data description standing on the border between cluster analysis and classification. We search for clusters of similar observations where the similarity is given by a target variable which does not directly enter into the clustering. We are not interested in the description of all observations but we focus on some well defined subsets only.

1 Introduction

Contemporary computational statistics “suffers” from an abundance of data. This surplus requires completely new approach to data mining: Not information but knowledge is what matters. The aim of modern data mining should not be only searching for patterns but also presenting them in some comprehensible form. The typical receiver of the results has little statistical background but he or she has experience and intuition so the results should be delivered in his or her “language”.

This paper belongs to the data mining field. In cooperation with examine department of market research company TNS AISA, we develop an algorithm for data description called “The Prospector” which enables us to find and identify important patterns in data. Name “Prospector” already exists in data mining literature (see for instance [1]) so please do not get confused.

In the second paragraph we remind classification and cluster analysis. Their practical use and data preparation is remarked in the third section. The next passage demonstrates problems in description of results of classification which our algorithm solves. The fifth paragraph provides details insight into the algorithm.

2 Classical methods

In this paragraph let us briefly recall and comment some techniques on which our algorithm is based - classification and cluster analysis. We use the data mining terminology which sometimes slightly differs from the concepts used in statistics.

Classification is a statistical tool for finding dependence between possibly many predictor variables and one target variable. It is sometimes called machine learning or supervised learning because the known target controls the learning process. Classification methods might be decision trees, neural networks, linear and logistic regression, discriminant analysis, or support vector machines (see for instance [3]). Also more elaborate algorithms, like averaging of decision trees proposed by Leo Brieman (see [2]) and known as random forests, can be used. The aim of all mentioned techniques is to find a model,

which is sometimes very complex and complicated for explicit description, but which enables us to estimate value of the target variable given values of the predictor variables.

Cluster analysis is another method of multivariate statistics, known as unsupervised learning. It groups similar observations into a few separate clusters. In statistical terms it minimizes variance within clusters and maximizes variance among clusters. There is hierarchical clustering, k-means clustering, or combination of both. Furthermore, methods may differ in the choice of measure of similarity for both observations and clusters (Euclidean distance, Manhattan distance, log-likelihood measure) and in the determination of cluster count. The aim of these techniques is to divide given data into groups.

3 Some remarks on classical methods

Let us discuss some practical problems which might occur in everyday use of classification or cluster analysis. We demonstrate all the issues on a simple example of customers of a telecommunication operator. Imagine that we wish to determine whether a customer will end his or her contract with the operator (it is called “churn of customer”). This leads to a classification problem. We also wish to describe those clients who probably will churn so the operator could persuade them to stay (via commercial, personalized marketing).

All results depend on the chosen statistical method and on the data that enter the method. However, a general rule of thumb is that if the phenomenon (dependence, structure) is present in the data then virtually any reasonable method should be able to detect it. Selection of the most suitable method and tuning its parameters can only improve reached results, so preparation of the input data is critical.

Both classification and clustering work with predictor variables, classification has additional one target variable. The predictor variables might be continuous scale variables (for instance amount of traffic), categorical ordinal variables (level of customer’s education), or categorical nominal variables (marital status, gender). The target variable is typically binary (churn / non-churn) but it can also be continuous (probability of churn).

The plain data “as is” can not enter any statistical procedure. One of the first tasks in data preparation is to define whether the particular variable is continuous, nominal, or ordinal. This might be more complicated than it sounds. On one hand there might be continuous variables (e.g. age in years) which are so sparse that their levels (20-30, 30-50, above 50) might be more appropriate. Or some nominal variables (e.g. kind of tariff) might be so detailed that aggregation into groups is necessary. On the other hand, assigning too many variables as categorical slows down computations dramatically.

Even if the variables are defined properly we have to treat missing values and outliers. Firstly, outliers can badly affect most of methods. Secondly, any unusual values can indicate some systematic error in the data. Finally, there might be some supplementary information present in the missing values (for

instance if the clients systematically did not answer an optional question) and we might assign a new valid value to the missing values.

Now assume that we have enough classified cases in our telecommunication example, no matter if we observed them or just predicted them via some classifier. How do we compare churners and non-churners? Are the non-churners in average 37 years old with mean traffic about 250 minutes per month, 57% females, in comparison to the churners who are in average 41 years old with traffic 220 minutes, 53% females? Is it age which makes the difference? Or gender?

4 Beyond classification

The previous paragraph brought us to the key issue of this article. When we try to describe some clusters (non-churners vs. churners) via averages of the predictor variables, we often end up with some slight differences in their means which might be statistically significant due to large sample size, but which did not convincingly answer our questions.

What might happen? Consider a simple binary decision tree for classification of 0/1 target variable. If we wish to classify a new observation (to know the value of target variable given predictor variables), we drop the observation down the tree: In each node we look at the value of one specific predictor variable and the tree directs us to the left child node or to the right child node. When we end up in a node without any descendants, which is called leaf, this node carries the information whether the target is 0 or 1 there. Now, even if the tree is trained well and the classification procedure is precise, if we computed averages of the predictors for target class 0 and 1 individually we would obtain small and meaningless differences between target classes.

Obvious solution might be using not all observations but just two big leaves with different target classes and compute the averages in those nodes. Then the conclusion might be that although we described only some fraction of the data, we found large differences between target classes for such part of the data. Nevertheless, this solution has one major drawback: Decision trees themselves are usually either inaccurate or very large so it is not clear how to select the final leaves. Furthermore, the split in each node is done by a single variable which is not optimal. There exist some generalizations dealing with this problem - so called tree-bagging averages many decision trees, each built upon a random subsample of the original data. Another method called tree-boosting builds successive trees, each based on errors of the previous tree. Since such techniques increase complexity of decision rules, they are even less suitable for our task.

Supposing that all predictor variables are categorical, an exhaustive solution can be based on searching all possible combinations of all values of predictors and evaluating each combination by the target variable. Stop when you find a combination “good” enough in some sense that includes sufficiently

many observations. This solution is enormously time consuming and results into many small clusters.

The Prospector is an algorithm which originated from the previous ideas but it optimizes number of computations.

5 The prospector

We propose an algorithm for data description standing on the border between cluster analysis and classification. In fact, we make a step beyond classification - we search for groups of observations, defined by predictor variables, which are in some sense significant towards target variable.

Assume that we have a data in the following form: We have possibly many predictor variables and one target variable. The predictors define clusters of observations and the target assesses the clusters. If the target variable is unknown for significantly many observations we have to perform preliminary stage consisting of classification. In that case we use Breiman's random forest method which seems robust and accurate enough (but any other classification technique might be used).

The main part of the algorithm consists of two stages: Categorization of predictor variables and searching for significant subsets.

5.1 Categorization of variable

Since the clustering, which is discussed later, works with categorical variables only, we categorize all continuous variables into a few distinct categories. Also ordinal categorical variables are possibly recoded into fewer number of categories.

There are a lot of ways how to find cuts for categorization. We could either simply divide range of particular variable into a few equidistant intervals or we could define cuts as deciles. The first method may end by unbalanced categorizes (in the sense of number of cases) whereas the second method may have a lot of accumulated cuts. We use genetic algorithm which combines both techniques and let a target variable decide which method more suitable for given set of data.

Assume that there is predictor variable X , which is either continuous or ordinal categorical, and target variable Y , which is either 0/1 variable of scale variable (in our practice, we hardly anytime model nominal variable with more than two classes). Suppose that we have observations (X_i, Y_i) for $i = 1, 2, \dots, n$ and that X_i takes only $m \leq n$ distinct values, so $X_i \in \{v_1, \dots, v_m\}$. The aim is to find indexes $j_0 = 1, j_1, \dots, j_{R-1}, j_R = m$ and divide ordered values $v_{(1)}, \dots, v_{(M)}$ into R separate groups. Variable X is then transformed into new variable Z such that

$$v_{(j_k)} \leq X < v_{(j_{k+1})} \Rightarrow Z = \bar{Y}_k ,$$

where \bar{Y}_k stands for sample average of Y_i for such i that $v_{(j_k)} \leq X_i < v_{(j_{k+1})}$.

If X equals $v_{(m)}$ we transform it into $Z = \bar{Y}_m$.

Let us define chromosome as a sequence of genes (bits) of length m (for instance 00101001000...010). Each gene stands for a distinct value $v_{(j)}$ of variable X . 0 at position j of the chromosome means no cut ($\forall k = 1, \dots, R: j_k \neq j$) meanwhile 1 at position j means a cut ($\exists k = 1, \dots, R: j_k = j$). Fitness of a chromosome (given the target variable Y) is defined as the magnitude of association between transformed variable Z and Y . If Y is a continuous variable then the association equals Pearson's correlation coefficient $\rho_{Z,Y}$, if Y is categorical variable then the association equals Cramers V defined as

$$V = \sqrt{\frac{\chi^2}{n \cdot \min(R - 1, S - 1)}},$$

where χ^2 is computed from contingent table of Z by Y and S is the number of distinct values of target variable Y .

We create a population of chromosomes, typically of size 100 to 500, compute fitness of each chromosome and evolute the population one generation ahead: Parents are selected with respect to their fitness - better parents are more likely selected - and their offsprings are created using either standard crossover operator, combination of parent genes step by step, or mutation. Also there are limitations on number of categories and number of observations in each category. The procedure is stopped either if there is no significant improvement of the best chromosomes for some time or if a maximum number of generation is achieved. The best chromosome of the population is selected and variable X is categorized into variable Z according to the information present in the chromosome.

When we use the described categorization for new observations (in case of prediction) we take the cuts found on training data sample. If an observation is smaller than $v_{(1)}$ (or larger than $v_{(m)}$) we assign it to the lowest (highest) category. We believe that the data on which the algorithm was calibrated are representative and unbiased enough.

5.2 Searching for subsets

Let X^1, X^2, \dots, X^p be predictor variables and Y be target variable. We want to describe the target variable using the predictors by searching for groups of observations with high average target value. If the target is binary 0/1 variable then it means that the groups have high probability of the studied concept. If the target is continuous variable then the groups achieve high levels of the desired quantity.

The key feature is to order values of each predictor X^i with respect to the target Y . In the previous section about categorization we have discussed this procedure when X^i is continuous or ordinal with many categories. Similarly, we recode categorical variable X^i such that we average target Y over its categories.

Suppose that we have variables Z^1, Z^2, \dots, Z^p all of which are categorical (in the sense that each of them takes only a few distinct real values). Assume that each is scaled into interval $\langle 0, 1 \rangle$, which can be done simply by dividing each variable by its maximum value. Now we discuss how to find the subsets of observations.

Let us begin with the simplest case when $p = 1$, so we have just one predictor variable Z^1 with distinct ordered values $\bar{Y}_{(1)}, \dots, \bar{Y}_{(R)}$. Firstly, each value $\bar{Y}_{(j)}$ is evaluated with the criterion which might be $\bar{Y}_{(j)} \cdot n_{(j)}$ ($n_{(j)}$ stands for number of cases in the category) or $\bar{Y}_{(j)}$ (average value of the target in particular category, which in this one-dimensional case does not make much sense because the ordering of variable Z^1 ensures that the best category would always be R) and so on. If we stopped the algorithm now we would get just two clusters for Z^1 (and thus for the original predictor X^1). Secondly, we try to merge the closest clusters together (measured by Euclidian distance) and evaluate the criterion again. We continue with such aggregation while the criterion improves and given maximum number of categories in each cluster is not achieved. Theoretically we might end up with just one category, which would mean that predictor X^1 has low power to explain target Y .

If we have more than one predictor variable ($p > 1$) we compose k -tuples of those ($k \ll p$, k typically varies from 1 to 4), construct k -dimensional grid from the categories of selected predictors, evaluate each grid point, and try to merge closest grid points together into one cluster. Now we can better talk about “radius” of the cluster (maximum distance between grid points in the cluster), “weight” (number of observations in the cluster), or “purity” (average value of the target in the cluster).

The procedure described above creates clusters called nuggets. They are compared to each other via the same criterion that was used for the searching phase and (a few) best ones are selected. Notice, that not all observations are clustered (we focus on a fraction of the data only), so we prefer term “nugget” to “cluster” for the final selected group. The assessment of the nuggets brings up the traditional trade-off between size of a particular nugget and its accuracy (or similarity, purity). It depends on particular case-study which one we prefer.

6 Conclusions

We discussed two major data mining techniques - classification and cluster analysis - and some corresponding practical issues.

Then we proposed an algorithm that enables us to describe results of classification via searching for groups of observations. We can refer to the algorithm as “supervised clustering” because we perform a kind of cluster analysis where the similarity of group members is assessed by additional target variable. Another key difference to the classical cluster analysis is in the fact that we group only fraction of the data, the part which contains essential

information about the target variable. The key requirement of the algorithm is scaling of the input variables because its clustering part allows only categorical variables due to computational efficiency. We employ a genetic algorithm which ensures fast and efficient way of solving the underlying optimization problem. Afterwards, the inputs are searched for subgroups that are relevant to the target variable. This is important because sample means used for description of differences in the data usually do not reveal any important pattern when they are computed over the whole sample.

Reference

- [1] Berka P. (2003). *Dobývání znalostí z databází*. Academia.
- [2] Breiman L., Cutler A. *Random forests*.
http://www.stat.berkeley.edu/~breiman/RandomForests/cc_papers.htm
- [3] Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. (2003). *The elements of statistical learning*. Springer.

Acknowledgement: This work was partially supported by grant GAČR 201/05/H007.

Address: P. Vaněček, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: vanecek@karlin.mff.cuni.cz

KOLMOGOROV-SMIRNOV STATISTICS IN MULTIPLE REGRESSION

Jan Ámos Víšek

Keywords: Regression, empirical distribution of residuals, asymptotic distribution of Kolmogorov-Smirnov statistics, high breakdown point method, implicit weighting of residuals.

Abstract: An asymptotic distribution of Kolmogorov-Smirnov statistics in linear regression model is derived. An example which was the inspiration for deriving the result is given.

1 Introduction of framework and inspiring example

Let \mathcal{N} denote the set of all positive integers, \mathbb{R} the real line and \mathbb{R}^p the p -dimensional Euclidean space. The linear regression model given as

$$Y_i = X_i' \beta^0 + e_i = \sum_{j=1}^p X_{ij} \beta_j^0 + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1)$$

will be considered. For any distribution function (d.f.) $F(t, x) = P(e_1 < t, X_1 < x)$ and any $\beta \in \mathbb{R}^p$ denote

$$F_\beta(v) = P(|e_1 - X_1' \beta| < v) \quad (2)$$

(throughout the paper the sharp inequality in definition of d. f. will be assumed). We shall need the following conditions:

Conditions \mathcal{C} *The sequence $\{(X_i', e_i)'\}_{i=1}^\infty \subset \mathbb{R}^{p+1}$ is sequence of independent and identically distributed random variables (i.i.d. r.v.'s), distributed according to a continuous distribution function $F(t, v)$.*

Conditions \mathcal{C} have an immediate consequence.

Assertion 1.1. *Under **Conditions \mathcal{C}** for any $\beta \in \mathbb{R}^p$ the d.f. $F_\beta(v)$ is continuous.*

Remark 1.1. *Notice please that our notations cover both the model with intercept as well as without it. In the former case, i. e. when we consider the model with intercept, we have to assume that the first coordinates of explanatory variables X_i 's are degenerated and equal to 1.*

Remark 1.2. *The **Conditions \mathcal{C}** don't assume the orthogonality between X_i 's and e_i 's, i. e. $\mathbb{E}\{X_1 \cdot e_1\}$ need not be zero. It allows to employ the result of paper also for instrumental variables and their robust version, see [31], [32], [33] and [34].*

Prior to continuing, we need to enlarge a bit the notations. For any $\beta \in \mathbb{R}^p$ $r_i(\beta) = Y_i - X_i' \beta$ denotes the i -th residual and $r_{(h:n)}^2(\beta)$ the h -th order statistic among the squared residuals, i.e. we have

$$r_{(1:n)}^2(\beta) \leq r_{(2:n)}^2(\beta) \leq \dots \leq r_{(n:n)}^2(\beta). \quad (3)$$

Without loss of generality we may assume that $\beta^0 = 0$ (otherwise we would write in what follows $\beta - \beta^0$ instead of β). Now, let us recall that the *Least Weighted Squares* are given as:

Definition 1.1. *Let w_i , $i = 1, 2, \dots, n$ be some weights. Then the solution of the extremal problem*

$$\hat{\beta}^{(LWS,n,w)} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \sum_{i=1}^n w_i r_{(i:n)}^2(\beta) \quad (4)$$

will be called the Least Weighted Squares.

The definition, together with a discussion of reasons for it, is given in [25]¹. The main advantage of the estimator is in the fact that while preserving *scale-* and *regression-equivariance* of the *Least Median of Squares* and of the *Least Trimmed Squares* (see [14] or [8] or [15], both are of course a special case of LWS), they are more flexible with respect to the level and type of contamination of data and they may be employed for panel data (for which we cannot allow to delete any observation, without the danger of distorting the correlation structure of disturbances and/or of explanatory variables).

Remark 1.3. *We usually generate the weights w_i 's by a weight function $w(v) : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$, putting $w_i = w\left(\frac{i-1}{n}\right)$, see [7]. Then (4) is changed to*

$$\hat{\beta}^{(LWS,n,w)} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \sum_{i=1}^n w \left(\frac{i-1}{n} \right) r_{(i:n)}^2(\beta). \quad (5)$$

Following [7], for any $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, let us define rank of the i -th squared residual as

$$\pi(\beta, \ell) = i \in \{1, 2, \dots, n\} \quad \Leftrightarrow \quad r_{\ell}^2(\beta) = r_{(i)}^2(\beta). \quad (6)$$

Notice please, that equivalently, putting $a_i(\beta) = |r_i(\beta)|$

$$\pi(\beta, \ell) = i \in \{1, 2, \dots, n\} \quad \Leftrightarrow \quad |r_{\ell}(\beta)| = a_{(i)}(\beta) \quad (7)$$

since the order of observations in the sequences

$$r_{(1:n)}^2(\beta) \leq r_{(2:n)}^2(\beta) \leq \dots \leq r_{(n:n)}^2(\beta) \quad \text{and} \quad a_{(1:n)}(\beta) \leq a_{(2:n)}(\beta) \leq \dots \leq a_{(n:n)}(\beta) \quad (8)$$

is the same. Then (5) is modified to

$$\hat{\beta}^{(LWS,n,w)} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \sum_{\ell=1}^n w \left(\frac{\pi(\beta, \ell) - 1}{n} \right) r_{\ell}^2(\beta). \quad (9)$$

¹See also [3] where the estimator is called the *Smoothed Least Trimmed Squares*. Although this *name* indicates that for a *special case* of weights, we obtain the *Least Trimmed Squares* (LTS) as a *special case* of the *Least Weighted Squares* (LWS), it may however obscure the fact that LS are able to control subsample sensitivity (for the *subsample sensitivity* see [19]. The same is true about the behaviour of LTS versus LWS with respect to a small shift of an observation (see [20] or [23]).

Further, for any $\beta \in \mathbb{R}^p$ the empirical distribution of the absolute value of residual will be denoted $F_\beta^{(n)}(v)$. It means that, denoting the indicator of a set A by $I\{A\}$, we have

$$F_\beta^{(n)}(v) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n I\{|r_j(\beta)| < v\} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n I\{|e_j - X'_j\beta| < v\}. \quad (10)$$

Let us observe that due to the sharp inequality in (10), $n \cdot F_\beta^{(n)}(|r_\ell(\beta)|) + 1 = \pi(\beta, \ell)$, i.e. $n \cdot F_\beta^{(n)}(|r_\ell(\beta)|) + 1$ is the rank of the ℓ -th observation in the sequences (8). Then we can rewrite (9) as

$$\hat{\beta}^{(LWS, n, w)} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \sum_{\ell=1}^n w \left(F_\beta^{(n)}(|r_\ell(\beta)|) \right) r_\ell^2(\beta). \quad (11)$$

Then the possibility to approximate $F_\beta^{(n)}(v)$, uniformly in $v \in \mathbb{R}$ and $\beta \in \mathbb{R}^p$ by $F_\beta(v)$, see Corollary 2.1, opens way to study consistency, \sqrt{n} -consistency and the asymptotic representation of $\hat{\beta}^{(LWS, n, w)}$. There are similar situations for other robust estimators with a smooth weight function.

On the other hand, for the discontinuous weight function (e.g. for the *Least Trimmed Squares*) it seems more efficient to employ some other tools (see [28], [29] and [30]). Moreover, Hettmansperger and Sheather [9] indicated that the estimators with discontinuous weight function have a low subsample stability². In other words, they can be useful as diagnostic tool since they are very sensitive to even a small change of data, see [22] or [24]. On the other hand, we should prefer the estimators with continuous weight function whenever we want to identify the underlying model directly by the estimator in question. The model estimated by the estimators with smooth weight functions are much more stable with respect to the shift and/or to the deletion of observations.

2 Kolmogorov-Smirnov statistics

Let for a while $G(v)$ denote the d. f. of a random variable V and $G^{(n)}(v)$ the empirical d. f. based on a independent sample of size n from the d. f. $G(v)$. In 1939 Smirnov [16], using results from [11] (see also [4], [5] and [12]) studied the statistic

$$D_n = \sup_{-\infty < v < \infty} \sqrt{n} \left| G^{(n)}(v) - G(v) \right|. \quad (12)$$

In 1961 Hájek [6] considered (in the framework of rank tests - interpretable as simple linear regression) Kolmogorov-Smirnov statistics (the results were later included into [7]) but his result claims nothing about uniformity of convergence with respect to the coefficients of regression model.

²Although their results appeared not to be fully correct (due to the algorithm they used since it returned a bad approximation to the exact solution of the corresponding extremal problem, see [18]), they initiated study of behavior of high breakdown point estimators on finite samples focused on consequences of the small shift and/or to the deletion of one observation, for details see [20], [23] or [26].

We shall use the result describing the representation and the distribution of D_n which is given as Proposition 13.14 and Theorem 13.16 in [1]. To be more transparent, let us divide Proposition 13.14 of [1] into two parts (the second part of Proposition 13.14 is in fact the proof of Theorem 13.16, see page 286₁₄ of [1]).

Lemma 2.1. (*[1], Proposition 13.14, the first part*) *The statistic D_n is the same for all continuous $G(v)$.*

We will give the proof of Lemma since we will need it later.

Proof: We shall assume that $G(v)$ is strictly increasing (otherwise we restrict ourselves on the set, on which $G(v)$ strictly increases, see [1]). Let $\{V_k\}_{k=1}^{\infty}$ be a sequence of i.i.d. r.v.'s distributed according to $G(v)$. Then for any $n \in \mathcal{N}$ and $v \in \mathbb{R}$ the sets $\{\omega \in \Omega : V_k < v\}$ and $\{\omega \in \Omega : G(V_k) < G(v)\}$ are identical. Now, let us put $U_k = G(V_k)$. Then $\{U_k\}_{k=1}^{\infty}$ is the sequence of i.i.d. r.v.'s, uniformly distributed over $(0, 1)$. Further, having put $H^{(n)}(u) = \frac{\#\{U_k < u, k = 1, 2, \dots, n\}}{n}$ (where “ $\#A$ ” denotes the number of elements of the set A) and recalling that any e.d.f. (at given point $v \in \mathbb{R}^k$ ($k \in \mathcal{N}$) and $\omega \in \Omega$) is the number of random variables which are (coordinatewise) less than v , divided by n , i.e. e.g. empirical d.f. $G^{(n)}(v)$ is number of V_k (among V_1, V_2, \dots, V_n) which are less than v (of course, again divided by n), we arrive at

$$\begin{aligned} D_n &= \sup_{-\infty < v < \infty} \sqrt{n} \left| G^{(n)}(v) - G(v) \right| = \sup_{-\infty < v < \infty} \sqrt{n} \left| H^{(n)}(G(v)) - G(v) \right| \\ &= \sup_{0 \leq u \leq 1} \sqrt{n} \left| H^{(n)}(u) - u \right| \end{aligned}$$

(the probability that the supremum is attained at 0 or 1 is zero). It is clear that the supremum has to occur in one of jumps of e. d. f. $H^{(n)}(u)$, i. e. at one of order statistics $U_{(k:n)}$. Hence

$$D_n = \max_{1 \leq k \leq n} \sqrt{n} \left| H^{(n)}(U_{(k:n)}) - U_{(k:n)} \right|. \quad (13)$$

Moreover, due to the sharp inequality in the definition of d. f., we have $H^{(n)}(U_{(k:n)}) = \frac{k-1}{n}$ and so

$$D_n = \max_{1 \leq k \leq n} \sqrt{n} \left| \frac{k-1}{n} - U_{(k:n)} \right|.$$

Remark 2.1. *Notice that the previous lemma shows that for any two sequences of r.v.'s, say $\{V_k^{(1)}\}_{k=1}^{\infty}$ and $\{V_k^{(2)}\}_{k=1}^{\infty}$ (with d.f. $F^{(1)}(v)$ and $F^{(2)}(v)$, respectively) the corresponding statistics $D_n^{(1)}$ and $D_n^{(2)}$ can be assumed to be the same, not only having the same distribution. Really, let $\{U_k\}_{k=1}^{\infty}$ be a sequence of i.i.d. r.v.'s uniformly distributed over $(0, 1)$ and put $V_k^{(s)} = [F^{(s)}]^{-1}(U_k)$ for $s = 1, 2$. Then we may assume that these two sequences of random variables are those we have started with and applying the technique from the proof of previous lemma we obtain the same D_n for both sequences.*

Now, let us recall following proposition:

Lemma 2.2. ([1], Proposition 13.15) Let $\{U_k\}_{k=1}^\infty$ and $\{Z_k\}_{k=1}^\infty$ be sequences of i.i.d. r.v.'s. Denote by $U_{(k:n)}$ the k -th order statistics among U_1, U_2, \dots, U_n . Assume that U_k 's are uniformly distributed over $(0, 1)$ and

$$P(Z_k > z) = \exp\{-z\} \quad \text{for } z \geq 0 \quad \text{and} \quad P(Z_k \leq 0) = 0.$$

Finally, put $S_\ell = \sum_{k=1}^\ell Z_k$. Then the joint distribution of $U_{(1:n)}, U_{(2:n)}, \dots, U_{(n:n)}$ is the same as the joint distribution of

$$\frac{S_1}{S_{n+1}}, \frac{S_2}{S_{n+1}}, \dots, \frac{S_n}{S_{n+1}}.$$

Lemma 2.3. ([1], Proposition 13.14, the second part) The statistic D_n has the same distribution for all continuous $G(v)$.

Lemma 2.4. ([1], Theorem 13.16.) Let $B(t), 0 \leq t \leq 1$ be normalized Brownian motion. Then

$$D_n \xrightarrow{\mathcal{D}} \sup_{0 \leq t \leq 1} |B(t) - t \cdot B(1)|.$$

Theorem 2.1. Under Conditions \mathcal{C} we have

$$\sup_{v \in \mathbb{R}^+, \beta \in \mathbb{R}^p} \sqrt{n} \left| F_\beta^{(n)}(v) - F_\beta(v) \right| \xrightarrow{\mathcal{D}} \sup_{0 \leq t \leq 1} |B(t) - t \cdot B(1)|. \quad (14)$$

Proof: Let $\{U_i\}_{i=1}^\infty$ be a sequence of i.i.d. r.v.'s uniformly distributed over $(0, 1)$ and put for any $\beta \in \mathbb{R}^p$

$$r_i(\beta) = [F_\beta]^{-1}(U_i).$$

Then the sequence $\{r_i\}_{i=1}^\infty$ is the sequence of i.i.d.r.v.'s and their e.d.f. coincide with $F_\beta^{(n)}(v)$ from (10). Then applying Lemma 2.3 we have

$$D_n = \sup_{v \in \mathbb{R}^+} \sqrt{n} \left| F_\beta^{(n)}(v) - F_\beta(v) \right|$$

the same for all $\beta \in \mathbb{R}^p$, since for any $\beta \in \mathbb{R}^p$ (see (13))

$$D_n = \sup_{v \in \mathbb{R}^+} \sqrt{n} \left| F_\beta^{(n)}(v) - F_\beta(v) \right| = \max_{1 \leq k \leq n} \sqrt{n} \left| H^{(n)}(U_{(k:n)}) - U_{(k:n)} \right|.$$

Hence

$$D_n = \sup_{\beta \in \mathbb{R}^p} \sup_{v \in \mathbb{R}^+} \sqrt{n} \left| F_\beta^{(n)}(v) - F_\beta(v) \right| = \max_{1 \leq k \leq n} \sqrt{n} \left| H^{(n)}(U_{(k:n)}) - U_{(k:n)} \right|.$$

Then applying Lemma 2.4, we conclude the proof.

Lemma 2.5. ([17], page 409, VII.1.6) *Let a and b be positive numbers, and $B(t)$ be a Brownian motion. Then*

$$P\left(\max_{0 \leq t \leq b} |B(t)| > a\right) \leq 2 \cdot P(|B(b)| > a).$$

Remark 2.2. *Since the book by Štěpán [17] is in Czech language we refer also to [1] where however seemingly only weaker assertion can be found, see [1], Proposition 12.20 (page 258).*

Corollary 2.1. *Under Conditions C we have*

$$\sup_{v \in \mathbb{R}^+, \beta \in \mathbb{R}^p} \sqrt{n} \left| F_{\beta}^{(n)}(v) - F_{\beta}(v) \right| = \mathcal{O}_p(1). \quad (15)$$

The proof follows from Theorem 2.1 and Lemma 2.5.

Remark 2.3. *At the first glance it may seem strange that the previous lemma holds for the supremum over all β 's. Nevertheless, taking into account that the residuals for $\beta \in \mathbb{R}^p$ and for $\lambda\beta, \lambda \in \mathbb{R}^+$ are given as (remember that we have assumed $\beta^0 = 0$)*

$$r_i(\beta) = e_i - X'_i \beta \quad \text{and} \quad r_i(\lambda \cdot \beta) = e_i - \lambda X'_i \beta = \lambda \left(\frac{e_i}{\lambda} - X'_i \beta \right),$$

we learn that they differ nearly only in the scale (at least for “large” λ , for which $\frac{e_i}{\lambda}$ is, uniformly in λ larger than some λ_0 , negligible in probability). On the other hand, for any $\lambda \in \mathbb{R}^+$ and any sequence of i.i.d. r.v.'s, say $\{\eta_i\}_{i=1}^{\infty}$, distributed according to a d.f. G_{η} (say), the corresponding empirical d.f.'s $G_{\eta}^{(n)}(z)$ converge for $n \rightarrow \infty$ to the d.f. $G_{\eta}(z)$ precisely in the rate as empirical d.f.'s $G_{\lambda \cdot \eta}^{(n)}(z)$ of the sequence of i.i.d. r.v.'s $\{\lambda \cdot \eta\}_{i=1}^{\infty}$ converge to the d.f. $G_{\lambda \cdot \eta}(z)$, just due to the fact that

$$G_{\eta}(z) = G_{\lambda \cdot \eta}(\lambda \cdot z) \quad \text{and} \quad G_{\eta}^{(n)}(z) = G_{\lambda \cdot \eta}^{(n)}(\lambda \cdot z)$$

and hence

$$\sup_{\lambda \in \mathbb{R}^+} \sup_{z \in \mathbb{R}^k} \left| G_{\lambda \cdot \eta}^{(n)}(z) - G_{\lambda \cdot \eta}(z) \right| = \sup_{z \in \mathbb{R}^k} \left| G_{\eta}^{(n)}(z) - G_{\eta}(z) \right|.$$

Reference

- [1] Breiman L. (1968). *Probability*. Addison-Wesley Publishing Company, London.
- [2] Chatterjee S., Hadi A.S. (1988). *Sensitivity analysis in linear regression*. J. Wiley & Sons, New York.
- [3] Čížek P. (2001). *Robust estimation in nonlinear regression models - sensitivity analysis*. PhD. dissertation, Center of Economic Research and Graduate Education, Charles University.
- [4] Donsker M. (1952). *Justification and extension of Doob's heuristic approach to the Kolmogorov-Smirnov theorems*. Ann. Math. Statist. **23**, 277–281.

- [5] Doob J.L. (1949). *Heuristic approach to the Kolmogorov-Smirnov theorem*. Ann. Math. Statist. **20**, 393–403.
- [6] Hájek J. (1961). *Some extension of the Wald-Wolfowitz-Noether theorem*. AMS **32**, 506–523.
- [7] Hájek J., Šidák Z. (1967). *Theory of rank test*. Academic Press, New York.
- [8] Hampel F.R., Ronchetti E.M., Rousseeuw P.J., Stahel W.A. (1986). *Robust statistics – the approach based on influence functions*. J.Wiley & Sons, New York.
- [9] Hettmansperger T.P., Sheather S.J. (1992). *A cautionary note on the method of least median squares*. The American Statistician **46**, 79–83.
- [10] Jurečková J., Sen P.K. (1989). *Uniform second order asymptotic linearity of M -statistics in linear models*. Statistics and Decisions **7**, 263–276.
- [11] Kolmogorov A. (1933). *Sulla determinazione empirica di una legge di distribuzione*. Giorn. dell’Istituto Ital. degli Attuari **4**, 83–91.
- [12] Kolmogorov A. (1950). *Foundations of probability*. (English translation) Chelsea Publishing Co., New York.
- [13] Koul H.L. (2002). *Weighted dynamical processes in dynamic nonlinear models*. Second edition, Springer, Lecture Notes in Statistics **166**.
- [14] Rousseeuw P.J. (1984). *Least median of square regression*. Journal of Amer. Statist. Association **79**, 871–880.
- [15] Rousseeuw P.J., Leroy A.M. (1987). *Robust regression and outlier detection*. J.Wiley & Sons, New York.
- [16] Smirnov N. (1939). *On the estimation of discrepancy between empirical curves of distribution for two independent samples*. Bull. Math. Univ. Moscow **2**, 3–14.
- [17] Štěpán J. (1987). *Teorie pravděpodobnosti*. Academia, Praha.
- [18] Víšek J.Á. (1994). *Median of squares reconsidered*. Transactions of the Twelfth Prague Conference on Information Theory, Statistical Decision Functions and Random Processes, 254–259.
- [19] Víšek J.Á. (1996). *Sensitivity analysis M -estimates*. Annals of the Institute of Statistical Mathematics **48**, 469–495.
- [20] Víšek J.Á. (1996). *On high breakdown point estimation*. Computational Statistics **11**, 137–146.
- [21] Víšek J.Á. (1997). *Diagnostics of regression subsample stability*. Probability and Mathematical Statistics **17**, Fasc. 2, 231–257.
- [22] Víšek J.Á. (1999). *The robust regression and the experiences from its application on estimation of parameters in a dual economy*. Proceedings of the Conference “Macromodels’99” organized by Wrocław University, 4-6 December, 1999, in Rydzyna, Poland, 424–445.
- [23] Víšek J.Á. (2000). *On the diversity of estimates*. Computational Statistics and Data Analysis **34**, 67–89.

- [24] Víšek J.Á. (2000). *Character of the Czech economy in transition*. Proceedings of the Conference “The Czech Society on the Break of the Third Millennium”, organized by FSV UK, Prague, November 30 - December 2, 2000, Karolinum, Publishing House of the Charles University, 181 – 205.
- [25] Víšek J.Á. (2001). *Regression with high breakdown point*. ROBUST 2000, J. Antoch & G. Dohnal (ed.), The Union of the Czech Mathematicians and Physicists and the Czech Statistical Society, 324 – 356.
- [26] Víšek J.Á. (2002). *Sensitivity analysis of M -estimates of nonlinear regression model: Influence of data subsets*. Annals of the Institute of Statistical Mathematics **54**, 261 – 290.
- [27] Víšek J.Á. (2002). *The least weighted squares. Consistency and asymptotic normality*. Bulletin of the Czech Econometric Society, **9**, 16, 1 – 28.
- [28] Víšek J.Á. (2006). *The least trimmed squares. Part I - Consistency*. Kybernetika **42**, 1 – 36.
- [29] Víšek J.Á. (2006). *The least trimmed squares. Part II - \sqrt{n} -consistency*. To appear in Kybernetika **42**.
- [30] Víšek J.Á. (2006). *The least trimmed squares. Part III - Asymptotic normality*. To appear in Kybernetika **42**.
- [31] Víšek J.Á. (2006). *Instrumental weighted variables*. To appear in Proceedings of the Conference on Perspectives in Modern Statistical Inference III, J. Jurečková (ed.).
- [32] Víšek J.Á. (2006). *Consistency of the instrumental weighted variables*. Submitted to the Probability and Mathematical Statistics.
- [33] Víšek J.Á. (2006). *\sqrt{n} -consistency of the instrumental weighted variables*. Submitted to the Probability and Mathematical Statistics.
- [34] Víšek J.Á. (2006). *Asymptotic representation of the instrumental weighted variables*. Submitted to the Probability and Mathematical Statistics.
- [35] Zvára K. (1989). *Regresní analýza* (Regression Analysis – in Czech). Academia, Prague.

Acknowledgement: We would like to express our gratitude to the anonymous referee for proposing some improvements of paper, especially for drawing our attention to Hájek’s results. The research was supported by grant of GA ČR number 402/06/0408.

Address: J.Á. Víšek, Department of Macroeconomics and Econometrics, Institute of Economic Studies, Faculty of Social Sciences, Charles University & Department of Stochastic Informatics, Institute of Information Theory and Automation, Academy of Sciences of the Czech Republic, Smetanovo náměstí 6, 110 01 Prague 1, Czech Republic

E-mail: visek@mbox.fsv.cuni.cz

NIEKTORÉ MATEMATICKO-ŠTATISTICKÉ MODELY KALIBRÁCIE

Gejza Wimmer

Kľúčové slová: Kalibračné modely, lineárna kalibrácia, regresia s chybami v premenných, aproximácia Kenwardovho-Rogeroého typu.

Abstrakt: Uvedené sú niektoré základné typy kalibrácie. Navrhnutý je nový spôsob riešenia kalibračného problému cestou linearizácie replikovaného modelu s chybami v premenných a aproximácie F -štatistiky Waldovho typu podľa návrhu Kenwarda a Rogera.

1 Úvod

Kalibrácia je jedna zo základných úloh praxe v mnohých oblastiach. Používa sa napr. pri

- konštrukcii snímačov fyzikálnych veličín
- konštrukcii prístrojov
- vývoji nových inštrumentálnych metód
- overovaní metrologických charakteristík prístrojov, atď.

V metrologii sa kalibrácia popisuje ako „*Súbor úkonov, ktoré dávajú za určitých podmienok závislosť medzi hodnotami indikovanými meradlom (meracím prístrojom, meracím systémom, meracou metódou) A a medzi príslušnými hodnotami indikovanými iným meradlom (iným meracím prístrojom, meracím systémom, meracou metódou) B.*“

K rovnakým modelom ako sú modely kalibrácie vedú aj situácie, ktoré popisujeme regresným modelom, v ktorom „známe vplyvy“ (prvky matice plánu) nie sú konštanty, ale hodnoty zaťažené chybami (napr. mnohé ekonomické, biologické, technické modely).

Kalibrácia sa v podstate skladá z dvoch fáz

- (i) zostavenie kalibračného modelu (kalibračný experiment, kalibrácia prístroja)
- (ii) použitie kalibrovaného modelu (meranie kalibrovaným prístrojom).

Matematicko-štatistický pohľad na kalibráciu je

- (i) problém zostavenia (sformulovania) určitého regresného modelu a určenia (odhadu) jeho neznámych parametrov s ich pravdepodobnostnými (štatistickými) vlastnosťami
- (ii) problém vhodnej predikcie (alebo odhadu) v skúmanom regresnom modeli.

V príspevku sa budeme venovať jednorozmerným lineárnym kalibračným problémom.

Definícia: Kalibračná priamka (krivka) vyjadruje vzťah medzi bezchybnými (ideálnymi) výsledkami merania tej istej entity (toho istého objektu, koncentrácie, atď.) dvomi meracími prostriedkami (systémami, metódami) A a B.

Predpokladáme teda, že kalibračná funkcia je priamka

$$\nu = a + b\mu,$$

kde μ sú bezchybné hodnoty na meradle A, ν bezchybné hodnoty na meradle B. Viac o kalibrácii pozri napr. v [1], [7].

2 Niektoré modely kalibrácie

2.1 Klasický (prirodzený) regresný estimátor

Majme dvojice náhodných premenných (X_i, Y_i) , $i = 1, 2, \dots, n$, pričom x_i (realizácia X_i) je výsledok i -teho merania (i -tej súčiastky, koncentrácie) prístrojom (meradlom, systémom) A - etalónom, y_i (realizácia Y_i) je výsledok i -teho merania (i -tej súčiastky, koncentrácie, atď.) prístrojom (meradlom, systémom) B - kalibrovaným meradlom. $X_1, Y_1, X_2, Y_2, \dots, X_n, Y_n$ sú nezávislé náhodné veličiny (sú to matematické modely jednotlivých meraní), pre ktoré platí

$$X_i \sim N(\mu_i, \sigma_x^2), \quad Y_i \sim N(\nu_i, \sigma_y^2).$$

Eisenhart [3] už r. 1939 navrhol model kalibrácie

$$Y_i = a + b\mu_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma_y^2).$$

Teoreticky sa v tomto modeli predpokladá znalosť (úplne presných, bezchybných) hodnôt μ_i . Dostávame lineárny regresný model $(\mathbf{Y}, \mathbf{F} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \sigma_y^2 \mathbf{I})$

s observačným vektorom $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)'$, maticou plánu $\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & \mu_1 \\ 1 & \mu_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \mu_n \end{pmatrix}$

a kovariančnou maticou $\sigma_y^2 \mathbf{I}_{n,n}$. Jedná sa vlastne o lineárnu priamkovú regresiu. Hľadané odhady sú

$$\hat{a} = \bar{Y} - \hat{b}\bar{\mu}, \quad \hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2},$$

$$\hat{\sigma}_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i^2 - n\hat{a}\bar{Y} - \hat{b}\sum_{i=1}^n \mu_i Y_i}{n - 2}.$$

Meranie pomocou kalibrovaného prístroja:

Ak máme náhodnú premennú Y_μ (meranie pomocou kalibrovaného prístroja) o ktorej vieme, že

$$Y_\mu = a + b\mu + \omega, \quad \omega \sim N(0, \sigma_y^2),$$

(hodnotu μ nepoznáme), odhad hodnoty μ je $\hat{\mu} = \frac{Y_\mu - \hat{a}}{\hat{b}}$ a približný $1 - \gamma$ konfidenčný interval pre μ je (pozri [1], str. 26)

$$\left[\frac{Y_\mu - \hat{a}}{\hat{b}} \right] \left[1 + \frac{\hat{\sigma}_y^2 t_{n-2}^2 \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)}{\hat{b}^2 \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2} \right] \pm \frac{\hat{\sigma}_y t_{n-2} \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)}{\hat{b}} \left[1 + \frac{1}{2n} + \frac{(Y_\mu - \hat{a})^2 + \hat{\sigma}_y^2 t_{n-2}^2 \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)}{2\hat{b}^2 \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2} \right],$$

alebo (hrubo)

$$\frac{Y_\mu - \hat{a}}{\hat{b}} \pm \frac{\hat{\sigma}_y t_{n-2} \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)}{\hat{b}},$$

kde $t_{n-2} \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)$ je $\left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)$ kvantil Studentovho t_{n-2} rozdelenia. Vlastnosti tohto odhadu $\hat{\mu}$ sú (pozri [1], [8])

- nemá strednú hodnotu
- má nekonečnú strednú kvadratickú chybu (MSE)
- pre malé n približne $E(\hat{\mu}) = \mu + \frac{(\mu - \bar{\mu})\sigma_y^2}{b^2 \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2}$,

$$D(\hat{\mu}) = \frac{\sigma_y^2}{b^2} \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(\mu - \bar{\mu})^2}{\sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2} + \frac{3\sigma_y^2}{b^2 \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2} \right]$$

- asymptoticky pre veľké n je $E(\hat{\mu}) = \mu$, $D(\hat{\mu}) = \frac{\sigma_y^2}{b^2}$.

2.2 Inverzný regresný estimátor

Krutchkoff [5] v roku 1967 navrhol model

$$X_i = c + dY_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Pretože nemáme vhodnú teóriu ako pristúpiť k odhadom c a d , povedalo sa, že „analogicky“ MNŠ metóde sú odhady (s „vymenenými“ súradnými osami)

$$\check{c} = \bar{X} - \check{d}\bar{Y}, \quad \check{d} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}.$$

Meranie pomocou kalibrovaného prístroja:

Ak máme náhodnú premennú Y_μ (meranie pomocou kalibrovaného prístroja) o ktorej vieme, že

$$Y_\mu = \nu + \omega, \quad \omega \sim N(0, \sigma_y^2),$$

pričom $\mu = c + d\nu$ a hodnotu μ nepoznáme, tak odhad hodnoty μ navrhnutý Krutchkoffom je

$$\check{\mu} = \check{c} + \check{d}Y_\mu.$$

Vlastnosti odhadu $\check{\mu}$ sú (v prípade, keď hodnoty merania pomocou etalónu považujeme za „prakticky“ bezchybné, pozri tiež [1], [8])

$$\text{- pre malé } n \text{ približne } E(\check{\mu}) = \mu + \frac{(\bar{\mu} - \mu)(\theta - 1)}{\theta} - \frac{2\sigma_y^2(\bar{\mu} - \mu)(\theta - 1)}{n\theta^3},$$

$$D(\check{\mu}) = \frac{\sigma_y^2}{b^2\theta^2} \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(\mu - \bar{\mu})^2}{\sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2} + \frac{\sigma_y^2(\theta^2 - 2\theta + 6)}{\theta^2 b^2 \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2} \right] - \frac{2(\bar{\mu} - \mu)^2(\theta - 1)^2}{n\theta^4}, \text{ kde } \theta = 1 + \frac{\sigma_y^2(n-1)}{b^2 \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2}$$

$$\text{- asymptoticky pre veľké } n \text{ je } E(\check{\mu}) = \varrho^2\mu + (1 - \varrho^2)\bar{\mu}, \quad D(\check{\mu}) = \frac{\varrho^4\sigma_y^2}{b^2},$$

$$\text{pričom } \varrho^2 = \frac{b^2 \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2}{\sigma_y^2 + b^2 \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2}.$$

Ak merania pomocou etalónu centrujeme, t.j. $\mu_i^* = \mu_i - \bar{\mu}$, tak sa dá ukázať, že $\check{\mu}$ ma menšiu *MSE* ako $\hat{\mu}$ práve vtedy ak $\mu^2 < \frac{\sigma_y^2}{b^2} + \frac{2 \sum_{i=1}^n (\mu_i^*)^2}{n-1}$.

2.3 Riešenie metódou maximálnej vierohodnosti

Máme merania $X_{11}, Y_{11}, \dots, X_{n1}, Y_{n1}$. Túto $2n$ -ticu meraní považujeme za jeden pokus. Vierohodnostná funkcia náhodného vektora $(X_{11}, Y_{11}, \dots, X_{n1}, Y_{n1})'$ je

$$\begin{aligned} L(x_{11}, y_{11}, \dots, x_{n1}, y_{n1}; a, b, \sigma_x^2, \sigma_y^2, \mu_1, \dots, \mu_n) = \\ \prod_{i=1}^n f_i(x_{i1}; \mu_i, \sigma_x^2) \prod_{j=1}^n g_j(y_{j1}; a + b\mu_j, \sigma_y^2) = \\ \frac{1}{(2\pi)^n \sigma_x^n \sigma_y^n} e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2} \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \mu_i)^2 - \frac{1}{2\sigma_y^2} \sum_{j=1}^n (y_{j1} - a - b\mu_j)^2}. \end{aligned}$$

Tento pokus m -krát nezávisle opakujeme. Tak r -tý pokus je modelovaný náhodným vektorom $(X_{1r}, Y_{1r}, \dots, X_{nr}, Y_{nr})'$.

Vierohodnostná funkcia celého kalibračného experimentu (pozostávajúceho z m pokusov) je

$$\begin{aligned} L(x_{11}, y_{11}, \dots, x_{nm}, y_{nm}; a, b, \sigma_x^2, \sigma_y^2, \mu_1, \dots, \mu_n) = \\ \frac{1}{(2\pi)^{nm} \sigma_x^{nm} \sigma_y^{nm}} e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - \mu_i)^2 - \frac{1}{2\sigma_y^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (y_{ij} - a - b\mu_i)^2}. \end{aligned}$$

ML odhady $\hat{a}(X_{11}, \dots, Y_{nm})$, $\hat{b}(X_{11}, \dots, Y_{nm})$, $\hat{\sigma}_x^2(X_{11}, \dots, Y_{nm})$, $\hat{\sigma}_y^2(X_{11}, \dots, Y_{nm})$, $\hat{\mu}_1(X_{11}, \dots, Y_{nm})$, \dots , $\hat{\mu}_n(X_{11}, \dots, Y_{nm})$ sú koreňmi vierohodnostných rovníc

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (Y_{ij} - \hat{a} - \hat{b}\hat{\mu}_i) = 0$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (Y_{ij} - \hat{a} - \hat{b}\hat{\mu}_i)\hat{\mu}_i &= 0 \\ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (X_{ij} - \hat{\mu}_i)^2 &= mn\hat{\sigma}_x^2 \\ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (Y_{ij} - \hat{a} - \hat{b}\hat{\mu}_i)^2 &= mn\hat{\sigma}_y^2 \\ \hat{\sigma}_y^2 \sum_{j=1}^m (X_{1j} - \hat{\mu}_1) &= -\hat{\sigma}_x^2 \hat{b} \sum_{j=1}^m (Y_{1j} - \hat{a} - \hat{b}\hat{\mu}_1) \\ &\vdots \\ \hat{\sigma}_y^2 \sum_{j=1}^m (X_{nj} - \hat{\mu}_n) &= -\hat{\sigma}_x^2 \hat{b} \sum_{j=1}^m (Y_{nj} - \hat{a} - \hat{b}\hat{\mu}_n). \end{aligned}$$

Platí

$$\sqrt{m} \begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{D}} N \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{\Sigma} \right).$$

Asymptotická kovariančná matica ML odhadu $(\hat{a}, \hat{b})'$ je

$$\mathbf{\Sigma} = \frac{b^2\sigma_x^2 + \sigma_y^2}{m \left(n \sum_{i=1}^n \mu_i^2 - \left(\sum_{j=1}^n \mu_j \right)^2 \right)} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \mu_i^2 & -\sum_{i=1}^n \mu_i \\ -\sum_{i=1}^n \mu_i & n \end{pmatrix}.$$

Použijeme približnú $\hat{\mathbf{\Sigma}}$

$$\hat{\mathbf{\Sigma}} = \frac{\hat{b}_{real}^2 \hat{\sigma}_{x,real}^2 + \hat{\sigma}_{y,real}^2}{m \left(n \sum_{i=1}^n \hat{\mu}_{i,real}^2 - \left(\sum_{j=1}^n \hat{\mu}_{j,real} \right)^2 \right)} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \hat{\mu}_{i,real}^2 & -\sum_{i=1}^n \hat{\mu}_{i,real} \\ -\sum_{i=1}^n \hat{\mu}_{i,real} & n \end{pmatrix}$$

a dostávame (aproximovanú, asymptotickú) $(1 - \alpha)$ -konfidenčnú oblasť pre $(a, b)'$

$$\mathcal{C}_{(1-\alpha)}^{ML} = \left\{ \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix}' \hat{\mathbf{\Sigma}}^{-1} \begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix} \leq \chi_2^2(1 - \alpha) \right\}$$

($\chi_2^2(1 - \alpha)$ je $(1 - \alpha)$ -kvantil χ^2 rozdelenia s 2 stupňami voľnosti).

Meranie pomocou kalibrovaného prístroja bude rovnaké ako u nasledujúceho modelu kalibrácie.

2.4 Kalibrácia pomocou replikovaného modelu regresie s chybami v premenných

Kalibráciu môžeme modelovať modelom regresie s chybami v premenných - EIV (errors in variables) model alebo measurement error model (pozri napr. [2])

$$Y_i = \alpha + \beta\mu_i + \varepsilon_i$$

$$X_i = \mu_i + \delta_i$$

($\varepsilon_i \sim N(0, \sigma_Y^2)$, $\delta_i \sim N(0, \sigma_X^2)$ nezávislé). Ináč zapísané

$$E(Y_i) = \alpha + \beta\mu_i$$

$$E(X_i) = \mu_i.$$

Nepredpokladáme, že μ_i poznáme, pozorujeme náhodné premenné X_i , ktorých stredné hodnoty sú μ_i .

Vektory bezchybných meraní prístrojmi A a B sú $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)'$ a $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n)'$. Vektor meraní prístrojom A je $\mathbf{X}_{n,1} \sim N(\boldsymbol{\mu}; \sigma_x^2 \mathbf{I}_{n,n})$. Vektor meraní prístrojom B je $\mathbf{Y}_{n,1} \sim N(\boldsymbol{\nu}; \sigma_y^2 \mathbf{I}_{n,n})$. Dostávame model

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} \sim N \left[\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu} \\ \boldsymbol{\nu} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_x^2 \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma_y^2 \mathbf{I} \end{pmatrix} \right] \quad (1)$$

s (nelineárnymi) podmienkami na parametre

$$\boldsymbol{\nu} = a\mathbf{1}_{n,1} + b\boldsymbol{\mu}, \quad (2)$$

kde $\mathbf{1}_{n,1} = (1, 1, \dots, 1)'$. Najprv linearizujeme model pomocou Taylorovho rozvoja v okolí $\boldsymbol{\mu}_0 = (\mu_{01}, \mu_{02}, \dots, \mu_{0n})'$ a b_0 (nejaké hodnoty blízke skutočnosti $\boldsymbol{\mu}$ a b). Teraz $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0 + \delta\boldsymbol{\mu}$, $b = b_0 + \delta b$ a nové parametre sú $\delta\boldsymbol{\mu} = (\delta\mu_1, \delta\mu_2, \dots, \delta\mu_n)'$, $\boldsymbol{\nu}$, a , δb , σ_x^2 , σ_y^2 .

Dostávame model

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_0 \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} \sim N \left[\begin{pmatrix} \delta\boldsymbol{\mu} \\ \boldsymbol{\nu} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_x^2 \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma_y^2 \mathbf{I} \end{pmatrix} \right] \quad (3)$$

s (linearizovanými) podmienkami

$$b_0\boldsymbol{\mu}_0 + (b_0\mathbf{I} - \mathbf{I}) \begin{pmatrix} \delta\boldsymbol{\mu} \\ \boldsymbol{\nu} \end{pmatrix} + (\mathbf{1}, \boldsymbol{\mu}_0) \begin{pmatrix} a \\ \delta b \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (4)$$

Experiment (3) opakujeme nezávisle m -krát. $\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_m$ je m nezávislých opakovaní náhodného vektora $\boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} \mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_0 \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix}$, $\underline{\boldsymbol{\xi}} = (\boldsymbol{\xi}'_1, \dots, \boldsymbol{\xi}'_m)' = (\mathbf{X}'_1 - \boldsymbol{\mu}'_0, \mathbf{Y}'_1, \dots, \mathbf{X}'_m - \boldsymbol{\mu}'_0, \mathbf{Y}'_m)'$ je teraz vektorom meraní.

Úplný (komplexný) model merania je

$$\underline{\xi} \sim N \left[(\mathbf{1}_{m,1} \otimes \mathbf{I}_{2n,2n}) \begin{pmatrix} \delta\boldsymbol{\mu} \\ \boldsymbol{\nu} \end{pmatrix}, \mathbf{I}_{m,m} \otimes (\sigma_x^2 \mathbf{V}_1 + \sigma_y^2 \mathbf{V}_2) \right], \quad (5)$$

s podmienkami (4), kde $\mathbf{V}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{n,n} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$, $\mathbf{V}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{n,n} \end{pmatrix}$ a \otimes znamená Kroneckerov súčin.

Dá sa ukázať (pozri [6]), že NNLO (najlepšie nevychýlené lineárne odhady) hodnôt $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0 + \delta\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\nu}$, a , δb v modeli (5) s podmienkami (4) sú

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \bar{\mathbf{X}} + \frac{b_0 \sigma_x^2}{b_0^2 \sigma_x^2 + \sigma_y^2} \mathbf{M}_{1,\mu_0} (\bar{\mathbf{Y}} - b_0 \bar{\mathbf{X}}), \quad (6)$$

$$\hat{\boldsymbol{\nu}} = \bar{\mathbf{Y}} - \frac{\sigma_y^2}{b_0^2 \sigma_x^2 + \sigma_y^2} \mathbf{M}_{1,\mu_0} (\bar{\mathbf{Y}} - b_0 \bar{\mathbf{X}}), \quad (7)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{\delta b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0 \\ \boldsymbol{\mu}'_0 \mathbf{1} & \boldsymbol{\mu}'_0 \boldsymbol{\mu}_0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{1}'(\bar{\mathbf{Y}} - b_0 \bar{\mathbf{X}}) \\ \boldsymbol{\mu}'_0(\bar{\mathbf{Y}} - b_0 \bar{\mathbf{X}}) \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Zodpovedajúce kovariančné matice odhadov sú

$$\begin{aligned} \text{cov}(\hat{\boldsymbol{\mu}}) &= \frac{\sigma_x^2}{m} \mathbf{I} - \frac{b_0^2 \sigma_x^4}{m(b_0^2 \sigma_x^2 + \sigma_y^2)} \mathbf{M}_{1,\mu_0}, & \text{cov}(\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\boldsymbol{\nu}}) &= \frac{b_0 \sigma_x^2 \sigma_y^2}{m(b_0^2 \sigma_x^2 + \sigma_y^2)} \mathbf{M}_{1,\mu_0}, \\ \text{cov}(\hat{\boldsymbol{\nu}}) &= \frac{\sigma_y^2}{m} \mathbf{I} - \frac{\sigma_y^4}{m(b_0^2 \sigma_x^2 + \sigma_y^2)} \mathbf{M}_{1,\mu_0}, \\ \text{cov} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{pmatrix} &= \frac{b_0^2 \sigma_x^2 + \sigma_y^2}{m} \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0 \\ \boldsymbol{\mu}'_0 \mathbf{1} & \boldsymbol{\mu}'_0 \boldsymbol{\mu}_0 \end{pmatrix}^{-1}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\text{cov} \left[\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\mu}} \\ \hat{\boldsymbol{\nu}} \end{pmatrix} \right] = -\frac{1}{m} \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0 \\ \boldsymbol{\mu}'_0 \mathbf{1} & \boldsymbol{\mu}'_0 \boldsymbol{\mu}_0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} b_0 \sigma_x^2 \mathbf{1}' & -\sigma_y^2 \mathbf{1}' \\ b_0 \sigma_x^2 \boldsymbol{\mu}'_0 & -\sigma_y^2 \boldsymbol{\mu}'_0 \end{pmatrix},$$

kde

$$\mathbf{M}_{1,\mu_0} = \mathbf{I}_{n,n} - (\mathbf{1}, \boldsymbol{\mu}_0) \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0 \\ \boldsymbol{\mu}'_0 \mathbf{1} & \boldsymbol{\mu}'_0 \boldsymbol{\mu}_0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{1}' \\ \boldsymbol{\mu}'_0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{b} = b_0 + \hat{\delta b} \text{ a } \bar{\mathbf{X}} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \mathbf{X}_j, \quad \bar{\mathbf{Y}} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \mathbf{Y}_j.$$

Ešte potrebujeme lokálny $(\sigma_{x_0}^2, \sigma_{y_0}^2)$ -MINQUE odhad hodnôt σ_x^2 a σ_y^2 a kovariančnú maticu tohto odhadu. Platí, že $(\sigma_{x_0}^2, \sigma_{y_0}^2)$ -MINQUE odhad vektora $(\sigma_x^2, \sigma_y^2)'$ je

$$\begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x^2 \\ \hat{\sigma}_y^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{n(m-1)} \left[\mathbf{I} - \frac{n-2}{(b_0^4 \sigma_{x_0}^4 + \sigma_{y_0}^4)(mn-2) + 2b_0^2 \sigma_{x_0}^2 \sigma_{y_0}^2 (m-1)n} \begin{pmatrix} b_0^4 \sigma_{x_0}^4 & b_0^2 \sigma_{x_0}^4 \\ b_0^2 \sigma_{y_0}^4 & \sigma_{y_0}^4 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \hat{\kappa}_1 \\ \hat{\kappa}_2 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\hat{\kappa}_1 = \sum_{j=1}^m (\mathbf{X}_j - \bar{\mathbf{X}})' (\mathbf{X}_j - \bar{\mathbf{X}}) + m(\bar{\mathbf{X}} - \hat{\boldsymbol{\mu}})' (\bar{\mathbf{X}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}),$$

$$\hat{\kappa}_2 = \sum_{j=1}^m (\mathbf{Y}_j - \bar{\mathbf{Y}})' (\mathbf{Y}_j - \bar{\mathbf{Y}}) + m(\bar{\mathbf{Y}} - \hat{\boldsymbol{\nu}})' (\bar{\mathbf{Y}} - \hat{\boldsymbol{\nu}}).$$

Kovariančná matrica uvažovaného odhadu je

$$\mathbf{W} = cov \left(\left(\begin{array}{c} \hat{\sigma}_x^2 \\ \hat{\sigma}_y^2 \end{array} \right) \middle| \sigma_{x0}^2, \sigma_{y0}^2 \right) = \frac{2}{n(m-1)} \begin{pmatrix} \sigma_{x0}^4 & 0 \\ 0 & \sigma_{y0}^4 \end{pmatrix} -$$

$$- \frac{2}{n(m-1)} \frac{n-2}{(b_0^4 \sigma_{x0}^4 + \sigma_{y0}^4)(mn-2) + 2b_0^2 \sigma_{x0}^2 \sigma_{y0}^2 (m-1)n} \times$$

$$\begin{pmatrix} b_0^4 \sigma_{x0}^4 & b_0^2 \sigma_{x0}^4 \\ b_0^2 \sigma_{y0}^4 & \sigma_{y0}^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{x0}^4 & 0 \\ 0 & \sigma_{y0}^4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix} \quad (11)$$

(pozri [6]). Odhad závisí od apriorných hodnôt $\boldsymbol{\mu}_0, b_0, \sigma_{x0}^2, \sigma_{y0}^2$. Keď vektor meraní je $(\mathbf{X}'_1, \mathbf{Y}'_1, \dots, \mathbf{X}'_m, \mathbf{Y}'_m)'$, kde $\mathbf{X}_i = (X_{1i}, \dots, X_{ni})'$, $\mathbf{Y}_i = (Y_{1i}, \dots, Y_{ni})'$, $i = 1, 2, \dots, m$, je prirodzené položiť

$$\boldsymbol{\mu}_0 = \bar{\mathbf{X}}, \quad b_0 = \frac{n\bar{\mathbf{X}}'\bar{\mathbf{Y}} - \mathbf{1}'\bar{\mathbf{X}}\mathbf{1}'\bar{\mathbf{Y}}}{n\bar{\mathbf{X}}'\bar{\mathbf{X}} - (\mathbf{1}'\bar{\mathbf{X}})^2},$$

$$\sigma_{x0}^2 = \frac{1}{n(m-1)} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (X_{ji} - \bar{X}_i)^2, \quad \sigma_{y0}^2 = \frac{1}{n(m-1)} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (Y_{ji} - \bar{Y}_i)^2.$$

Ďalej spočítame \hat{a}, \hat{b} z (8), $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ z (6), $\hat{\boldsymbol{\nu}}$ z (7), $\hat{\sigma}_{x0}^2$ a $\hat{\sigma}_{y0}^2$ z (10).

Ukázalo sa veľmi účinné urobiť niekoľko iterácií v tom zmysle, že získané hodnoty $\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{b}, \hat{\sigma}_x^2, \hat{\sigma}_y^2$ vezmeme ako (nové) počiatkové hodnoty $\boldsymbol{\mu}_0^{(1)}, b_0^{(1)}, (1)\sigma_{x0}^2, (1)\sigma_{y0}^2$ a $\boldsymbol{\mu}, b, \sigma_x^2, \sigma_y^2$ znovu odhadujeme. Po niekoľkých (u nás maximálne 7) iteráciách odhady „sa ustálili“ a získali sme (konečné hodnoty) $\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{b}, \hat{\sigma}_x^2, \hat{\sigma}_y^2$ (hodnoty $\boldsymbol{\mu}_0, b_0, \sigma_{x0}^2, \sigma_{y0}^2$ sú teraz „počiatkové hodnoty“ v „poslednej iterácii“).

2.4.1 Konfidenčná oblasť pre $(a, b)'$. Z (8) a (9) máme, že

$$\begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix} \sim N \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{b_0^2 \sigma_x^2 + \sigma_y^2}{m} \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0 \\ \boldsymbol{\mu}'_0 \mathbf{1} & \boldsymbol{\mu}'_0 \boldsymbol{\mu}_0 \end{pmatrix}^{-1} \right)$$

a pri označení $U_{n,2} = (\mathbf{1}; \boldsymbol{\mu}_0)$ vidíme, že

$$\Phi(\sigma_x^2, \sigma_y^2) = (\mathbf{U}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{U})^{-1} = \frac{b_0^2\sigma_x^2 + \sigma_y^2}{m} \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0 \\ \boldsymbol{\mu}_0'\mathbf{1} & \boldsymbol{\mu}_0'\boldsymbol{\mu}_0 \end{pmatrix}^{-1}$$

je kovariančná matica vektora $(\hat{a}, \hat{b})'$. Použijeme postup navrhnutý Kenwardom a Rogerom v [4], aby sme dostali štatistiku Waldovského typu a aproximáciu jej výberového rozdelenia F rozdelením. Tento postup bol navrhnutý pre „malé súbory“ (v našom prípade malé m, n). Kenward a Roger navrhli upravený odhad matice Φ v tvare

$$\hat{\Phi}_A = \hat{\Phi} - \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 w_{ij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \sigma_i^2 \partial \sigma_j^2},$$

kde $\hat{\Phi} = \Phi(\hat{\sigma}_x^2, \hat{\sigma}_y^2)$, $w_{ij} = \{\mathbf{W}\}_{ij}$ (\mathbf{W} je dané v (11)) a $\sigma_1^2 = \sigma_x^2, \sigma_2^2 = \sigma_y^2$. Po výpočte dostávame $\hat{\Phi}_A = \hat{\Phi}$. Modifikovaný odhad $\hat{\Phi}_A$ sa odporúča použiť v štatistike

$$F = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix}' \hat{\Phi}_A^{-1} \begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix}.$$

Podľa [4] aproximujeme F takým spôsobom, aby λF malo $F_{2,u}$ rozdelenie. Analogicky s postupom v [4] po zdlhavesších výpočtoch dostávame

$$\lambda = 1$$

a

$$u = (mn - 2) + \frac{2b_0^2\hat{\sigma}_x^2\hat{\sigma}_y^2(m-1)n}{b_0^4\hat{\sigma}_x^4 + \hat{\sigma}_y^4}. \quad (12)$$

Teda $\mathcal{C}_{(1-\alpha)}$:

$$\left\{ \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} : \frac{m}{2(b_0^2\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2)} \begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix}' \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0 \\ \boldsymbol{\mu}_0'\mathbf{1} & \boldsymbol{\mu}_0'\boldsymbol{\mu}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a} - a \\ \hat{b} - b \end{pmatrix} \leq F_{2,u}(1-\alpha) \right\} \quad (13)$$

($F_{t,u}(1-\alpha)$ je $(1-\alpha)$ -kvantil $F_{t,u}$ rozdelenia) je $(1-\alpha)$ -konfidenčná oblasť pre $(a, b)'$.

2.4.2 Simulácie. Model (1) s podmienkami na parametre (2) sme simulovali v [9] a [10] s nasledovnými hodnotami parametrov

- $\sigma_y^2 = 1$ a $\sigma_x^2 \in \{0,001; 0,01; 0,1; 1\}$
- pre každé $n \in \{3; 5; 10\}$ sme použili $\boldsymbol{\mu} = (1, 3, 5, \dots, 2n-1)'$
- pre $a = 0$ a $b \in \{\sqrt{1000}; 10; \sqrt{10}; 1; \frac{1}{2}\}$ sme spočítali $\boldsymbol{\nu} = a\mathbf{1}_{n,1} + \boldsymbol{\mu}$ okrem jednej hodnoty $b = \frac{1}{2}$ sme volili b tak, aby v kombinácii s príslušnými σ_x^2 a σ_y^2 platilo $b^2\sigma_x^2 = \sigma_y^2$
- nezávislé merania boli replikované $m \in \{2, 5, 20\}$ krát.

Pre každú kombináciu parametrov sa generovalo $N = 10\,000$ realizácií vektora (5) a pre spočítané u podľa (12) sa zitalo, či hodnoty (a, b) pri ktorých sa meranie simulovalo padli do (13) (pre $\alpha = 0.05$).

Záveru zo simulácií:

Pre počet objektov merania $n > 3$ sa líši teoretické percento pokrytia a empirické o menej ako 1% vo všetkých uvažovaných situáciách (aj v prípadoch, keď počet opakovaní je minimálny t.j. pre $m = 2$). V každom prípade treba linearizovať s niekoľkými iteráciami. Ich počet však neprekročil 7 (pozri [10]). Pomocou simulácií sa v [10] porovnávali relatívna frekvencia pokrytia a priemerné šírky 0.95-konfidenčných intervalov pre budúce meranie u postupu uvedeného v 2.4 a u Eisenhartovho [3] resp. Krutchkoffovho [5] postupu. Postup uvedený v 2.4 sa ukazuje ako najvhodnejší.

2.4.3 Konfidenčná oblasť pre celú kalibračnú priamku. Pretože oblasť $\mathcal{C}_{(1-\alpha)}$ pokrýva $(a, b)'$ s pravdepodobnosťou $1 - \alpha$, dostávame, že pre každé μ

$$P \left\{ \left| (\hat{a} + \hat{b}\mu) - (a + b\mu) \right| \leq \sqrt{2F_{2,u}(1-\alpha) \frac{b_0\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2}{m} \left(\frac{1}{n} + \frac{(\mu - \mu_0)^2}{\boldsymbol{\mu}'_0\boldsymbol{\mu}_0 - (\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0)^2/n} \right)} \right\} = 1 - \alpha.$$

(pozri [11]).

2.4.4 Mnohonásobné meranie kalibrovaným prístrojom. Po uskutočnení kalibračného experimentu, ktorý teoreticky modelujeme replikovaným modelom regresie s chybami v premenných, sme dostali $n, m, \hat{a}_{(real)}, \hat{b}_{(real)}, b_0, \boldsymbol{\mu}_0, \hat{\sigma}_{x,real}^2, \hat{\sigma}_{y,real}^2$ a \mathbf{W} . Na os x v tomto prípade zobrazujeme merania menej presným prístrojom a kalibračná priamka je $\nu = a + b\mu$ (upozorňujeme len, že v tomto modeli kalibrácie sú oba prístroje z matematickej stránky „rovnocenné“). V článku [10] je ukázané, že pri nameranej hodnote x (kalibrovaným prístrojom) je $\langle \nu_{xl}, \nu_{xu} \rangle$ konfidenčný interval pre $\nu_x = a + b\mu_x$ s hladinou približne $1 - \alpha$, kde

$$\nu_{xl} = \hat{a} + \hat{b}x - t_u \left(1 - \frac{\alpha}{2} \right) \sqrt{\frac{b_0\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2}{m} \left(\frac{1}{n} + \frac{(\mu - \mu_0)^2}{\boldsymbol{\mu}'_0\boldsymbol{\mu}_0 - (\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0)^2/n} \right)} + \hat{b}^2\hat{\sigma}_x^2,$$

$$\nu_{xu} = \hat{a} + \hat{b}x + t_u \left(1 - \frac{\alpha}{2} \right) \sqrt{\frac{b_0\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2}{m} \left(\frac{1}{n} + \frac{(\mu - \mu_0)^2}{\boldsymbol{\mu}'_0\boldsymbol{\mu}_0 - (\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_0)^2/n} \right)} + \hat{b}^2\hat{\sigma}_x^2.$$

3 Ďalšie výskumy

1. Kalibračná funkcia je polynóm (odhady koeficientov, testy).

2. ML odhady porovnať s odhadmi v modeli s chybami v premenných.
3. V ML modeli ako aj v modeli s chybami v premenných nerovnako opakovať merania v jednotlivých bodoch pri kalibrácii prístroja.
4. V ML modeli neopakovať merania v každom bode, ale zväčšovať počet rôznych meraní pri kalibrácii prístroja (iný typ asymptotiky).
5. Kedy v linearizovanom modeli s chybami v premenných stochastické aproximácie konvergujú (a ako).
6. Kalibrácia medzi viacdimenzionálnymi meraniami objektov (lineárna aj nelineárna).
7. Súvis spomenutých kalibračných postupov s inými (napr. s bayesovským postupom).
8. V modeli uvažovať neistoty typu B, t.j. $\text{cov}X = \sigma_x^2 \mathbf{I} + \Sigma_x$, $\text{cov}Y = \sigma_y^2 \mathbf{I} + \Sigma_y$, kde Σ_x a Σ_y sú dané známe matice.

Reference

- [1] Brown P.J. (1993). *Measurement, regression, and calibration*. Clarendon Press, Oxford.
- [2] Casella G., Berger R.L. (1990). *Statistical inference*. Duxbury Advanced Series, Second Edition, Belmont CA.
- [3] Eisenhart C. (1939). *The interpretation of certain regression methods and their use in biological and industrial research*. Annals of Mathematical Statistics **10**, 162–186.
- [4] Kenward M.G., Roger J.H. (1997). *Small sample inference for fixed effects from restricted maximum likelihood*. Biometrics **53**, 983–997.
- [5] Krutchkoff R.G. (1967). *Classical and inverse methods of calibration*. Technometrics **9**, 425–439.
- [6] Kubáček L., Kubáčková L. (2000). *Statistika a metrologie*. Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc.
- [7] Osborne C. (1991). *Statistical calibration: a review*. International Statistical Review **59**, 309–336.
- [8] Shukla G.K. (1972). *On the problem of calibration*. Technometrics **14**, 547–553.
- [9] Wimmer G., Witkovský V., Savin A. (2004). *Confidence region for parameters in replicated errors in variables model*. V: COMPSTAT, Proceedings in Computational Statistics, 16th Symposium held in Prague, Antoch J. (ed.), Physica-Verlag, 1987–1994.
- [10] Wimmer G., Witkovský V. (2006). *Univariate linear calibration via replicated errors-in-variables model* (v tlači).
- [11] Wimmer G., Witkovský V. (2006). *Scheffé-type confidence region for the calibration line* (v tlači).

Podakovanie: Práca bola podporená grantom VEGA, 1/3016/06 a projektom MŠMT ČR číslo LC06024.

Adresa: G. Wimmer, PF MU, Brno; FPV UMB, Banská Bystrica; MÚ SAV
Bratislava

E-mail: `wimmer@mat.savba.sk`

ANALÝZA DÁT POMOCOU LINEÁRNEHO ZMIEŠANÉHO MODELU

Viktor Witkovský

Kľúčové slová: ANOVA a lineárny zmiešaný model, Hendersonové rovnice, REML, metóda Kenwarda a Rogera, medzilaboratórne porovnávacie pokusy.

Abstrakt: Cieľom príspevku je stručný prehľad niektorých základných metód štatistickej inferencie v klasickom lineárnom zmiešanom modeli. Podrobnejšie je tu popísaná metóda Kenwarda a Rogera na konštrukciu približných konfidenčných intervalov pre lineárnu funkciu pevných efektov. Ako ilustráciu uvádzame konštrukciu konfidenčného intervalu pre parameter CRV (Comparison Reference Value) v medzilaboratórnych porovnávacích pokusoch.

1 Úvod

Lineárny zmiešaný model (LMM - Linear Mixed Model) vznikol ako zovšeobecnenie modelov analýzy rozptylu (ANOVA modely), pozri napr. [15]. Sú to štrukturované modely, ktoré vysvetľujú variabilitu pozorovanej veličiny len pomocou prirodzenej a ľahko interpretovateľnej organizácie do hierarchickej štruktúry. Lineárny zmiešaný model možno chápať aj ako špeciálny prípad všeobecného lineárneho modelu, teda lineárneho regresného modelu so zložitou kovariančnou maticou, ktorá je závislá od parametrov (variančných a kovariančných komponentov).

Výhodou lineárneho zmiešaného modelu oproti všeobecnému lineárnemu modelu je samotná štruktúra modelu, v ktorej explicitne vystupujú okrem parametrov prvého rádu, *pevných efektov*, aj *náhodné efekty*. Náhodné efekty sú charakterizované svojou distribúciou závisiacou od parametrov druhého rádu (variančných a kovariančných komponentov). Štruktúra modelu umožňuje prirodzene definovať tvar kovariančnej matice. Okrem odhadov a testov o parametroch prvého rádu LMM umožňuje predikovať náhodné efekty. Lineárny zmiešaný model presahuje možnosti klasických ANOVA modelov. Pokrýva modely ANCOVA (modely analýzy kovariancie), modely s náhodnými koeficientami, modely rastových kriviek, atď. Analýza dát pomocou LMM je úspešne implementovaná najmä v softwarových balíkoch SAS a S-plus, viac podrobnosti možno nájsť v knihách [11] a [12].

2 Lineárny zmiešaný model (LMM)

Pevné a náhodné efekty sú pojmy typické pre ANOVA modely. Štruktúra ANOVA modelu obsahuje faktory (hlavé resp. špeciálne) a interakcie. Hlavné faktory sa ďalej delia na krížové a vnorené, pod pojmom špeciálny faktor rozumieme všeobecný priemer resp. všeobecnú chybu merania. Interakcie vznikajú kombináciou hlavných faktorov.

Každý faktor má niekoľko úrovní (faktor v LMM je klasifikačná premenná s konečným počtom úrovní). Vo vyvážených ANOVA modeloch je počet úrovní každého faktora rovnaký pre každý nadradený faktor. Faktor sa prejavuje na jednotlivých úrovniach svojimi efektami, ktoré možno reprezentovať ako pevné (nenáhodné) resp. náhodné (realizácie náhodných premenných): Efekt faktora nazývame pevným, ak úrovne faktora zahrnuté do modelu reprezentujú jeho všetky možné úrovne. Efekt faktora nazývame náhodným, ak úrovne faktora, ktoré boli zahrnuté do modelu reprezentujú len náhodný výber z väčšej množiny potenciálnych úrovní daného faktora. Lineárny zmiešaný model však môže obsahovať okrem faktorov aj iné vysvetľujúce premenné, ktorých vplyv je určený koeficientami modelu, ktoré môžu byť reprezentované pomocou ďalších nenáhodných alebo náhodných premenných (koeficientov). Lineárny zmiešaný model možno zapísať v tvare:

$$y = X\beta + Zu + \varepsilon = \sum_{i=1}^f X_i\beta_i + \sum_{j=1}^r Z_j u_j + \varepsilon, \quad (1)$$

kde $X = [X_1 : X_2 : \dots : X_f]$, $Z = [Z_1 : Z_2 : \dots : Z_r]$, $\beta = (\beta'_1, \beta'_2, \dots, \beta'_f)'$, $u = (u'_1, u'_2, \dots, u'_r)'$.

- X a Z reprezentujú matice plánu pre pevné resp. náhodné efekty. Matice X_i , Z_j , zodpovedajúce jednotlivým faktorom resp. interakciám zahrnutým v LMM možno reprezentovať ako matice s prvkami 0 a 1. Niektoré z matíc X_i resp. Z_j môžu zodpovedať ďalším vysvetľujúcim premenným zahrnutým v LMM.
- β_i , pevné efekty, reprezentujú hodnoty efektov všetkých úrovní faktora $i = 1, \dots, f$, (nenáhodné regresné koeficienty).
- u_j , náhodné efekty, reprezentujú hodnoty efektov jednotlivých náhodne vybraných úrovní faktora $j = 1, \dots, r$, (náhodné regresné koeficienty), pričom $E(u) = 0$ a $Cov(u) = D$.
- ε , všeobecná chyba merania, pričom $E(\varepsilon) = 0$ a $Cov(\varepsilon) = R$, ktorá je nekorelovaná s vektorom náhodných efektov u , teda $Cov(u, \varepsilon) = 0$.
- V modeli (1) budeme často navyše predpokladať združenú normalitu rozdelenia vektorov u a ε , pričom $u \sim \mathcal{N}(0, D)$ a $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, R)$ sú navzájom nezávislé.

Špeciálnym prípadom modelu (1) je tradičný LMM s jednoduchými náhodnými efektami, kde za predpokladu združenej normality vektorov u_i a ε platí:

$$\begin{aligned} u_i &\sim \mathcal{N}(0, \sigma_i^2 I), \\ \varepsilon &\sim \mathcal{N}(0, \sigma_{r+1}^2 I) \\ Cov(u_i, u_j) &= 0, \quad i \neq j, \quad Cov(u_i, \varepsilon) = 0 \quad \text{pre všetky } i. \end{aligned}$$

Teda,

$$E(y) = X\beta,$$

$$\text{Var}(y) = ZDZ' + R = \sum_{i=1}^r Z_i(\sigma_i^2 I)Z_i' + \sigma_{r+1}^2 I = \sum_{i=1}^{r+1} \sigma_i^2 V_i = V(\vartheta),$$

kde $V_i = Z_i Z_i'$, pre $i = 1, \dots, r$, a $V_{r+1} = I_{n,n}$ a $\vartheta = (\sigma_1^2, \dots, \sigma_{r+1}^2)$ je vektor variančných komponentov, $\sigma_i^2 \geq 0$, $i = 1, \dots, r$, a $\sigma_{r+1}^2 > 0$. Medzi základné problémy štatistickej inferencie v týchto modeloch patrí:

- Odhadovanie lineárnej funkcie pevných efektov $K'\beta$, ktorá spĺňa podmienky nevychýlenej odhadnuteľnosti, teda $K \in \mathcal{R}(X')$, vrátane určenia štandardných chýb (v metrológii označovaných ako neistoty) týchto odhadov.
- Predikovanie lineárnej funkcie pevných a náhodných efektov $K'\beta + L'u$, vrátane určenia štandardných chýb týchto prediktorov.
- Testovanie a konštrukcia konfidenčných intervalov (oblastí) pre pevné efekty.
- Odhadovanie variančných komponentov ϑ , vrátane určenia štandardných chýb týchto odhadov.
- Testovanie hypotéz a konštrukcia konfidenčných intervalov (oblastí) pre variančné komponenty.

V prípade, že $V(\vartheta)$ je známa matica, štatistická inferencia o pevných a náhodných efektoch je založená na optimálnych nevychýlených lineárnych odhadoch pevných efektov (BLUE) a lineárnych a nevychýlených prediktoroch náhodných efektov (BLUP). Ak $V(\vartheta)$ je neznáma, je potrebné najskôr variančné komponenty ϑ odhadnúť a potom odhadovať a predikovať funkcie pevných a náhodných efektov. Vo vyvážených ANOVA modeloch sú známe ANOVA-odhady variančných komponentov. Ich zovšeobecnenie v LMM vedie k metódam kvadratického odhadovania, MINQE – Minimum Norm Quadratic Estimator, pozri [13], a k metódam založeným na princípe maximalizácie vierohodnosti, ML, REML, pozri napr. [5], [16].

Vlastnosti týchto odhadov sú známe len v špeciálnych prípadoch a vo všeobecnosti známe sú len asymptotické vlastnosti. Hľadajú sa aproximačné metódy na testovanie a konštrukciu konfidenčných oblastí pre variančné komponenty. Nahradením neznámych variančných komponentov ich odhadmi sa optimálne odhady (BLUE) a prediktory (BLUP) zmenia na empirické odhady (EBLUE) a prediktory (EBLUP). Štatistické vlastnosti empirických odhadov a prediktorov sú vo všeobecnosti neznáme. Aproximačné teórie umožňujú odvodit testy a konštruovať konfidenčné oblasti, ktoré aspoň približne spĺňajú požadované štatistické vlastnosti, pozri napr. [7], [6], [4], [8] a tiež [17].

Príklad.

Dáta uvedené v tabuľke 1 pochádzajú z experimentu vo výrobnom podniku, kde výrobné linky (L) boli považované za faktor s pevnými efektami a operátori (O) boli považovaní za faktor s náhodnými efektami. Matematický model experimentu je:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \varepsilon_{(ij)k},$$

Linky/Operátori	1	2	3
1	51.43	50.93	50.47
	51.28	50.75	50.83
2	51.91	52.26	51.58
	52.43	52.33	51.23

Tabuľka 1: Analýza výkonnosti výrobných liniek, [11].

$i = 1, 2, j = 1, \dots, 3, k = 1, 2$, pričom možno predpokladať

$$\beta_j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{(O)}^2), \quad \gamma_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{(OL)}^2), \quad \varepsilon_{(ij)k} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon}^2).$$

Na ilustráciu uvedieme príklady dôležitých funkcií pevných a náhodných efektov. Budeme sa zaujímať o produktivitu výrobnéj linky číslo 1:

- $f_1 = \mu + \alpha_1$.

Odhad tejto funkcie použijeme v situácii, keď predpokladáme, že na linke budú pracovať v budúcnosti operátori z rovnakej populácie operátorov, ako tí, ktorí sa zúčastnili experimentu. Takýto spôsob štatistickej inferencie chápame ako inferenciu v širokom zmysle.

- $f_2 = \mu + \alpha_1 + (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)/3 + (\gamma_{11} + \gamma_{12} + \gamma_{13})/3$

Odhad tejto funkcie použijeme v situácii, keď predpokladáme, že na linke budú pracovať v budúcnosti tí istí operátori, ako tí, ktorí sa zúčastnili experimentu. Takýto spôsob štatistickej inferencie chápame ako inferenciu v úzkom zmysle.

- $f_3 = \mu + \alpha_1 + (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)/3$

Odhad tejto funkcie použijeme v situácii, keď predpokladáme, že na linke budú pracovať v budúcnosti tí istí operátori, ako tí, ktorí sa zúčastnili experimentu, ale ich interakcia s výrobnou linkou môže nadobúdať ľubovoľné hodnoty z danej populácie interakcií. Takýto spôsob štatistickej inferencie chápame ako inferenciu v strednom zmysle a je niekde na rozhraní medzi inferenciou v širokom a úzkom zmysle.

3 Metódy štatistickej inferencie v LMM

V tejto časti budeme uvažovať model (1) za predpokladu združenej normality rozdelenia vektora náhodných efektov u a vektora chýb ε .

3.1 Známe komponenty variancie

Kritérium optimality pre prediktor je založený na minimalizácii strednej kvadratickej chyby (MSE – Mean Square Error) $MSE(\tilde{w} - w) = E[(\tilde{w} - w)' A(\tilde{w} - w)]$, kde A je ľubovoľná pozitívne definitná matica, napr. $A = I$.

Najlepší lineárny nevychýlený prediktor (BLUP – Best Linear Unbiased Predictor) funkcie $w = K'\beta + L'u$, pričom $K'\beta$ je nevychýlene odhadnuteľná funkcia parametra β , je

$$\begin{aligned} BLUP(w) &= \underset{\tilde{w}=a+By, E(\tilde{w}-w)=0}{\operatorname{argmin}} \operatorname{MSE}(\tilde{w} - w) \\ BLUP(w) &= BLUE(K'\beta) + L' \operatorname{Cov}(u, y) (\operatorname{Var}(y))^{-1} (y - BLUE(X\beta)) \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} \operatorname{Cov}(u, y) &= DZ' \\ \operatorname{Var}(y) &= V = ZDZ' + R \\ BLUE(K'\beta) &= K'(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}y, \\ BLUE(X\beta) &= X(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}y. \end{aligned}$$

Hendersonové rovnice zmiešaného modelu (MME – Mixed Model Equations), pozri Henderson *et al.* (1959), umožňujú súčasný výpočet $BLUE(K'\beta)$, $BLUP(u)$, resp. $BLUP(K'\beta + L'u)$ v lineárnom zmiešanom modeli (1), $y = X\beta + Zu + \varepsilon$, pričom $u \sim N(0, D)$, $\varepsilon \sim N(0, R)$, $\operatorname{Cov}(u, \varepsilon) = 0$ a združená hustota vektora $(y', u)'$ je

$$\begin{aligned} f(y, u) &= f(y|u)f(u) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{N/2}|R|^{1/2}} \left\{ -\frac{1}{2}(y - X\beta - Zu)'R^{-1}(y - X\beta - Zu) \right\} \\ &\times \frac{1}{(2\pi)^{q/2}|D|^{1/2}} \left\{ -\frac{1}{2}u'D^{-1}u \right\}. \end{aligned}$$

Riešením ML rovníc

$$\frac{\partial f(y, u)}{\partial \beta} = 0, \quad \frac{\partial f(y, u)}{\partial u} = 0$$

dostávame MME:

$$\begin{pmatrix} X'R^{-1}X & X'R^{-1}ZD \\ Z'R^{-1}X & W^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\beta} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X'R^{-1}y \\ Z'R^{-1}y \end{pmatrix}, \quad (2)$$

kde $W = (I + Z'R^{-1}ZD)^{-1}$. Nech $\tilde{\beta}$, $\tilde{u} = D\tilde{v}$ označuje nejaké riešenie MME rovníc, potom

$$\begin{aligned} BLUE(K'\beta) &= K'\tilde{\beta}, \\ BLUP(K'\beta + L'u) &= K'\tilde{\beta} + L'\tilde{u}. \end{aligned}$$

Označme

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X'R^{-1}X & X'R^{-1}ZD \\ Z'R^{-1}X & W^{-1} \end{pmatrix}^{-1}, \quad (3)$$

pričom A^{-} označuje ľubovoľnú zovšeobecnenú inverziu matice A . Potom platia tieto vlastnosti, pozri tiež [11]:

- V triede lineárnych nevychýlených prediktorov $BLUP(u) = \tilde{u}$ maximalizuje koreláciu medzi u a \tilde{u} .
- $E(u|\tilde{u}) = \tilde{u}$.
- \tilde{u} je daný jednoznačne.
- $Var(K'\tilde{\beta}) = K'C_{11}K = K'(X'V(\vartheta)X)^-K$.
- $Var(K'\tilde{\beta} + L'\tilde{u}) = K'C_{11}K + L'(D - C_{22})L$.
- $Var((K'\tilde{\beta} + L'\tilde{u}) - (K'\beta + L'u)) = [K' : L']C[K' : L']'$.
- $Cov(K'\tilde{\beta}, \tilde{u}') = 0$.
- $Cov(K'\tilde{\beta}, u') = -K'C_{12}$.
- $Cov(K'\tilde{\beta}, u' - \tilde{u}') = -K'C_{12}$.
- $Var(\tilde{u}) = Cov(\tilde{u}, u') = D - C_{22}$.
- $Var(\tilde{u} - u) = C_{22}$.

Odtiaľ, rozdelenie najlepšieho lineárneho nevychýleného prediktora funkcie $K'\beta + L'u$, resp. predikčnej chyby, je dané vzťahom

$$\left(BLUP(K'\beta + L'u) - (K'\beta + L'u) \right) \sim \mathcal{N}(0, [K' : L']C[K' : L']'), \quad (4)$$

a špeciálne, rozdelenie najlepšieho lineárneho nevychýleného odhadu funkcie $K'\beta$ je

$$\left(BLUE(K'\beta) - K'\beta \right) \sim \mathcal{N}(0, K'C_{11}K). \quad (5)$$

Napríklad, ak testujeme hypotézu $H_0 : K'\beta = K'\beta_*$, potom, za platnosti H_0 , má testovacia štatistika

$$W = \left(BLUE(K'\beta) - K'\beta \right)' \left(K'C_{11}K \right)^- \left(BLUE(K'\beta) - K'\beta \right) \sim \chi_{rank(\Sigma)}^2$$

rozdelenie chi-kvadrát s počtom stupňov voľnosti rovným hodnosti kovariančnej matice $\Sigma = K'C_{11}K$.

3.2 Odhady neznámych komponentov variancie

V prípade LMM s jednoduchými náhodnými efektami možno Hendersonové MME rovnice využiť priamo aj na odhad variančných komponentov (metódou ML resp. REML) a tiež na výpočet Fisherovej informačnej matice pre tieto odhady, podrobnosti pozri v [16]. Navyše takto možno vypočítať aj odhady MINQE, pozri [19].

V LMM s jednoduchými náhodnými efektami platí, že $Var(u) = D_{q \times q} = \text{diag}(\sigma_i^2 I_{q_i})$, $i = 1, \dots, r$, $q = \sum q_i$ a $Var(y) = ZDZ' + R$, pričom $Var(\varepsilon) = R_{N \times N} = \sigma_\varepsilon^2 I_N$. Označme $V = \sigma_{r+1}^2 I + Z'ZD$ a $W = \sigma_{r+1}^2 V^{-1}$.

V každom kroku iteračnej procedúry na výpočet ML odhadov označíme $V^{(k)} = \sigma_{r+1}^{2(k)} I_m + Z'ZD^{(k)}$, $D^{(k)} = \text{diag}(\sigma_i^{2(k)} I_{m_i})$.

Iteračný algoritmus začína voľbou $\vartheta^{(0)} = (\sigma_1^{2(0)}, \dots, \sigma_{r+1}^{2(0)})'$, počiatocných hodnôt variančných komponentov, a nastavením indikátora iterácii na hodnotu $k = 0$.

Potom v (k)-tom kroku iteračnej procedúry budeme riešiť systém rovníc:

$$\begin{pmatrix} X'X & X'ZD^{(k)} \\ Z'X & V^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\beta}^{(k)} \\ \tilde{\nu}^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X'y \\ Z'y \end{pmatrix},$$

and $\tilde{u}^{(k)} = D^{(k)}\tilde{\nu}^{(k)}$.

ML odhady variančných komponentov sú počítané iteračne

$$\begin{aligned} \sigma_i^{2(k+1)} &= \frac{\tilde{u}_i^{(k)'} \tilde{u}_i^{(k)}}{m_i - \text{tr}(W_{ii}^{(k)})}, \quad i = 1, \dots, r, \\ \sigma_{r+1}^{2(k+1)} &= \frac{y'(y - X\tilde{\beta}^{(k)} - Z\tilde{u}^{(k)})}{n}, \end{aligned} \quad (6)$$

kde $\tilde{u}_i^{(k)}$ je i -ty m_i -rozmerný subvektor vektora $\tilde{u}^{(k)}$ a $W_{ii}^{(k)}$ je i -ty diagonálny blok matice $W^{(k)}$, kde

$$W^{(k)} = \sigma_{r+1}^{2(k)} V^{(k)-1} = \sigma_{r+1}^{2(k)} \left(\sigma_{r+1}^{2(k)} I_m + Z'ZD^{(k)} \right)^{-1}.$$

Podobne, REML odhady variančných komponentov možno vypočítať iteračne

$$\begin{aligned} \sigma_i^{2(k+1)} &= \frac{\tilde{u}_i^{(k)'} \tilde{u}_i^{(k)}}{m_i - \text{tr}(T_{ii}^{(k)})}, \quad i = 1, \dots, r, \\ \sigma_{r+1}^{2(k+1)} &= \frac{y'(y - X\tilde{\beta}^{(k)} - Z\tilde{u}^{(k)})}{n - r_X}, \end{aligned} \quad (7)$$

kde r_X označuje hodnosť matice X , $\tilde{u}_i^{(k)}$ je i -ty m_i -rozmerný subvektor vektora $\tilde{u}^{(k)}$ a $T_{ii}^{(k)}$ je i -ty diagonálny blok matice $T^{(k)}$, kde

$$T^{(k)} = \sigma_{r+1}^{2(k)} \left(\sigma_{r+1}^{2(k)} I_m + Z'MZD^{(k)} \right)^{-1},$$

pričom $M = I_n - X(X'X)^{-1}X'$.

Tento iteračný algoritmus možno ukončiť pokiaľ konverguje a dosiahol predpísanú presnosť, v takom prípade takýto odhad označíme $\tilde{\vartheta} = ML(\vartheta)$, resp. $\tilde{\vartheta} = REML(\vartheta)$.

Odhad Fisherovej informačnej matice $I_{ML}(\vartheta)$, (ktorá je inverziou asymptotickej kovariančnej matice ML odhadov variančných komponentov), je

$$\tilde{I}_{ML}(\tilde{\vartheta}) = \frac{1}{2} \times$$

$$\left(\begin{array}{c} \left\{ \frac{\delta_{ij}[m_i - 2 \operatorname{tr}(\tilde{W}_{ii})] + \operatorname{tr}(\tilde{W}_{ij}\tilde{W}_{ji})}{\tilde{\sigma}_i^2 \tilde{\sigma}_j^2} \right\}_{i,j=1}^r \\ \left\{ \frac{\operatorname{tr}(\tilde{W}_{ii}) - \sum_j^r \operatorname{tr}(\tilde{W}_{ij}\tilde{W}_{ji})}{\tilde{\sigma}_i^2 \tilde{\sigma}_{r+1}^2} \right\}_{i=1}^r \\ \left\{ \frac{n-m + \operatorname{tr}(\tilde{W}^2)}{\tilde{\sigma}_{r+1}^4} \right\} \end{array} \right),$$

kde $\delta_{ij} = 1$ ak $i = j$, inak $\delta_{ij} = 0$, a \tilde{W}_{ij} je $(m_i \times m_j)$ -ty blok matice \tilde{W} .

Odhad Fisherovej informačnej matice $I_{REML}(\vartheta)$, (inverzia asymptotickej kovariančnej matice REML odhadov variančných komponentov), je

$$\tilde{I}_{REML}(\tilde{\vartheta}) = \frac{1}{2} \times \left(\begin{array}{c} \left\{ \frac{\delta_{ij}[m_i - 2 \operatorname{tr}(\tilde{T}_{ii})] + \operatorname{tr}(\tilde{T}_{ij}\tilde{T}_{ji})}{\tilde{\sigma}_i^2 \tilde{\sigma}_j^2} \right\}_{i,j=1}^r \\ \left\{ \frac{\operatorname{tr}(\tilde{T}_{ii}) - \sum_j^r \operatorname{tr}(\tilde{T}_{ij}\tilde{T}_{ji})}{\tilde{\sigma}_i^2 \tilde{\sigma}_{r+1}^2} \right\}_{i=1}^r \\ \left\{ \frac{n-r_X - m + \operatorname{tr}(\tilde{T}^2)}{\tilde{\sigma}_{r+1}^4} \right\} \end{array} \right),$$

kde $\delta_{ij} = 1$ ak $i = j$, inak $\delta_{ij} = 0$, a \tilde{T}_{ij} je $(m_i \times m_j)$ -ty blok matice \tilde{T} .

Tento algoritmus možno využiť na výpočet MINQE odhadov variančných komponentov pre dané apriórne hodnoty $\vartheta^{(0)} = (\sigma_1^{2(0)}, \dots, \sigma_{r+1}^{2(0)})'$.

MINQE odhad vektora variančných komponentov ϑ počítané pre apriórny bod $\vartheta^{(0)}$ je definovaný ako riešenie lineárnych rovníc

$$H\tilde{\vartheta} = q, \quad (8)$$

kde kritériálnu maticu H pre MINQEI odhad (MINQE invariantný na posun v strednej hodnote vektora y), $H_{(I)}$, možno vypočítať pomocou uvedeného algoritmu ako

$$H_{(I)} = 2I_{ML}(\vartheta^{(0)}),$$

a kritériálnu maticu H pre MINQEU odhad (nevychýlený odhad typu MINQE invariantný na posun v strednej hodnote vektora y), $H_{(UI)}$, možno vypočítať pomocou uvedeného algoritmu ako

$$H_{(UI)} = 2I_{REML}(\vartheta^{(0)}).$$

Vektor MINQE kvadratických foriem q možno vypočítať pomocou uvedeného algoritmu ako

$$\begin{aligned} q_i &= \frac{\tilde{u}_i^{(0)'} \tilde{u}_i^{(0)}}{(\sigma_i^{2(0)})^2}, \quad i = 1, \dots, r, \\ q_{r+1} &= \frac{(y - X\tilde{\beta}^{(0)} - Z\tilde{u}^{(0)})'(y - X\tilde{\beta}^{(0)} - Z\tilde{u}^{(0)})}{(\sigma_{r+1}^{2(0)})^2}, \end{aligned} \quad (9)$$

kde $\tilde{u}_i^{(0)}$ je i -ty m_i -rozmerný subvektor vektora $\tilde{u}^{(0)}$.

Uvedený MATLAB algoritmus `mixed.m` možno nájsť na adrese <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange>.

V prípade, že $\vartheta = (\sigma_1^2, \dots, \sigma_{r+1}^2)'$ je vnútorný bod parametrického priestoru pre veľké rozsahy N vektora y platí, že distribúciu REML odhadov môžeme aproximovať rozdelením

$$\left(REML(\vartheta) - \vartheta \right) \overset{asympt.}{\sim} \mathcal{N}\left(0, \tilde{I}_{REML}^{-1}(\tilde{\vartheta})\right) \quad (10)$$

Tento výsledok umožňuje testovať hypotézy a konštruovať konfidenčné intervaly (oblasti) pre variančné komponenty. Uvedené rozdelenie je platné len pre veľké rozsahy vektora y a navyše samotná Fisherová informačná matica je závislá od neznámych variančných komponentov. Predmetom súčasného výskumu je hľadať exaktné rozdelenie testovacích štatistík v špeciálnych situáciách (napr. model s dvomi variančnými komponentami) alebo hľadanie vhodných aproximácií pre malé rozsahy výberov, pozri napr. [2], [21], [18], [9], [1].

3.3 Inferencia o pevných efektoch v prípade neznámych komponentov variancie

V prípade neznámych komponentov variancie sa ako odhad funkcie pevných efektov $K'\beta$ často používa empirický BLUE (EBLUE) odhad

$$EBLUE(K'\beta) = \widehat{\widehat{K'\beta}} = K' \left(X'V(\hat{\vartheta})^{-1}X \right)^{-} X'V(\hat{\vartheta})^{-1}y \quad (11)$$

s odhadnutou kovariančnou maticou

$$\widehat{Var}(\widehat{\widehat{K'\beta}}) = K' \left(X'V(\hat{\vartheta})^{-1}X \right)^{-} K. \quad (12)$$

Takýto odhad kovariančnej matice systematicky podhodnocuje skutočnú kovariančnú maticu, pretože je systematicky vychýlený od skutočnej kovariančnej matice BLUE odhadu, keď namiesto ϑ používa odhad $\hat{\vartheta}$, a navyše, aj keby sme poznali ϑ , kovariančná matica BLUE odhadu neberie do úvahy variabilitu odhadu $\hat{\vartheta}$, ktorý je použitý v EBLUE odhade.

Test lineárnej hypotézy $H_0 : K'\beta = K'\beta_*$ možno založiť na *Waldovskej* štatistike

$$W = \left(\widehat{\widehat{K'\beta}} - K'\beta_* \right)' \left(K' \left(X'V(\hat{\vartheta})^{-1}X \right)^{-} K \right)^{-1} \left(\widehat{\widehat{K'\beta}} - K'\beta_* \right). \quad (13)$$

V tomto prípade však neplatí, že za platnosti H_0 je $W \sim \chi_\nu^2$, kde ν je hodnota príslušnej kovariančnej matice. Takýto predpoklad vedie k nesprávnym uzáverom. Test je príliš liberálny a konfidenčné intervaly sú príliš úzke (vzhľadom k stanovenej nominálnej hladine významnosti). Preto je potrebná korekcia odhadu kovariančnej matice a vhodná aproximácia distribúcie testovacej štatistiky.

Kackar-Harville [7] dokázali, že odhad $\widehat{K'\beta} = EBLUE(K'\beta)$ je nevychýleným odhadom funkcie $K'\beta$. Navrhli korekciu kovariančnej matice EBLUE odhadu:

$$\begin{aligned} Var\left(\widehat{K'\beta}\right) &= Var\left(BLUE(K'\beta)\right) + E\left(\widehat{K'\beta} - BLUE(K'\beta)\right)^2 \\ &= K'Var(\hat{\beta})K = K'(\Phi + \Lambda)K, \end{aligned} \quad (14)$$

kde

$$\Phi = C_{11} = \left(X'V(\vartheta)^{-1}X\right)^{-},$$

je kovariančná matica odhadu $BLUE(\beta)$ a

$$\Lambda \approx \Phi \left\{ \sum_i \sum_j \Sigma_{ij} (Q_{ij} - P_i \Phi P_j) \right\} \Phi, \quad (15)$$

je príslušná korekčná matica, pričom

$$P_i = X' \frac{\partial V^{-1}}{\partial \vartheta_i} X, \quad Q_{ij} = X' \frac{\partial V^{-1}}{\partial \vartheta_i} V \frac{\partial V^{-1}}{\partial \vartheta_j} X, \quad \Sigma = Var(REML(\vartheta)).$$

Kenward-Roger [8] navrhli korekciu odhadnutej kovariančnej matice odhadu $EBLUE(K'\beta)$ v situácii keď $\hat{\vartheta} = REML(\vartheta)$ a aproximáciu rozdelenia testovacej štatistiky. Prirodzeným odhadom matice $Var\left(\widehat{K'\beta}\right)$ je

$$\widehat{Var}\left(\widehat{K'\beta}\right) = K'(\hat{\Phi} + \hat{\Lambda})K. \quad (16)$$

Avšak odhad $\hat{\Phi}$ je taktiež vychýleným odhadom matice Φ :

$$\hat{\Phi} \approx \Phi + \sum_i (\hat{\vartheta}_i - \vartheta_i) \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta_i} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j (\hat{\vartheta}_i - \vartheta_i)(\hat{\vartheta}_j - \vartheta_j) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_i \partial \vartheta_j}, \quad (17)$$

odtiaľ, za ďalších zjednodušujúcich predpokladov o nevychýlenosti odhadu $\hat{\vartheta} = REML(\vartheta)$, dostávame

$$E(\hat{\Phi}) = \Phi + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \Sigma_{ij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_i \partial \vartheta_j}, \quad (18)$$

pričom

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_i \partial \vartheta_j} &= \Phi(P_i \Phi P_j + P_j \Phi P_i - Q_{ij} - Q_{ji} + R_{ij})\Phi, \\ R_{ij} &= X'V^{-1} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_i \partial \vartheta_j} V^{-1}X. \end{aligned}$$

V LMM je kovariančná matica $Var(y) = V(\vartheta) = \sum_i \vartheta_i V_i$, teda $R_{ij} = 0$ a $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_i \partial \vartheta_j} = -2\Lambda$. S využitím aproximácie

$$\Phi \approx \hat{\Phi} + \Lambda \quad (19)$$

je výsledná korekcia odhadnutej kovariančnej matice odhadu $EBLUE(K'\beta)$ daná v tvare

$$\widehat{Var}\left(\widehat{K'\beta}\right) \approx K'(\hat{\Phi} + 2\hat{\Lambda})K = K'\Phi_A K, \quad (20)$$

kde $\Phi_A = \hat{\Phi} + 2\hat{\Lambda}$ označuje stanovenú korekciu matice Φ (kovariančnej matice odhadu $BLUE(\beta)$).

Na testovanie hypotézy $H_0 : K'\beta = K'\beta_*$ KR metóda využíva modifikovanú Waldovskú štatistiku W_{Φ_A} :

$$W_{\Phi_A} = \left(\widehat{K'\beta} - K'\beta_*\right)' (K'\Phi_A K)^{-1} \left(\widehat{K'\beta} - K'\beta_*\right). \quad (21)$$

Rozdelenie štatistiky W_{Φ_A} (za platnosti H_0) KR-metóda aproximuje rozdelením

$$\frac{1}{\ell} W_{\Phi_A} \stackrel{approx.}{\sim} \hat{\lambda} F_{\ell, \hat{\nu}}, \quad (22)$$

kde $\ell = rank(K')$. Násobok $\hat{\lambda}$ a stupne voľnosti F -rozdelenia $\hat{\nu}$ musia byť odhadované z dát, dve alternatívne metódy sú uvedené v práci [8]. V špeciálnom prípade, keď $\ell = 1$, platí, že $\hat{\lambda} = 1$ a odhadnuté stupne voľnosti $\hat{\nu}$ sa zhodujú so Satterthwaiteovou aproximáciou, pozri [14].

Základné vlastnosti metódy Kenwarda-Rogera (KR metódy) možno zhrnúť v niekoľkých bodoch:

- V prípade vyvážených ANOVA modelov KR metóda dáva rovnaké výsledky ako klasická teória ANOVA modelov (v prípade, že existujú optimálne testovacie procedúry).
- V prípade, že $\ell = rank(K') = 1$, platí že $\hat{\lambda} = 1$ a odhadnuté stupne voľnosti $\hat{\nu}$ sa zhodujú s odhadmi klasickou Satterthwaitovou metódou.
- Simulačné štúdie pre rôzne typy lineárnych zmiešaných modelov dokazujú, že empirická hladina významnosti testov, resp. empirické pravdepodobnosti pokrytia v prípade konštrukcie konfidenčných oblastí pre pené efekty, sú v dobrej zhode so stanovenými nominálnymi hodnotami.
- Pre niektoré typy lineárnych zmiešaných modelov možno získať explicitné tvary pre odhad stupňov voľnosti. Implementácia KR metódy pre všeobecný LMM je dostupná v štatistickom balíku SAS ver.8 (Proc MIXED).

Method	\bar{y}_i	s_i^2	n_i	Method	\bar{y}_i	s_i^2	n_i
A	105.00	85.711	8	C	109.50	2.729	14
B	109.75	20.748	12	D	113.25	33.640	8

Tabuľka 2: Selén v sušenom mlieku, [3].

3.4 Medzilaboratórne porovnávacie pokusy

V tejto časti uvedieme aplikáciu KR metódy v prípade, keď LMM použijeme na modelovanie a vyhodnocovanie medzilaboratórnych porovnávacích pokusov, pozri [20]. V porovnávacích pokusoch sa uvažujú merania rovnakého objektu, ktoré sa opakovane vykonávajú v $k \geq 2$ laboratóriách, i -té laboratórium opakuje merania n_i krát, $n_i \geq 2$. V tabuľke 2 je uvedený príklad typických dát, ktoré boli analyzované v práci [3].

Jedným z cieľov týchto meraní je určiť spoločnú referenčnú hodnotu (CRV - Comparison Reference Value) meranej veličiny a charakterizovať jej neistotu (napr. určiť konfidenčný interval). Špeciálnym prípadom je situácia, keď je cieľom určenie odhadu pre spoločnú strednú hodnotu (Common Mean Problem).

Na modelovanie uvedených dát budeme uvažovať lineárny heteroskedastický model s náhodnými efektami:

$$Y_{ij} = \mu + b_i + \varepsilon_{ij}, \quad (23)$$

kde μ je parameter záujmu – spoločná stredná hodnota, b_i sú náhodné efekty laboratórii, $b_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_0^2)$, $\varepsilon_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_i^2)$, $i = 1, \dots, k$, $j = 1, \dots, n_i$, sú navzájom nezávislé chyby meraní. y_{ij} označuje výsledok merania, realizáciu náhodnej premennej Y_{ij} . Označme ďalej

$$\bar{Y}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij}, \quad S_i^2 = \frac{1}{(n_i - 1)} \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2,$$

výberové laboratórne priemery a rozptyly. Parametre, σ_0^2 a σ_i^2 považujeme v tomto prípade za rušivé parametre.

Za predpokladu znalosti rušivých parametrov σ_0^2 a σ_i^2 je optimálny BLUE odhad parametra μ totožný s odhadom zovšeobecnenou metódou najmenších štvorcov (GLS):

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^k w_i \bar{Y}_i}{\sum_{i=1}^k w_i}.$$

kde $w_i = 1/\text{Var}(\bar{Y}_i)$, pričom $\text{Var}(\bar{Y}_i) = \sigma_0^2 + \sigma_i^2/n_i$. Za daných predpokladov platí:

$$\hat{\mu} \sim \mathcal{N}(\mu, \Phi).$$

kde $\Phi = 1/w_\Sigma$ and $w_\Sigma = \sum_{i=1}^k w_i$.

V prípade neznámych komponentov variancie je alternatívnym odhadom EBLUE, $\hat{\mu}$, ktorý vznikne nahradením neznámych komponentov variancie odhadnutými hodnotami (napr. REML odhady variančných komponentov). Často sa potom predpokladá, že približne platí:

$$\hat{\mu} \stackrel{\text{appr.}}{\sim} \mathcal{N}(\mu, \hat{\Phi}),$$

kde $\hat{\Phi} = 1/\sum_{i=1}^k \hat{w}_i$, $\hat{w}_i = 1/(\hat{\sigma}_0^2 + \hat{\sigma}_i^2/n_i)$. Odtiaľ, približný $(1 - \alpha) \times 100\%$ konfidenčný interval pre μ je

$$\hat{\mu} \pm z(1 - \alpha/2)\sqrt{\hat{\Phi}},$$

kde $z(1 - \alpha/2)$ je kvantil štandardného normálneho rozdelenia. Simulačné štúdie dokazujú, že empirické pravdepodobnosti pokrytia takýchto konfidenčných intervalov sú v prípade malých a stredných rozsahov n_i významne menšie než stanovené nominálne hodnoty.

Nech $Y = (Y_{11}, \dots, Y_{kn_k})'$, potom kovariančná matica modelu je v tvare

$$\text{Var}(Y) = V = \text{diag}\{\sigma_0^2 J_{n_i} + \sigma_i^2 I_{n_i}\},$$

kde J_{n_i} označuje $(n_i \times n_i)$ -maticu jednotiek. GLS odhad parametra μ možno zapísať

$$\hat{\mu} = (I'_N V^{-1} I_N)^{-1} I'_N V^{-1} Y,$$

kde

$$\text{Var}(\hat{\mu}) = \Phi = (I'_N V^{-1} I_N)^{-1}.$$

Podľa KR metódy je korigovaný odhad variancie EBLUE odhadu $\hat{\mu}$ daný ako

$$\widehat{\text{Var}}(\hat{\mu}) = \hat{\Phi}_A = \hat{\Phi} + 2\hat{\Lambda}.$$

$$\hat{\Lambda} = \Lambda(\hat{\vartheta}) = \hat{\Phi}^2 \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^k \hat{W}_{ij} (\hat{Q}_{ij} - \hat{P}_i \hat{\Phi} \hat{P}_j),$$

pričom $\vartheta = (\sigma_0^2, \sigma_1^2, \dots, \sigma_k^2)$ a ďalej

$$P_i = -\frac{n_i}{(\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2)^2},$$

$$Q_{0,0} = \sum_{i=1}^k \left(\frac{n_i}{\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2} \right)^3, \quad Q_{0,i} = Q_{i,0} = \frac{n_i^2}{(\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2)^3},$$

$$Q_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ \frac{n_i}{(\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2)^3}, & i = j, \end{cases} \quad i \geq 1.$$

W označuje asymptotickú kovariančnú maticu odhadu $\hat{\vartheta}$, t.j.inverzia Fisherovej informačnej matice.

Fisherová informačná matrica pre REML odhady variančných komponentov možno určiť v explicitnom tvare

$$\{I_F\}_{i,j} = \frac{1}{2} [\{S\}_{ij} - \{R\}_{ij}],$$

kde

$$\{R\}_{ij} = \Phi(2Q_{ij} - P_i \Phi P_j),$$

a prvky matice S sú

$$\{S\}_{0,0} = -P_0 = \sum_{i=1}^k \left(\frac{n_i}{\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2} \right)^2,$$

$$\{S\}_{0,i} = \{S\}_{i,0} = -P_i = \frac{n_i}{(\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2)^2},$$

$$\{S\}_{ij} = \begin{cases} 0, \\ \frac{1}{\sigma_i^4} \left(n_i - \frac{2\sigma_0^2 n_i}{\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2} + \frac{n_i \sigma_0^4}{(\sigma_i^2 + n_i \sigma_0^2)^2} \right) \end{cases},$$

a teda

$$W = W(\vartheta) = I_F^{-1}(\vartheta).$$

Potom približný $(1 - \alpha) \times 100\%$ KR konfidenčný interval pre μ je

$$\hat{\mu} \pm \sqrt{\hat{\Phi}_A} t_{\hat{\nu}}(1 - \alpha/2), \quad (24)$$

kde $t_{\hat{\nu}}(1 - \alpha/2)$ označuje $(1 - \alpha/2)$ -kvantil Studentovho rozdelenia s $\hat{\nu}$ stupňami voľnosti.

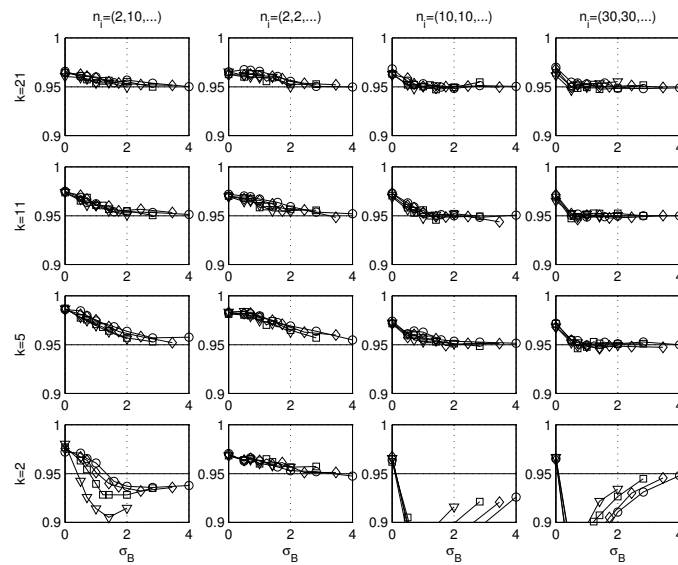
V tomto prípade $\hat{\nu}$ odhadujeme pomocou Satterthwaitovho odhadu:

$$\hat{\nu} = \frac{2\hat{\Phi}^2}{\widehat{Var}(\hat{\Phi})} = \frac{2}{\hat{\Phi}^2(\hat{P}'\hat{W}\hat{P})},$$

kde $\hat{P} = (\hat{P}_0, \hat{P}_1, \dots, \hat{P}_k)'$.

Vlastnosti takto navrhnutého intervalového odhadu sme overili simulačne. Za predpokladu platnosti modelu (23) sme opakovane simulovali realizácie meraní, pričom za parametre modelu sme volili tieto hodnoty: $\mu = 0$, $k \in \{21, 11, 5, 2\}$. Pre každé zvolené k , sme menili štyri rôzne voľby pre n_i : $n_i = \{2, 10, 2, 10, \dots\}$, $i = 1, \dots, k$, ďalej $n_i = 2$ pre všetky $i = 1, \dots, k$, $n_i = 10$ pre všetky i a $n_i = 30$ pre všetky i . Uvažovali sme rovnomerne rastúce hodnoty parametrov $\{\sigma_1^2, \dots, \sigma_k^2\}$, pričom $\sigma_1^2 = 1$ a $\sigma_k^2 \in \{1, 2, 3, 4\}$. Hodnoty medzilaboratórneho rozptylu $\sigma_B^2 = \sigma_0^2$ boli volené z množiny hodnôt $\{0, 1/4, 1/2, 1, (1 + \sigma_k^2)/2, \sigma_k^2, 2\sigma_k^2, 4\sigma_k^2\}$.

Pre každú kombináciu parametrov sme generovali 10000 nezávislých realizácií $\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_k$ a s_1^2, \dots, s_k^2 a určili 95% interval spoľahlivosti pre parameter μ . Empirické pravdepodobnosti pokrytia skutočného parametra $\mu = 0$ sú zobrazené na obrázku 1.



Obrázok 1: Empirické pravdepodobnosti pokrytia parametra μ približným 95% intervalom spoľahlivosti (24) založeným na metóde Kenwarda a Rogera. Symbol ∇ označuje experiment so $\sigma_k^2 = 1$, \square - $\sigma_k^2 = 2$, \diamond - $\sigma_k^2 = 3$ a \circ - $\sigma_k^2 = 4$. Súvislá priamka udáva nominálnu hodnotu 95%.

Ako vidieť, približný konfidenčný interval (24) založený na metóde Kenwarda a Rogera má tendenciu byť konzervatívny pre malé hodnoty medzilaboratórneho rozptylu. Pre veľmi malý počet laboratórií ($k = 2$) metóda nedáva uspokojivé výsledky a môže viesť k výrazne liberálnym intervalovým odhadom. V situáciách, keď je počet porovnávaných laboratórií väčší ako 5 a parameter medzilaboratórneho rozptylu nie je zanedbateľný, konfidenčný interval (24) dosahuje požadovanú pravdepodobnosť pokrytia skutočného parametra μ .

Reference

- [1] Arendacká B., (2005). *Generalized confidence intervals on the variance component in mixed linear models with two variance components*. *Statistics* **39**, 4, 275 - 286.
- [2] Burdick R.K., Graybill A.K. (1992). *Confidence intervals on variance components*. Dekker, New York.
- [3] Eberhardt K.R., Reeve C.P., Spiegelman C.H. (1989). *A minimax approach to combining means, with practical examples*. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* **5**, 129 - 148.
- [4] Fai A.H.T., Cornelius P.L. (1996). *Approximate F-tests of multiple degree of freedom hypotheses in generalized least squares analyses of unbalanced split-plot experiments*. *Journal of Statistical Computing and Simulation* **54**, 363 - 378.
- [5] Harville D.A. (1977). *Maximum-likelihood approaches to variance component estimation and to related problems*. *Journal of the American Statistical Association* **72**, 320 - 340.

- [6] Harville D.A., Jeske D.R. (1992). *Mean squared error of estimation or prediction under a general linear model*. Journal of the American Statistical Association **87**, 724–731.
- [7] Kackar A.N., Harville, D.A. (1984). *Approximations for standard errors of estimators of fixed and random effects in mixed linear models*. Journal of the American Statistical Association **79**, 853–862.
- [8] Kenward M.G., Roger J.H. (1997). *Small sample inference for fixed effects from restricted maximum likelihood*. Biometrics **53**, 983–997.
- [9] Khuri A.I., Mathew, T., Sinha B.K. (1998). *Statistical tests for mixed linear models*. Wiley, New York.
- [10] Littell R.C., Milliken G.A., Stroup W.W., Wolfinger R.D. (1996). *SAS system for mixed models*. SAS publishing, SAS Institute Inc.
- [11] McLean R.A., Sanders W.L., Stroup W.W. (1991). *A unified approach to mixed linear models*. The American Statistician **45**, 54–64.
- [12] Pinheiro J.C., Bates D.M. (2000). *Mixed-effects models in S and S-PLUS*. Springer-Verlag, New York.
- [13] Rao C.R., Kleffe J. (1988). *Estimation of variance components and applications*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam.
- [14] Satterthwaite F.E., (1941). *Synthesis of variance*. Psychometrika **6**, 309.
- [15] Searle S.R. (1971). *Linear models*. John Wiley & Sons, New York.
- [16] Searle S.R., Casella G., McCulloch C.E. (1992). *Variance components*. John Wiley & Sons, New York.
- [17] Schaalje B.G., McBride J.B., Fellingham G.W. (2001). *Approximations to distributions of test statistics in complex mixed linear models using SAS Proc MIXED*. SUGI 26 Proceedings, Statistics, Data Analysis and Data Mining Section, Paper 262, 1–5. See <http://www2.sas.com/proceedings/sugi26/proceed.pdf>.
- [18] Weerahandi S. (1995). *Exact statistical methods for data analysis*. Springer-Verlag, New York.
- [19] Witkovský V. (2001). *MATLAB algorithm mixed.m for solving Henderson's mixed model equations*. Technical Report, Institute of Measurement Science, Slovak Academy of Sciences, Bratislava. See also <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange>.
- [20] Witkovský V., Savin A., Wimmer G. (2003). *On small sample inference for common mean in heteroscedastic one-way model*. Discussiones Mathematicae-Probability and Statistics **23**, 2, 123–145.
- [21] Zhou L., Mathew T. (1994). *Some tests for variance components using generalized p-values*. Technometrics **36**, 394–402.

Podakovanie: Táto práca bola podporovaná Vedeckou grantovou agentúrou Ministerstva školstva SR a Slovenskej akadémie vied – VEGA, grantami 1/3016/06 a 2/4026/04.

Adresa: V. Witkovský, Ústav merania Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 841 01 Bratislava

E-mail: witkovsky@savba.sk

On simulation of rare events

Jaromír Antoch

Keywords: Rare events, simulation, importance sampling, large deviations theory, Cramér's theorem, Gärtner-Ellis theorem.

Motto: Those who can, do. Those who cannot, simulate.

Anonymous

Abstract: This report aims at giving an overview of the rare event simulation and the variance reduction technique known as the importance sampling. Its contents concentrates not only on the basic ideas but also on the corresponding mathematical and probabilistic background, i.e. the large deviation theory. Throughout the text a reader can find many examples and results of simulations. On the other hand, the proofs were shortened to the minimum. Please notice that the pages 412–456 are available only on enclosed CD, not in the printed version.

Contents

1. Notation	404
2. Introduction	405
3. Importance sampling and rare events simulations	407
4. Simulation diagnostic	418
5. Fundamental theorem of system simulation	420
6. Efficient importance sampling estimators	424
6.1. The variance rate of important sampling estimators	426
6.2. Minimum and dominant rate points	430
6.3. Single-server queues and rare events simulation	435
A. Basics of the large deviation theory	438
A.1. Cramér's theorem (iid case)	438
A.2. Gärtner-Ellis theorem	440
B. Stein's two step procedure	445
C. Historical remarks	448

1 Notation

iid	...	independent identically distributed
cdf	...	cumulative distribution function
pdf	...	probability distribution function
\mathbb{E}	...	expectation
\mathbb{E}_q	...	expectation calculated with respect to the density q
\mathbb{E}_Q	...	expectation calculated with respect to the distribution (measure) Q
<i>var</i>	...	variance
\mathbb{R}_1	...	real line
\mathbb{R}_d	...	d -dimensional Euclidean space
$I_A(x)$...	indicator function, i.e., $I_A(x) = 1$ if $x \in A$ and $I_A(x) = 0$ otherwise
$M_X(\theta)$...	moment generating function of random variable X , $M_X(\theta) = \mathbb{E} e^{\theta X}$
$\mathcal{J}_C(x)$...	Cramér's large deviation rate function, $\mathcal{J}_C(x) = \sup_{\theta \in \mathbb{R}_1} [\theta x - \log M_X(\theta)]$
$\mathcal{J}_{GE}(x)$...	Gärtner-Ellis large deviation rate function, $\mathcal{J}_{GE}(x) = \sup_{\theta} [\langle \theta, \mathbf{x} \rangle - \varphi(\theta)]$
<i>Alt</i> (p)	...	alternative distribution with probability of success p
<i>Bi</i> (n, p)	...	binomial distribution with parameters n and p
<i>Exp</i> (λ)	...	exponential distribution with parameter λ and density $\lambda e^{-\lambda x}$
<i>La</i> (a, μ)	...	Laplace (double exponential) distribution with parameters a and μ and density $e^{- x-\mu /a}/2a$
$N(\mu, \sigma^2)$...	normal distribution with mean μ and variance σ^2
$U(0, 1)$...	continuous uniform distribution on $(0, 1)$ with a density $f(x) = 1$ if $x \in [0, 1]$ and $f(x) = 0$ otherwise
$\phi(x)$...	pdf of standard normal distribution $N(0, 1)$, $\phi(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp\{-x^2/2\}$
$\phi_T(x)$...	pdf of normal distribution $N(T, 1)$
$\Phi(x)$...	cdf of standard normal distribution $N(0, 1)$
$\Phi_T(x)$...	cdf of normal distribution $N(T, 1)$
$X \sim f(\cdot)$...	random variable X is distributed according to the pdf $f(\cdot)$
$X \sim F(\cdot)$...	random variable X is distributed according to the cdf $F(\cdot)$
$X \sim P(\cdot)$...	random variable X is distributed according to the measure P
Q_\bullet	...	biasing probability measure
$\langle x, y \rangle$...	inner product of x and y
\equiv	...	equivalence

2 Introduction

Failures of highly reliable units are rare and usually it is not possible to gather the “real” failure time data needed for reliability estimation. One way of “obtaining failures” during the time given for experiments is the application of the methods of accelerated life testing (ALT), where the units are tested at higher than usual, i.e. designed for, stress conditions. Typical stress components are temperature, humidity, vibrations etc., being also the case of the Aclimat experiments. To treat such data, accelerated life models are used. For more details about ALT modelling and ALT planning of experiments see references given in Nelson (2005), e.g.

In any case, given the ALT model and ALT data, the goals are to estimate the parameters of the model and to predict the reliability under the usual stress. This leads, regardless the model used, to the estimation of the survival function

$$R_s(t) = P(T_s > t), \quad t \in \mathbb{R}_1^+, \quad (1)$$

where T_s is a non negative random variable describing the survival of the unit under interest subject to the stress s , which is possibly multidimensional and time varying.

If we set $\zeta_s(t) = R_{s_0}^{-1}(R_s(t))$, $R_{s_0}^{-1}$ being the inverse of the survival function under usual conditions s_0 , then

$$P(T_{s_0} \geq \zeta_s(t)) = P(T_s > t), \quad t \in \mathbb{R}_1^+.$$

This means that the probability to survive the moment t under the stress s is the same as the probability to survive till the moment $\zeta_s(t)$ under the nominal stress s_0 , so that it is enough to study the distribution of T_s ; of course, for given “transfer functional” ζ induced by the chosen accelerated life model.

Unfortunately, the distribution of T_s is usually very complicated and practically cannot be written in the closed form. One possibility how to overcome this problem is the approximation by the random processes and the use of asymptotic results. The crucial drawback of this approach is that for t large the asymptotic approximation of the probability (1) is valid only for very very large sample sizes, being in practice non realistic due to the financial and time limitations.

Simulations may be another possibility how to estimate the probability of interest. One of the most important methods that can be used to attack the rare events simulation problem is a variance reduction technique called *importance sampling*, being a very powerful method that can improve Monte Carlo efficiency by orders of magnitude. However, it requires a caution, because an inappropriate implementation can reduce efficiency by orders of magnitude! The method works by sampling from an artificial probability distribution (not the “natural” one for the given problem) that is chosen by the user, and then reweighting the observations to get an unbiased estimate.

This report concentrates on the problem to estimate for a given random variable X the tail of its distribution, i.e. to estimate $P(X > x)$, $x \gg 1$, using the simulations. We could see above how important this question is in the accelerated life modelling. The approach used is the *importance sampling technique* combined with the *large deviations theory*, a combination leading in many practically important situations to the efficient estimators. The following simple example illustrates the approach.

Example 2.1. Let $X \sim N(0, 1)$ and we are interested in $\nu_n = P(X > n)$, $n = 1, 2, \dots, 18$. The “exact” values of ν_n calculated using the program Mathematica are summarized in Table 2.1. Unfortunately, in the practice the situation is not as wonderful as it might seem because all programs working in double precision will return $\Phi(x) = 1$ for $x > 8$. Thus, if we need to know the response, we must either switch to the arbitrary precision calculation or to use simulations.

n	ν_n	$\hat{\nu}_{n,IS}$	n	ν_n	$\hat{\nu}_{n,IS}$
1	0.159e-0	0.158e-0	10	7.619e-24	7.493e-24
2	0.023e-0	0.022e-0	11	1.910e-28	2.037e-28
3	1.349e-3	1.349e-3	12	1.776e-33	1.667e-33
4	3.167e-5	3.092e-5	13	6.117e-39	5.802e-39
5	2.866e-7	2.805e-7	14	7.793e-45	7.791e-45
6	9.865e-10	9.938e-10	15	3.670e-51	3.657e-51
7	1.279e-12	1.327e-12	16	6.388e-58	6.519e-58
8	6.220e-16	5.896e-16	17	4.105e-65	3.726e-65
9	1.128e-19	1.172e-19	18	9.740e-73	9.321e-73

Table 2.1: Values of ν_n and $\hat{\nu}_{n,IS}$ for different values of n .

Assume that we do not have available Mathematica and that we have decided to estimate ν_n using simulations. The classical Monte Carlo simulation consist in simulating independent random variables $\{X_i\}_{i=1}^k$ from $N(0, 1)$ and forming an estimator $\hat{\nu}_n = k^{-1} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[X_i > n]}$. Unfortunately, it is clear from Table 2.1 that it is practically impossible to get $\hat{\nu}_n \neq 0$ for larger values of n because the probabilities ν_n are too small, so that one has to concentrate on alternative simulation methods.

One such possibility is the use of the so called importance sampling principle, i.e. the use of the estimator of the form

$$\hat{\nu}_{n,IS} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[Y_i > n]} \cdot \frac{\phi(Y_i)}{\phi_n(Y_i)},$$

where $\{Y_i\}$ are iid random numbers from the normal distribution $N(n, 1)$. Simulated values of $\hat{\nu}_{n,IS}$ calculated using the $k = 10\,000$ simulation runs are summarized in Table 2.1.

The estimated values are surprisingly good even for very small probabilities ν_n corresponding to large values of n . It seems that an analogous approach might help to estimate small probabilities of rare events in much more complicated situations. This conjecture turns out to be true so that we devote this report to the description how importance sampling methodology can help to estimate rare probabilities in an efficient way. \square

In the previous example we considered the problem of estimating the tail probability of a random variable with a given density. In most cases this probability can be either found analytically or evaluated accurately using numerical integration. The real power of importance sampling lies in its ability to precisely estimate rare event probabilities involving a random variable that is a function of several other random variables. Such a situation frequently arise in applications and examples of functions include both iid and non iid sums and other transformations as is the case of ALT models. Notice that biasing density can be obtained directly as a result of transformations imposed on the original random variables or on their density functions, being the most often used approach in practice.

3 Importance sampling and rare events simulations

Suppose we wish to estimate

$$\nu = \mathbb{E} \eta(X), \quad (2)$$

where X is a random variable (or a random vector) describing some observation on a random system and η is a real function. If η is the indicator of some set, being often the case, then ν is a probability of that set. Suppose that random variable X has a probability distribution function $p(\cdot)$. Then the direct simulation method consists in generating a sequence of iid random numbers $X^{(1)}, \dots, X^{(k)}$ from the density $p(\cdot)$ and defining the estimator

$$\hat{\nu}_p = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \eta(X^{(i)}). \quad (3)$$

The estimator $\hat{\nu}_p$ is unbiased and tending by the law of large numbers to its mean value ν as $k \rightarrow \infty$.

Alternatively, we could generate a sequence of iid random numbers $Y^{(1)}, \dots, Y^{(k)}$ from another density, say $q(\cdot)$, called the (*importance sampling*) *biasing distribution*, and to define the *importance sampling estimator* $\hat{\nu}_q$ as

$$\hat{\nu}_q = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \eta(Y^{(i)}) \frac{p(Y^{(i)})}{q(Y^{(i)})} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \eta(Y^{(i)}) w_i, \quad (4)$$

where $w_i = p(Y^{(i)})/q(Y^{(i)})$.

The expected value of $\widehat{\nu}_q$ under the density $q(\cdot)$ is

$$\mathbb{E}_q \widehat{\nu}_q = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \int \eta(y^{(i)}) \frac{p(y^{(i)})}{q(y^{(i)})} q(y^{(i)}) dy^{(i)} = \int \eta(y) p(y) dy = \mathbb{E}_p \eta(X) = \nu.$$

This means that the estimator $\widehat{\nu}_q$ is unbiased and tending by the law of large numbers to its mean value ν as $k \rightarrow \infty$.

Remark 3.1. We see immediately from (4) that we could have problems unless $q(x)$ is never zero for any value where $p(x)$ is positive. This means that the support of $q(\cdot)$ must include support of $p(\cdot)$. Moreover, we see that there can be a problem only if $\eta(x)$ is nonzero at x and $p(x)/q(x)$ “blows up”. This is equivalent to saying that the support of $\eta(x)p(x)$ is included in the support of $\eta(x)q(x)$. \square

Example 3.1. (Estimation of the tail probability of the sample mean)
Suppose we are interested in estimating

$$\nu = P \left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n Z_j > z \right),$$

where $z \in \mathbb{R}_1$ and $\{Z_j\}$ are iid random variables with zero mean and pdf $p^*(\cdot)$. The importance sampling idea is to simulate some other random variables, say $\{R_j^{(i)}\}$ with pdf $q^*(\cdot)$ and to form the importance sampling estimator

$$\widehat{\nu}_{q^*} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{\left[\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n R_j^{(i)} > z\right]} \cdot \frac{\prod_{j=1}^n p^*(R_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^n q^*(R_j^{(i)})}.$$

The superscript (i) on a random variable R indicates which one of the k independent simulation runs is under consideration.

To fit in with the theoretical framework given above, we have the correspondences:

$$(Z_1, \dots, Z_n) \Rightarrow X, \quad (R_1, \dots, R_n) \Rightarrow Y, \quad \prod_{j=1}^n p^*(R_j^{(i)}) \Rightarrow p(Y^{(i)}),$$

$$\prod_{j=1}^n q^*(R_j^{(i)}) \Rightarrow q(Y^{(i)}), \quad \prod_{j=1}^n p^*(Z_j^{(i)}) \Rightarrow p(X^{(i)})$$

and $\mathbf{I}_{\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_j > z\right]} \Rightarrow \eta(X)$. \square

In Example 3.1 we can see some of the possible usefulness in using an importance sampling estimator. The quantity ν involves the sum of n iid random variables. Even if we knew $p^*(\cdot)$, the distribution of the sum would involve a n -fold convolution of $p^*(\cdot)$. For large n this could be a very difficult task even numerically. After that, it would be necessary to integrate over the

tail of the resulting distribution, another task that could be (very) difficult analytically or numerically. *Moreover, notice that with the importance sampling the knowledge of one-dimensional densities is in the iid case sufficient to come up with the unbiased estimator of ν !*

Key question of the importance sampling. *Are there better choices for $q(\cdot)$ than just $p(\cdot)$, i.e. the direct Monte Carlo choice?* Let us consider the variance of $\widehat{\nu}_q$. Since $\widehat{\nu}_q$ is the average of k iid terms, the variance will be $(1/k)$ -times the variance of one of the terms. Thus

$$k \cdot \text{var}(\widehat{\nu}_q) = \int \left(\eta(y) \frac{p(y)}{q(y)} - \nu \right)^2 q(y) dy = \int \eta^2(y) \frac{p^2(y)}{q(y)} dy - \nu^2 \equiv U_q - \nu^2. \quad (5)$$

Consider the first integral in (5). Observe that this integral is small if $\eta(y)p(y)/q(y) \approx \nu$ for most y , i.e., it is small if $q(y)$ is proportional to $\eta(y)p(y)$. This leads to a simple rule of thumb, i.e., $q(y)$ should be large when $\eta(y)p(y)$ is large. Hence the name “importance sampling” because we need to ensure that $q(\cdot)$ gives more weight to the “important” values of y .

Let us try to choose $q(\cdot)$ to minimize (5). Using the Jensen inequality ($\mathbb{E} Y^2 \geq (\mathbb{E} Y)^2$) we get

$$\begin{aligned} U_q &= \int \eta^2(y) \frac{p^2(y)}{q^2(y)} q(y) dy = \mathbb{E}_q \left(\eta^2(Y) \frac{p^2(Y)}{q^2(Y)} \right) \\ &\geq \left(\mathbb{E}_q |\eta(Y)| \frac{p(Y)}{q(Y)} \right)^2 = \left(\int |\eta(y)| p(y) dy \right)^2. \end{aligned} \quad (6)$$

There is an equality in (6) if and only if $|\eta(Y)|p(Y)/q(Y)$ is almost surely a constant, i.e., when $|\eta(y)|p(y)/q(y)$ is a constant. Thus, it follows that

$$q_{opt}(x) = \frac{p(x)|\eta(x)|}{\int p(x)|\eta(x)| dx}. \quad (7)$$

Assume, for simplicity, that $\eta(x)$ is a nonnegative function. Then we get easily that $U_{q_{opt}} = \nu^2$, so that $k \cdot \text{var} \widehat{\nu}_{q_{opt}} = 0$ for all k . Unfortunately, this is not so wonderful as it might seem due to the fact that:

- At first, $p(\cdot)$ is in many cases not specified in the closed form. Of course, we may generate samples from it easily but an explicit expressions are generally not available.
- At second, and worse, even if $p(\cdot)$ were known, *the constant of proportion is exactly ν^{-1} , i.e. the parameter we are trying to estimate! Hence in computing the weighting factor for the importance sampling we must first know what ν is!*

Clearly, we must search for other methods or criteria by which to choose a good, or at least reasonable, biasing distribution $q(\cdot)$.

Optimal choices of biasing distribution. Let us start with considering “optimal choice” in (7) for the special case when $\eta(\cdot) = \mathbb{I}_{[E]}(\cdot)$, where we think of the set E as being a “rare event”. First note that $q_{opt}(\cdot)$ puts all of its probability mass on the set (event) E , i.e., its support is contained in or equal to E . Thus, intuitively, we want to choose the simulation distribution so that more events of interest occur. The second observation is that $q_{opt}(\cdot)$ has the same shape over the set E as the original distribution. In fact it is the same distribution except just scaled by ν^{-1} . Thus, if some region of E has more probability mass than another region of E under the original distribution then the optimal choice will also have this property. We can summarize these two principles as:

- P1. Choose the simulation (biasing) distribution so that we “hit” the rare event E of interest more often.
- P2. Choose the simulation (biasing) distribution so that the more likely (or higher probability) regions of E are hit more often during the simulation than the lower probability (less likely) regions of E .

These two properties have spawned a variety of ad hoc techniques for the simulation distribution. By far the two most popular ones are the *variance scaling* and the *mean translation*.

The variance scaling method increases the “hit” probability by choosing as the simulation random variables the original random variables multiplied by a constant. This constant is typically greater than one and thus we are merely increasing the variance of the original distribution. For some rare events E it means that we put more probability mass on it, causing to “hit” it more often during the simulation, which satisfies our first property P1 quite nicely. Whether P2 is also satisfied as well depends on the problem. Notice, however, that it is desirable to choose the variance scaling parameter to satisfy as much as possible the principle P2.

Remark 3.2. In the setup of Example 3.1 the variance scaling method corresponds to the choice

$$q^*(x) = \frac{1}{a} p^*\left(\frac{x}{a}\right), \quad (8)$$

where a is a so called *variance scaling parameter*. It is evident that if the original density $p^*(\cdot)$ has the variance σ^2 , then $q^*(\cdot)$ has variance $a^2\sigma^2$. \square

The mean translation method, which seeks to increase the “hit” probability by adding a mean value to the input random variable, largely superseded in the practice the variance scaling method.

Remark 3.3. In the setup of Example 3.1 the mean translation method corresponds to the choice

$$q^*(x) = p^*(x - m), \tag{9}$$

where m is a so called *mean shift parameter*. If the original density $p^*(\cdot)$ has a mean m_0 then $q^*(\cdot)$ has the mean $m_0 + m$. In this method almost always the value of m is just chosen to be z , which particularly explains its popularity. However, we will see that it is not necessarily the best choice in every case. On the other hand, notice that the scaling parameter a in the variance scaling method has no such default choice available. \square

Remark 3.4. Recall that for the importance sampling estimator we require that the support of $\eta(\cdot)q(\cdot)$ includes the support of $\eta(\cdot)p(\cdot)$ and that *we must* take this into account when choosing simulation (biasing) distribution.

Suppose that $\eta(x) = \mathbf{I}_{[E]}(x)$, i.e. $\eta(\cdot)$ has support E . If the original density $p(\cdot)$ has support $[0, s]$, $s > 0$, and $E = [s/2, s]$, then the variance scaling simulation distribution has support $[0, sa]$ assuming $a > 0$. If, moreover, $a > 1$, then

$$\text{support}(p \cdot \eta) = [0, s] \cap E = E \subseteq \text{support}(q \cdot \eta) = [0, sa] \cap E = E,$$

and thus satisfies our support requirements.

The mean shift method on the other hand has

$$\text{support}(p \cdot \eta) = [m, s + m] \cap E = [m, s + m] \cap [s/2, s],$$

which will violate the support requirement for any choice of $m > s/2$, because $[m, s + m] \cap [s/2, s] = \emptyset$ in such a case. \square

Example 3.2. (Normal distribution – estimation of a tail probability of the mean)

Let $\{Z_j\}$ are independent standard normal (Gaussian) random variables. Suppose that we are interested in estimating

$$\nu = P\left(\frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} Z_j > 3\right) = 1 - \Phi(3\sqrt{10}) \approx 1.190\,800 \cdot 10^{-21}, \tag{10}$$

where we have used the fact that the distribution of $n^{-1} \sum_{i=1}^n Z_i$ is for all n again normal with the zero mean and the variance $1/n$. However, all programs working in double precision will return $\Phi(x) = 1$ for $x > 8$. Thus, if we need to know the response, we must either switch to the calculation in arbitrary precision or to use simulations, being of our interest in this report.

If one decides to use an importance sampling approach, the mean translation method with the biasing density $\phi_\mu(x)$, $\mu = 3$, seems to be appealing. Then the importance sampling estimator of ν has the form

$$\hat{\nu}_{\phi_\mu} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{\left[\frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} R_j^{(i)} > 3\right]} \cdot \frac{\prod_{j=1}^{10} \phi(R_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^{10} \phi_\mu(R_j^{(i)})}, \tag{11}$$

where $R_j^{(i)}$ are independent realizations of normally distributed random variables with density $\phi_\mu(x)$. The calculation $\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$ can be considerably simplified taking into account that

$$\frac{\prod_{j=1}^n \phi(R_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^n \phi_\mu(R_j^{(i)})} = \exp \left\{ \frac{n}{2} \mu^2 - \mu \sum_{j=1}^n R_j^{(i)} \right\}.$$

The last term is also much more numerically stable than the direct use of (11).

At first we were interested in the influence of the number of simulations on $\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$ for the “optimal choice” of the mean shift parameter $\mu = 3$. Selected results are summarized in Table 3.1. They show that if the mean shift parameter μ is “reasonably selected” then “only few” simulations have to be done. A detailed discussion concerning the choice of the number of simulation runs in order to achieve a prescribed accuracy is in Section 4.

number of simulations	$\widehat{\nu}_{\phi_3}$	number of simulations	$\widehat{\nu}_{\phi_3}$
10 000	$1.223\,947 \cdot 10^{-21}$	100 000	$1.181\,438 \cdot 10^{-21}$
20 000	$1.196\,571 \cdot 10^{-21}$	250 000	$1.197\,376 \cdot 10^{-21}$
50 000	$1.167\,477 \cdot 10^{-21}$	500 000	$1.187\,643 \cdot 10^{-21}$

Table 3.1: Values of $\widehat{\nu}_{\phi_3}$ for different number of simulation runs.

μ	$\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$	μ	$\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$
0	0	1.6	$1.269\,915 \cdot 10^{-21}$
1	0	2	$1.232\,754 \cdot 10^{-21}$
1.40	0	2.50	$1.195\,291 \cdot 10^{-21}$
1.43	0	3	$1.187\,643 \cdot 10^{-21}$
1.44	$9.879\,124 \cdot 10^{-21}$	4	$1.191\,287 \cdot 10^{-21}$
1.45	$7.309\,416 \cdot 10^{-21}$	4.5	$1.857\,398 \cdot 10^{-22}$
1.46	$5.402\,722 \cdot 10^{-21}$	4.75	$6.095\,685 \cdot 10^{-26}$
1.48	$2.942\,861 \cdot 10^{-21}$	5	$1.075\,255 \cdot 10^{-29}$

Table 3.2: Values of $\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$ for different values of μ .

Clearly, it is also interesting to see the influence of the size of the shift μ on $\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$. Selected simulation results for different values of μ and 500 000 simulations are summarized in Table 3.2. Notice a strong influence of μ on the value of $\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$. On one hand “small” values of μ do not guarantee enough of hits of

the region $E = (3, \infty)$ and therefore the estimate is zero. On the other hand, in spite of the fact that the “large” values of μ ensure almost 100% hit rate of the region E , the contribution of the terms $\prod_{j=1}^{10} \phi(R_j^{(i)}) / \prod_{j=1}^{10} \phi_\mu(R_j^{(i)})$ is practically negligible and $\widehat{\nu}_{\phi_\mu}$ tends again to zero as μ increases.

A more detailed discussion concerning the “optimal choice” of the mean shift parameter μ can be found in Section 6; compare also Example 6.4. \square

Example 3.3. (Signal detection problem)

To see a real application of the above discussed problem, let us consider a signal detector that has to decide between two values, say -1 and $+1$, when observing in reality signal with a noise. For simplicity assume standard normal noise. This means that we observe r_i , $i = 1, \dots, n$, being a realization of $R_i = s + N_i$, $\mathcal{L}(N_i) \sim N(0, 1)$. We proceed the data by computing

$$\bar{R}_n = n^{-1} \sum_{i=1}^n R_i = s + n^{-1} \sum_{i=1}^n N_i. \tag{12}$$

It is evident that $\mathcal{L}(n^{-1} \sum_{i=1}^n N_i) \sim N(0, 1/n)$. If $\bar{R}_n > 0$ we decide “ $s = 1$ ”, otherwise we decide “ $s = -1$ ”. *What is the error of this signal detector?*

$$P(\bar{R}_n > 0 \mid s = -1) = P\left(\frac{\bar{R}_n + 1}{1/\sqrt{n}} > \frac{1}{1/\sqrt{n}}\right) = 1 - \Phi(\sqrt{n})$$

and, analogously, $P(\bar{R}_n < 0 \mid s = 1) = \Phi(-\sqrt{n})$, being a well known situation discussed above in Example 3.2. \square

Example 3.4. (Laplace distribution – estimation of a tail probability of the mean)

Suppose we are interested in estimating

$$\nu = P\left(\left|\frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} Z_j\right| > 3\right) \approx 5.674\,034 * 10^{-8}, \tag{13}$$

where $\{Z_j\}$ are independent Laplace (double exponentially) distributed random variables with the density

$$p(x) = e^{-|x|}/2, \quad x \in \mathbb{R}_1. \tag{14}$$

Unlike for the normal distribution, it is not so easy to write the density of the mean of independent Laplace distributed random variables in a closed form. Notice, however, that the desired probability can be calculated relatively easily numerically using either the Fourier transform or via the convolution of two independent gamma distributed random variables. The value $5.674\,034 * 10^{-8}$ was obtained independently by both these approaches using the software package *Mathematica*. On the other hand, an appealing approach is to estimate ν by simulations, which is the main topic of our report.

It appears that the variance scaling method might be used leading to the biasing density

$$q_a(x) = e^{-|x|/a}/2a, \quad x \in \mathbb{R}_1, \quad a > 1, \quad (15)$$

where a is the variance scaling parameter. The estimator has the form

$$\widehat{\nu}_{q_a} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I} \left[\left| \frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} R_j^{(i)} \right| > 3 \right] \cdot \frac{\prod_{j=1}^{10} p(R_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^{10} q_a(R_j^{(i)})}, \quad (16)$$

where $R_j^{(i)}$ are independent realizations of the Laplace distributed random variables with density $q_a(x)$. Notice that the calculation of $\widehat{\nu}_{q_a}$ can be considerably simplified taking into account that

$$\frac{\prod_{j=1}^n p(R_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^n q_a(R_j^{(i)})} = \exp \left\{ n \log a + \frac{1-a}{a} \cdot \sum_{j=1}^n |R_j^{(i)}| \right\}. \quad (17)$$

The last term is much more numerically stable than the direct use of (16).

The basic problem we are facing now is the “proper choice” of the parameter a . We will show the influence of its choice as well as the influence of the number of repetitions of the simulations on $\widehat{\nu}_{q_a}$. To this purpose we prepared a small simulation study. More precisely, we fixed the value of $a \in \{1, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.058\,97, 3.5, 4.0, 4.5, 5, 6, 8, 10\}$ and the different values of simulation runs $k \in \{10^5, 2.5 \times 10^5, 5 \times 10^5\}$, and estimated 100 times ν for these fixed values using the estimator $\widehat{\nu}_{q_a}$. For each fixed combination of $\{a, k\}$ this resulted in the sequence of estimators

$$\left\{ \widehat{\nu}_{q_a}^{(1)}\{a, k\}, \dots, \widehat{\nu}_{q_a}^{(100)}\{a, k\} \right\}. \quad (18)$$

For each sequence of values of the estimators (18) Table 3.3 provides corresponding sample mean, standard deviation, minimum and maximum. Simulated results seem to be quite satisfactory.

A detailed description of the method allowing to find an “optimal” value of $a = 3.058\,97$ can be found in Section 6.1. It is worth comparing also the results of Example 6.2 and especially of Example 6.6, that show a different “optimal” biasing strategy, a so called exponential shift of the original density.

A different way how to proceed is the use of the mean translation method. It holds

$$P \left(\left| \frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} Z_j \right| > 3 \right) = 2P \left(\frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} Z_j > 3 \right),$$

what suggests to use the biasing density of the form $q_\mu(x) = (1/2) \cdot e^{-|x-\mu|}$, $x \in \mathbb{R}_1$, $\mu \in \mathbb{R}_1$, and the estimator

$$\widehat{\nu}_{q_\mu} = 2 \cdot \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I} \left[\frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} R_j^{(i)} > 3 \right] \cdot \frac{\prod_{j=1}^{10} p(R_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^{10} q_\mu(R_j^{(i)})},$$

where $R_j^{(i)}$ are now independent realizations of Laplace distributed random variables with the density $q_\mu(x)$. Notice that the calculation of $\widehat{\nu}_{q_\mu}$ can be considerably simplified taking into account that

$$\frac{\prod_{j=1}^n p(R_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^n q_\mu(R_j^{(i)})} = \exp \left\{ \sum_{j=1}^n |R_j^{(i)} - \mu| - \sum_{j=1}^n |R_j^{(i)}| \right\}. \quad (19)$$

The last term is also much more numerically stable.

The basic problem we are facing now is the “proper choice” of the parameter μ . In analogy with Example 3.2 one might put $\mu = z$. We postpone a description of the method allowing to select the “optimal value” of μ to Section 6. Instead, we will show the influence of its choice as well as the influence of the number of repetitions of simulations on $\widehat{\nu}_{q_\mu}$. To this purpose we prepared another simulation study. More precisely, we fixed the value of $\mu \in \{1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5\}$ and $k \in \{10^5, 2.5 \times 10^5, 5 \times 10^5\}$ and estimated 100 times ν for the fixed values $\{\mu, k\}$ using the estimator $\widehat{\nu}_{q_\mu}$. We obtained a sequence of estimators

$$\left\{ \widehat{\nu}_{q_\mu}^{(1)}\{\mu, k\}, \dots, \widehat{\nu}_{q_\mu}^{(100)}\{\mu, k\} \right\}. \quad (20)$$

For each sequence of values of the estimators (20) Table 3.4 provides corresponding sample mean, standard deviation, minimum and maximum. Results of Table 3.4 seem to be quite surprising, especially the big variability of $\widehat{\nu}_{q_\mu}^{(i)}\{\mu, k\}$. After a detailed analysis of the simulated data two reasons appeared:

1. Despite the exponential tails of the Laplace distribution rather large values may appear.
2. Sample mean is not robust.

Due to the symmetry of the Laplace distribution approximately one half of simulated values will contribute to (17) satisfying the condition $I \left[\sum_{j=1}^{10} R_j^{(i)} > 30 \right]$. Moreover, it is evident that the contribution of the data on $\widehat{\nu}_{q_\mu}$ is given by (19), i.e. the determining role is played by

$$T_i = \sum_{j=1}^n |R_j^{(i)} - \mu| - \sum_{j=1}^n |R_j^{(i)}|. \quad (21)$$

When we analyzed the simulated data leading to the largest value of $\widehat{\nu}_{q_\mu}^{(i)}\{\mu, k\}$, we realized that the three 10-tuples of data giving the largest values of (21) are the following:

k	a	mean of (18)	std of (18)	min of (18)	max of (18)
10^5	1.0	0.0001	0.0009	0	0.0095
	1.5	0.1320	0.0834	0.0004	0.3488
	2.0	1.5110	0.2296	0.8985	1.9934
	2.5	4.0553	0.3835	2.9950	4.9047
	3.0	5.6584	0.5392	4.4195	6.9527
	3.05897	5.6814	0.5261	4.5670	7.1330
	3.5	5.6977	0.4616	4.4445	6.8504
	4.0	4.9456	0.3664	4.1239	6.0897
	4.5	3.8127	0.3220	3.1066	4.8465
	5.0	2.8132	0.2751	1.9716	3.5940
	6.0	1.3571	0.1906	0.9737	1.8052
8.0	0.3162	0.0938	0.1567	0.6453	
10.0	0.0712	0.0358	0.0165	0.2496	
k	a	mean of (18)	std of (18)	min of (18)	max of (18)
$2.5 \cdot 10^5$	1.0	0.0001	0.0007	0	0.0058
	1.5	0.1296	0.0571	0.0220	0.3534
	2.0	1.5121	0.1655	1.1313	1.9970
	2.5	3.9961	0.2445	3.4305	4.6719
	3.0	5.7190	0.3232	5.0840	6.7510
	3.05897	5.7761	0.3113	4.8747	6.5208
	3.5	5.8393	0.2735	5.0204	6.4968
	4.0	4.9495	0.2544	4.2129	5.6461
	4.5	3.8270	0.2298	3.2281	4.3667
	5.0	2.7969	0.1581	2.4816	3.1785
	6.0	1.3955	0.1252	1.0460	1.7532
8.0	0.3136	0.0579	0.2117	0.4669	
10.0	0.0790	0.0281	0.0303	0.1684	
k	a	mean of (18)	std of (18)	min of (18)	max of (18)
$5 \cdot 10^5$	1.0	0.0000	0.0000	0	0.0004
	1.5	0.1314	0.0353	0.0450	0.2371
	2.0	1.4788	0.1031	1.2180	1.7335
	2.5	4.0233	0.1918	3.3771	4.4474
	3.0	5.6383	0.2254	5.1650	6.2072
	3.05897	5.7197	0.2163	5.1251	6.1161
	3.5	5.8137	0.1835	5.2918	6.2599
	4.0	4.9442	0.1592	4.5640	5.3429
	4.5	3.8002	0.1494	3.4841	4.1010
	5.0	2.7886	0.1280	2.5169	3.1318
	6.0	1.3753	0.0861	1.1340	1.6095
8.0	0.3227	0.0375	0.2417	0.4578	
10.0	0.0790	0.0189	0.0380	0.1330	

Table 3.3: Sample characteristics of estimators $\widehat{\nu}_{q_a^{(i)}}\{a, k\}$, $i = 1, \dots, 100$, given by (18) for different values of a and k . All these values must be multiplied by the factor 10^{-8} .

k	μ	mean of (20)	std of (20)	min of (20)	max of (20)
10^5	1.0	4.2643	5.5488	0.0000	42.6752
	1.5	5.2024	7.2638	1.0563	67.8315
	2.0	4.4489	2.6896	1.5979	15.6722
	2.5	4.3553	4.0342	1.6099	33.2614
	3.0	16.6755	107.0629	1.3891	1071.23
	3.5	4.5205	9.7708	1.1885	93.7599
	4.0	3.0090	5.6753	0.6839	52.0111
	4.5	2.3124	3.5137	0.3185	21.3174
	5.0	1.1176	1.8923	0.0692	8.9600
k	μ	mean of (20)	std of (20)	min of (20)	max of (20)
$2.5 \cdot 10^5$	1.0	5.0307	3.5913	0.5495	17.5811
	1.5	6.4123	8.0250	1.6031	57.7661
	2.0	4.8723	3.3495	1.9925	32.6582
	2.5	5.2636	4.5525	2.2906	34.8654
	3.0	9.2430	42.9511	1.8118	431.0994
	3.5	3.7604	4.1114	1.4063	38.6543
	4.0	16.7217	132.9464	0.9756	1332.3341
	4.5	3.1297	7.2489	0.6051	69.7821
	5.0	2.9493	15.1723	0.1007	150.2355
k	μ	mean of (20)	std of (20)	min of (20)	max of (20)
$5 \cdot 10^5$	1.0	7.3606	12.1789	0.8349	102.0033
	1.5	17.6444	98.2459	2.2908	965.6966
	2.0	7.4116	15.2160	2.4397	134.5714
	2.5	5.0166	3.2000	2.4437	23.0696
	3.0	7.5675	21.6504	1.9541	217.4545
	3.5	4.4828	4.6572	1.8568	34.3499
	4.0	10.135	66.6997	1.0336	669.6918
	4.5	13.7700	105.3439	0.7417	1055.0183
	5.0	2.4720	8.0416	0.2003	75.2325

Table 3.4: Sample characteristics of estimators $\widehat{\nu}_{q_\mu^{(i)}}\{\mu, k\}$, $i = 1, \dots, 100$, given by (20) for different values of μ and k . All values must be multiplied by the factor 10^{-8} .

T_i	corresponding data									
-9.83	8.98	0.93	1.46	3.45	3.36	2.07	1.44	-0.13	1.99	6.54
-9.25	2.10	3.08	0.25	8.80	3.88	5.42	2.25	6.35	-0.46	-1.61
-0.62	1.51	-0.25	-1.11	2.38	1.67	3.09	0.74	16.48	-0.70	9.36

Now, it is clear that all of these “contributing terms” but one will contribute to (17) by less (sometimes much less) than e^{-10} . Now it is clear that just one term of the size $e^{-0.62}$ more than seriously affects $\hat{\nu}_{q\mu}$. Clearly, the existence of two large positive values is the reason for the large value of (21).

It is worth noticing that it does not help to increase the number of simulations to overcome the above described problem, because time by time the same situation with two or more large values in one 10-tuple of data will appear again and again.

4 Simulation diagnostic

It is natural to keep the importance sampling estimate $\hat{\nu}_q$ to be within $100\gamma\%$ accuracy with given probability δ . Let random variable Z follow a standard normal distribution $N(0,1)$ and denote by u_α its α -quantile, i.e. $P(Z \leq u_\alpha) = \Phi(u_\alpha) = \alpha$. We could control the relative accuracy of our importance sampling estimator by controlling the number of simulation runs k . Recall that since the importance sampling estimate $\hat{\nu}_q$ is unbiased, we can write $k \cdot \text{var} \hat{\nu}_q = U_q - \nu^2$, for more details see (5). Moreover, according to the central limit theorem the distribution of $\hat{\nu}_q$ is approximately normal. More precisely, $\mathcal{L}(\hat{\nu}_q) \approx N(\nu, \text{var} \hat{\nu}_q)$ for k large. Thus

$$\begin{aligned} \delta &= P(|\hat{\nu}_q - \nu| \leq \gamma\nu) \approx P(|Z\sqrt{\text{var} \hat{\nu}_q}| \leq \gamma\nu) \\ &= P\left(\left|Z\sqrt{\frac{U_q - \nu^2}{k}}\right| \leq \gamma\nu\right) = P\left(|Z| \leq \frac{\gamma\nu\sqrt{k}}{\sqrt{U_q - \nu^2}}\right). \end{aligned} \quad (22)$$

If we put $\delta = 1 - \alpha$ for a small α , desired number of simulation runs

$$k_{\gamma,\delta}^{\text{opt}} = \frac{u_{(1+\delta)/2}^2}{\gamma^2} \left(\frac{U_q}{\nu^2} - 1\right) = \frac{u_{1-\alpha/2}^2}{\gamma^2} \left(\frac{U_q}{\nu^2} - 1\right). \quad (23)$$

We should always set the desired level of precision and confidence before we start to simulate. Unfortunately, the equation (23) requires that we know U_q and ν beforehand. Obviously, we do not have this information so we must do something else.

In fact no procedure in which the run length is fixed before the simulations begin can be relied upon to produce a confidence interval that covers the true value with the desired probability level. In the author’s opinion, the two practical solutions are:

1. the use of sequential procedure;
2. the use of Stein’s two-step procedure.

Concerning the first approach, one uses the simulation outputs themselves to decide whether we already collected enough data, and therefore enough information, to stop the simulation. Detailed description can be found in Appendix B.

The second approach is a typical two-step procedure which in the first step estimates the unknown variability of the procedure using a fixed sample size n_1 and determines how many simulations to add to reach the prescribed accuracy with a given confidence.

How many simulations to run? (sequential approach) Let us turn to the sequential approach and assume $\nu = P(f(Z_p) \in E)$, where Z_p is a random variable defined on some space \mathbb{S} , subscript p denoting that P is associated probability measure and $f : \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{R}_d$ is a real valued function. To implement the importance sampling estimator of ν , we generate from some other probability measure (distribution), say Q , the \mathbb{S} -valued random variables $Z_q^{(1)}, \dots, Z_q^{(k)}$ and estimate unknown ν and U_q by

$$\widehat{\nu}_{q,k} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[f(Z_q^{(i)}) \in E]} \frac{dP}{dQ} \{Z_q^{(i)}\}$$

and

$$\widehat{U}_{q,k} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[f(Z_q^{(i)}) \in E]} \left[\frac{dP}{dQ} \{Z_q^{(i)}\} \right]^2.$$

With these values we can easily compute

$$k^*(k) = \frac{u_{(1+\delta)/2}^2}{\gamma^2} \left(\frac{\widehat{U}_{q,k}}{(\widehat{\nu}_{q,k})^2} - 1 \right) \tag{24}$$

and to stop the simulation if

$$k \geq k^*(k). \tag{25}$$

Sometimes, usually due to the laziness, we wish just to run a simulation for a certain number of times, say \tilde{k} , and to look at the output. Then we can use (23) to learn what “level of precision (accuracy)” we have attained. It is evident that the relative accuracy (precision) attained with the $100\delta\%$ confidence is given by

$$100 \frac{u_{(1+\delta)/2}}{\sqrt{\tilde{k}}} \sqrt{\frac{\widehat{U}_{q,\tilde{k}}}{(\widehat{\nu}_{q,\tilde{k}})^2} - 1}. \tag{26}$$

Remark 4.1. The above used setting seems to be too general with respect to the previous text. The reason is to state that the idea of importance sampling can be “directly” used not only for sums of independent real valued random variables but in much more general situations (spaces). However, notice that in most practical situations $\mathbb{S} = \mathbb{R}_n$, $E \subset \mathbb{R}_1$ is an interval; $Z_p^{(i)} \equiv (X_1^{(i)}, \dots, X_n^{(i)})$, where $X_j^{(i)}$ are iid rv’s with the distribution (probability measure) P and density $p(\cdot)$; $Z_q^{(i)} \equiv (Y_1^{(i)}, \dots, Y_n^{(i)})$, where $Y_j^{(i)}$ are iid rv’s with the distribution (probability measure) Q and density $q(\cdot)$; $f(Z_p^{(i)}) \equiv n^{-1} \sum_{j=1}^n X_j^{(i)}$ and $f(Z_q^{(i)}) \equiv n^{-1} \sum_{j=1}^n Y_j^{(i)}$; and

$$\frac{dP}{dQ} \{Z_q^{(i)}\} = \frac{\prod_{j=1}^n p(Y_j^{(i)})}{\prod_{j=1}^n q(Y_j^{(i)})}.$$

5 Fundamental theorem of system simulation

Let us consider a very general question in the field of system simulation, i.e.: *Should we bias the random variables at the input, at the output or at some intermediate point of the system?* To be more specific, let us consider the following example.

Example 5.1. Let U and V be two independent random variables with densities $p_s(\cdot)$ and $p_t(\cdot)$, respectively. Put $W = U + V$ and denote its density $p_r(\cdot)$. Suppose we are interested in estimating

$$\nu = P(W > a) = P(U + V > a). \quad (27)$$

Quite natural idea is to simulate iid random variables $U^{(1)}, \dots, U^{(k)}$ with marginal density $p_s(\cdot)$, iid random variables $V^{(1)}, \dots, V^{(k)}$ with marginal density $p_t(\cdot)$ and to consider $W^{(1)}, \dots, W^{(k)}$ obtained by the relation $W^{(i)} = U^{(i)} + V^{(i)}$, $i = 1, \dots, k$. Point out that the sequences $\{U^{(i)}\}$ and $\{V^{(i)}\}$ should be also independent each of other. Classical estimator of ν has the form

$$\hat{\nu}_{class} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[U^{(i)}+V^{(i)}>a]} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[W^{(i)}>a]}.$$

Aside that let us consider two types of importance sampling estimators, i.e., an “input estimator” $\hat{\nu}_{in}$ and an “output estimator” $\hat{\nu}_{ou}$. The first one is explicitly given by

$$\hat{\nu}_{in} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[\tilde{U}^{(i)}+\tilde{V}^{(i)}>a]} \cdot \frac{p_s(\tilde{U}^{(i)})p_t(\tilde{V}^{(i)})}{p_{\tilde{s}}(\tilde{U}^{(i)})p_{\tilde{t}}(\tilde{V}^{(i)})}, \quad (28)$$

where $\tilde{U}^{(i)}$ are iid random variables generated from some biasing density $p_{\tilde{s}}(\cdot)$ and $\tilde{V}^{(i)}$ are iid random variables generated from some other biasing density $p_{\tilde{t}}(\cdot)$.

The second estimator has the form

$$\hat{\nu}_{ou} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}[\widetilde{W}^{(i)} > a] \cdot \frac{p_r(\widetilde{W}^{(i)})}{p_{\tilde{r}}(\widetilde{W}^{(i)})}, \tag{29}$$

where $p_r(\cdot)$ is a density corresponding to W and $\widetilde{W}^{(i)}$ are iid random variables generated from some biasing density $p_{\tilde{r}}(\cdot)$. Both these estimators are unbiased so that the natural question arises: *Which of these two estimators has lower variance?* \square

Notice that the rest of this section is a bit more complicated and technical from the mathematical point of view. Nevertheless, we are convinced that its conclusions belong among the most interesting results in the field of system simulations.

At first we should note that in many situations an output formulation is practically impossible. If the system is (very) complicated, it may be impossible to calculate the biasing distribution at the output of the system. However, it may be possible to calculate the distribution at some intermediate point of the system.

More precisely, assume we are given two (Borel measurable) functions $g : \mathbb{R}_N \rightarrow \mathbb{R}_M$ and $h : \mathbb{R}_M \rightarrow \mathbb{R}_L$, which define the multiple-input multiple-output system

$$\xrightarrow{X_1, \dots, X_N} \boxed{g} \xrightarrow{Y_1, \dots, Y_M} \boxed{h} \xrightarrow{Z_1, \dots, Z_L}$$

Let (X_1, \dots, X_N) be arbitrary input vector, i.e., we consider (X_1, \dots, X_N) to be our “input” random variable and denote corresponding joint probability measure P_x . Put $(Y_1, \dots, Y_M) = g(X_1, \dots, X_N)$ and consider it to be an “intermediate” random variable with joint probability measure P_y . Finally, let $(Z_1, \dots, Z_L) = h(Y_1, \dots, Y_M)$ be an “output” random variable with joint probability measure P_z . Let f be a (Borel measurable) function, $f : \mathbb{R}_d \rightarrow \mathbb{R}_d$ and suppose we are interested in the quantity

$$\boldsymbol{\nu} = \mathbb{E}\left[f(Z_1, \dots, Z_L)\right] = \mathbb{E}\left[f(h(Y_1, \dots, Y_M))\right] = \mathbb{E}\left[f(h(g(X_1, \dots, X_N)))\right],$$

where $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \dots, \nu_d)$ is a d -dimensional vector.

Notation. In the sequel we denote by Q the biasing probability measure with a subscript indicating which random variables are being biased; for example, Q_x , Q_y or Q_z . Moreover, we assume that the original probability measures are absolutely continuous with respect to these measures, what guarantees the existence of the Radon-Nikodym derivatives dP_x/dQ_x , dP_y/dQ_y and dP_z/dQ_z . The “biased” random variables are written with a tilde over them. Thus, if $(\widetilde{X}_1^{(i)}, \dots, \widetilde{X}_N^{(i)})$ are generated to have measure Q_x , then $g(\widetilde{X}_1^{(i)}, \dots, \widetilde{X}_N^{(i)})$ will have measure Q_y and $h(g(\widetilde{X}_1^{(i)}, \dots, \widetilde{X}_N^{(i)}))$ will have measure Q_z . \square

Remark 5.1. As discussed already in Remark 4.1, in most practical situations we work with the iid samples so that

$$\frac{dP_x}{dQ_x}(x_1, \dots, x_N) = \frac{\prod_{j=1}^N p(x_j)}{\prod_{j=1}^N q(x_j)} \quad \square$$

Depending on at which point of the system we wish to bias, we define various estimators of ν , i.e.:

$$\begin{aligned} \widehat{\nu}^{in} &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k f(h(g(\tilde{X}_1^{(i)}, \dots, \tilde{X}_N^{(i)}))) \frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X}_1^{(i)}, \dots, \tilde{X}_N^{(i)}) \\ \widehat{\nu}^{me} &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k f(h(\tilde{Y}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Y}_M^{(i)})) \frac{dP_y}{dQ_y}(\tilde{Y}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Y}_M^{(i)}) \\ \widehat{\nu}^{ou} &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k f(\tilde{Z}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Z}_L^{(i)}) \frac{dP_z}{dQ_z}(\tilde{Z}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Z}_L^{(i)}) \end{aligned} \quad (30)$$

as the *input*, *intermediate* and *output* estimators. The superscript (i) on a random variable indicates which one of k independent simulation runs is under consideration. Each of these estimates are d -dimensional vectors

$$\widehat{\nu}^{in} = (\widehat{\nu}_1^{in}, \dots, \widehat{\nu}_d^{in}), \quad \widehat{\nu}^{me} = (\widehat{\nu}_1^{me}, \dots, \widehat{\nu}_d^{me}) \quad \text{and} \quad \widehat{\nu}^{ou} = (\widehat{\nu}_1^{ou}, \dots, \widehat{\nu}_d^{ou}).$$

Fundamental theorem of importance sampling Monte Carlo simulations reads as follows:

Theorem 5.1. *Under the setup given above it holds:*

$$\text{var } \widehat{\nu}^{in} \geq \text{var } \widehat{\nu}^{me} \geq \text{var } \widehat{\nu}^{ou},^1 \quad (31)$$

with the equality for the first inequality in (31) if and only if

$$\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X}_1^{(i)}, \dots, \tilde{X}_N^{(i)}) = s_{in}(\tilde{Y}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Y}_M^{(i)})$$

for some function $s_{in}(\cdot)$; and with the equality in (31) for the second inequality if and only if

$$\frac{dP_y}{dQ_y}(\tilde{Y}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Y}_M^{(i)}) = s_{ou}(\tilde{Z}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Z}_L^{(i)})$$

for some function $s_{ou}(\cdot)$.

¹This means that $\text{var } \widehat{\nu}_j^{in} \geq \text{var } \widehat{\nu}_j^{me} \geq \text{var } \widehat{\nu}_j^{ou}$ for each $j = 1, \dots, d$.

Důkaz. At first notice that

$$\frac{dP_y}{dQ_y}(\tilde{Y}) = \mathbb{E} \left[\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X}) \mid \tilde{Y} \right]$$

Without loss of generality we put $d = 1$, otherwise we will work with each dimension separately. Since the two estimators have the same mean, it suffices to compare the second moments of $\tilde{\mathbf{X}} = (\tilde{X}_1^{(i)}, \dots, \tilde{X}_N^{(i)})$ and $\tilde{\mathbf{Y}} = (\tilde{Y}_1^{(i)}, \dots, \tilde{Y}_N^{(i)})$. For the input estimator we have

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[f(h(g(\tilde{X})))^2 \frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X})^2 \right] &= \mathbb{E} \left[f(h(\tilde{Y}))^2 \frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X})^2 \right] \\ &= \mathbb{E} \left[f(h(\tilde{Y}))^2 \cdot \mathbb{E} \left[\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X})^2 \mid \tilde{Y} \right] \right], \end{aligned}$$

while for the intermediate estimator we have

$$\mathbb{E} \left[f(h(\tilde{Y}))^2 \frac{dP_y}{dQ_y}(\tilde{Y})^2 \right] = \mathbb{E} \left[f(h(\tilde{Y}))^2 \cdot \mathbb{E} \left[\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X}) \mid \tilde{Y} \right]^2 \right].$$

Now observe by Janssen's inequality

$$\mathbb{E} \left[\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X}) \mid \tilde{Y} \right]^2 \leq \mathbb{E} \left[\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X})^2 \mid \tilde{Y} \right]$$

This means that the general term for the input estimator has greater or equal second moment, and hence variance, than that of the intermediate estimator. We note also that we have equality in the Janssen's inequality if and only if $\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X})$ conditioned on \tilde{Y} is almost surely a constant dependent possibly on \tilde{Y} . This is equivalent to $\frac{dP_x}{dQ_x}(\tilde{X}) = s(\tilde{Y})$ for some deterministic function $s(\cdot)$. Detailed proof can be found in Bucklew and Gubner (2003). \square

Remark 5.2. Theorem 5.1 shows that when applying the importance sampling Monte Carlo method, one should bias as close to the output as possible, of course, if feasible.

A lot of times when one is designing a simulation methodology, we forget that we have almost always several possibilities available with regard to the bias point. If we just take distributions of the input random variables from the random number generator and use them to form the weight function, this is an input formulation. This is almost always the easiest way to proceed. If we can do some analysis up to some intermediate point of the system, and then bias the derived distributions at that intermediate point, then we have an intermediate formulation.

If we carry out the analysis all the way to the end, we have an output formulation, which sometimes means that we have an analytic solution and do not need to simulate at the first place. This seems wonderful, but we still must keep in mind that the knowledge of the distribution gives us an

analytical answer. Typically we still have to integrate obtained distribution over a complicated, possibly multidimensional sets, and it is well known that especially in such a case a Monte Carlo importance sampling technique can be more than useful. \square

Example 5.2. Suppose, for simplicity, that $h(g(x_1, \dots, x_N)) = \sum_{i=1}^N r(x_i)$ for some real function $r : \mathbb{R}_1 \rightarrow \mathbb{R}_1$. This means that the output and the intermediate estimators are the same. Suppose, moreover, that $dP_x(x_1, \dots, x_N) = \prod_{i=1}^N p(x_i)$, where $p(\cdot)$ is the input probability density. Choose the biasing distribution as

$$dQ_{x,\theta}(x_1, \dots, x_N) = \prod_{i=1}^N q_\theta(x_i) = \frac{\prod_{i=1}^N p(x_i) e^{\theta r(x_i)}}{(M_{r(X)}(\theta))^N}, \quad (32)$$

where $M_{r(X)}(\theta) = \mathbb{E} e^{\theta r(X)}$ is a moment generating function of the random variable $r(X)$. This type of the biasing distribution is in the literature called *exponential shift* or *exponential tilting*. Then

$$\begin{aligned} \frac{dP_x}{dQ_{x,\theta}}(\tilde{X}_1, \dots, \tilde{X}_N) &= \frac{\prod_{i=1}^N p(\tilde{X}_i)}{\prod_{i=1}^N p(\tilde{X}_i) e^{\theta r(\tilde{X}_i)}} [M_{r(X)}(\theta)]^N \\ &= [M_{r(X)}(\theta)]^N e^{-\theta \sum_{i=1}^N r(\tilde{X}_i)} \\ &\equiv [M_{r(X)}(\theta)]^N e^{-\theta \tilde{Y}} \equiv s(\tilde{Y}). \end{aligned}$$

Thus, in this sum of iid random variables with exponential shift bias distribution, no performance loss is induced using the simpler input formulation. Moreover, we will show in the Section 6 that this type of biasing densities is in many situations the “optimal choice” from the point of view of optimality induced by the large deviation principle. \square

6 Efficient importance sampling estimators

In this section we give a very general theorem regarding the variance rate of the importance sampling estimators, enabling the construction of efficient (from the point of view of large deviations) importance sampling procedures.

For every integer n let $Z_{p,n}$ be a random variable taking values in some space \mathbb{S}_n . Let $Z_{p,n}$ is distributed according to the probability measure P_n on \mathbb{S}_n . Instead of directly simulating $Z_{p,n}$ we choose to simulate from another \mathbb{S}_n -valued variable $Z_{q,n}$ distributed according to some other probability measure on \mathbb{S}_n , say Q_n . Let f_n be \mathbb{R}_d -valued measurable function on the space \mathbb{S}_n , i.e. $f_n : \mathbb{S}_n \rightarrow \mathbb{R}_d$. To create the importance sampling estimators we must assume that P_n is for all n absolutely continuous with respect to Q_n and hence the Radon-Nikodym derivative dP_\bullet/dQ_\bullet exist. Suppose we are interested in

$$\nu_n = P(n^{-1} f_n(Z_{p,n}) \in E), \quad E \subset \mathbb{R}_d, \text{ Borel set.}$$

The importance sampling estimator of ν_n is typically of the form

$$\widehat{\nu}_{q,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[n^{-1} f_n(Z_{q,n}^{(i)}) \in E]} \cdot \frac{dP_n}{dQ_n}(Z_{q,n}^{(i)}).$$

Following example demonstrates that in many practical situations $\widehat{\nu}_{q,n}$ is not so complicated as one might expect from the general setting described above.

Example 6.1. Let $\{X_i\}$ be a sequence of \mathbb{R}_1 -valued random variables. The density of (X_1, \dots, X_n) is denoted as $p(x_1, \dots, x_n)$. We are interested in estimating $\nu_n = P(n^{-1} \sum_{i=1}^n X_i \in E)$ for some $E \subset \mathbb{R}_1$ using the importance sampling principle. For that purpose we simulate another sequence of \mathbb{R}_1 -valued random variables $\{Y_i\}$, where the probability density of (Y_1, \dots, Y_n) is $q(y_1, \dots, y_n)$, and form the estimator

$$\widehat{\nu}_{q,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{[n^{-1} \sum_{j=1}^n Y_j^{(i)} \in E]} \cdot \frac{p(Y_1^{(i)}, \dots, Y_n^{(i)})}{q(Y_1^{(i)}, \dots, Y_n^{(i)})}.$$

To match up with the notation given above, it is sufficient to put for $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n) \in \mathbb{R}_n$ and $E \subset \mathbb{R}_n$

$$d = 1, \quad \mathbb{S}_n = \mathbb{R}_n, \quad Z_{p,n} = (X_1, \dots, X_n), \quad Z_{q,n} = (Y_1, \dots, Y_n),$$

$$P_n(E) = \int_E p(z_1, \dots, z_n) dz_1 \dots dz_n, \quad Q_n(E) = \int_E q(z_1, \dots, z_n) dz_1 \dots dz_n,$$

$$f_n(\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^n z_i \quad \text{and} \quad \frac{dP_n}{dQ_n}(\mathbf{z}) = \frac{p(z_1, \dots, z_n)}{q(z_1, \dots, z_n)}.$$

If, moreover, $\{X_i\}$ and $\{Y_i\}$ are mutually independent then $p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n p(x_i)$ and $q(y_1, \dots, y_n) = \prod_{i=1}^n q(y_i)$. \square

The crucial point in most simulations is to evaluate the variance of the estimator. Therefore, we would like to investigate the variance of the estimator $\widehat{\nu}_{q,n}$ as we vary k and n . Since $\widehat{\nu}_{q,n}$ is the average of k iid terms, $k \cdot \text{var}(\widehat{\nu}_{q,n})$ is a constant (keep in mind that n is fixed). It has been thoroughly studied in Section 4 how the variation changes as k , the number of simulation runs, varies. However, much more interesting question is: *How does the variance change if we vary the “large deviation parameter” n ?* The rest of this section is devoted to this problem. However, we suggest to take a look at first at the Appendix A.

Concerning the variance of the importance sampling estimator, we could see already several times, e.g. in (5), that $k \cdot \text{var}(\widehat{\nu}_{q,n}) = U_{q,n} - \nu_n^2 \geq 0$. This implies, in particular, that the asymptotic rate (in n) with which $U_{q,n}$ approaches zero cannot be greater than the rate in which ν_n^2 approaches zero. Suppose that we have the following limits existing, i.e.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \nu_n = -I \quad \text{and} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log U_{q,n} = -R; \quad (33)$$

then evidently $R \leq 2I$.

Definition 6.1. *If we have an importance sampling estimator $\hat{\nu}_{q,n}$ for which $R = 2I$, we say that corresponding importance sampling simulation procedure is efficient.* \square

Remark 6.1. This notion of the efficiency is crucial to the understanding of how to choose importance sampling simulation distribution. The philosophy is that if a family of simulation distributions is efficient according to Definition 6.1 then it is a good choice. \square

In (23) we derived the number of simulation runs k needed to achieve a $100\gamma\%$ accuracy with $100\delta\%$ confidence, being

$$k_{\gamma,\delta}^{opt} = \frac{u_{(1+\delta)/2}^2}{\gamma^2} \left(\frac{U_{q,n}}{\nu_n^2} - 1 \right).$$

As n grows then ν_n is going to zero exponentially fast, so that the number of simulation runs needed to achieve a given precision must also grow exponentially fast, unless and only unless, $U_{q,n}$ approaches zero exactly at the same rate as ν_n^2 . In other words, if sampling simulation distributions are not efficient then the number of simulation runs grow exponentially fast and the only exception is that $U_{q,n}$ approaches to zero at the same rate as ν_n^2 .

The philosophy of efficient simulation is based upon minimizing the asymptotics of the estimator variance rate to zero. It appears that in many rare simulation problems one should first consider the underlying large deviation theory of the problem. The reason for following this methodology is that by first embedding the problem as but one of a parametric sequence of problems (the parameter is n , the large deviation index), one can concern himself with maximizing the estimator variance rate to zero instead of minimizing the actual estimator variance itself. The mathematics of maximizing the variance rate is almost always far simpler than trying to minimize the actual variance over some class of simulation distributions. This is intuitive since large deviation framework is only trying to maximize a rate parameter instead of actual parameters. Trying to minimize analytically the estimator variance directly almost always leads to a very complicated functional minimization problem. Of course, when this minimization can be carried on, it is very desirable to do so. Unfortunately, in the vast majority of practical situations it cannot be done.

6.1 The variance rate of important sampling estimators

First we need to make a few definitions. For $\theta \in \mathbb{R}_d$ define, if the integral exists,

$$c_n(\theta) = \frac{1}{n} \log \left(\int \left[e^{\langle \theta, f_n(z) \rangle} \frac{dP_n}{dQ_n}(z) \right] dP_n(z) \right). \quad (34)$$

Notice that $c_n(\boldsymbol{\theta})$ is a convex function for each n . Further, if $c_n(\mathbf{0}) < \infty$ then we introduce for each n a probability measure μ_n by

$$\mu_n(E) = e^{-nc_n(\mathbf{0})} \cdot \int_E \left[\frac{dP_n}{dQ_n}(\mathbf{z}) \right] dP_n(\mathbf{z}), \quad E \subset \mathbb{S}_n, \ E \text{ Borel set.}$$

Let \mathbf{Y}_n be a \mathbb{S}_n -valued random variable distributed according to μ_n , then $\{f_n(\mathbf{Y}_n)\}$ is a sequence of \mathbb{R}_d -valued random variables. For $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_d$ we have the log-moment generating function sequence for these random variables of the form

$$\begin{aligned} \varphi_n(\boldsymbol{\theta}) &= \frac{1}{n} \log \mathbb{E} e^{\langle \boldsymbol{\theta}, f_n(\mathbf{Y}_n) \rangle} \\ &= \frac{1}{n} \log \int \left[e^{\langle \boldsymbol{\theta}, f_n(\mathbf{z}) \rangle} e^{-nc_n(\mathbf{0})} \frac{dP_n}{dQ_n}(\mathbf{z}) \right] dP_n(\mathbf{z}) = c_n(\boldsymbol{\theta}) - c_n(\mathbf{0}). \end{aligned} \tag{35}$$

Remark 6.2. Relation (35) together with the appendix suggests that the function $c_n(\boldsymbol{\theta})$ introduced in (34) might provide us with the response to our question concerning the change of the variance of $\widehat{\nu}_{q,n}$ as n changes. Indeed, this suggestion is true as confirmed by Theorem 6.1 giving us analogue of Cramér’s and Gärtner-Ellis’ theorems. \square

Definition 6.2. Let \mathbf{Y}_n be a \mathbb{S}_n -valued random variable distributed according to μ_n and $\lim_{n \rightarrow \infty} c_n(\boldsymbol{\theta}) = c(\boldsymbol{\theta})$. The variance rate function $R(\mathbf{x})$ is defined as

$$R(\mathbf{x}) = \sup_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_d} [\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle - c(\boldsymbol{\theta})], \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}_d.$$

Notation:

1. For every Borel set $E \subset \mathbb{R}_d$ we denote $\inf_{\mathbf{x} \in E} R(\mathbf{x})$ by $R(E)$.
2. For any Borel set $E \subset \mathbb{R}_d$ we denote E° its interior, \overline{E} its closure and ∂E the corresponding boundary, i.e. $\partial E = \overline{E} \setminus E^\circ$. \square

We are interested in the variance of the estimator $\widehat{\nu}_{q,n}$, which can be written in the notation of this section (compare also (5) or Section 4 for more simple setting) in the form $U_{q,n} - \nu_n^2$, where

$$U_{q,n} = \int \left[\mathbb{I}_{[n^{-1}f_n(\mathbf{z}) \in E]} \left(\frac{dP_n}{dQ_n}(\mathbf{z}) \right)^2 \right] dQ_n(\mathbf{z}).$$

Theorem 6.1. Let E be any Borel set such that $E^\circ \neq \emptyset$, $\overline{E} = \overline{E}^\circ$ and $0 < R(E) < \infty$. Then it holds

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log U_{q,n} = -R(E).$$

Důkaz.

$$\begin{aligned} U_{q,n} &= \int \left[\mathbf{I}_{[n^{-1}f_n(\mathbf{z}) \in E]} \left(\frac{dP_n}{dQ_n}(\mathbf{z}) \right)^2 \right] dQ_n(\mathbf{z}) \\ &= e^{nc_n(\mathbf{0})} \int_{n^{-1}f_n(\mathbf{z}) \in E} d\mu_n(\mathbf{z}), \end{aligned}$$

so that

$$\begin{aligned} n^{-1} \log U_{q,n} &= c_n(\mathbf{0}) + n^{-1} \log \int_{n^{-1}f_n(\mathbf{z}) \in E} d\mu_n(\mathbf{z}) \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} c(\mathbf{0}) - \inf_{\mathbf{x} \in E} \sup_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_d} \left[\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle - c(\boldsymbol{\theta}) - c(\mathbf{0}) \right] \\ &= - \inf_{\mathbf{x} \in E} \sup_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_d} \left[\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle - c(\boldsymbol{\theta}) \right] = -R(E). \end{aligned}$$

For more details see Smith (2000). \square

Remark 6.3. If we put $Q_n = P_n$, which is the direct Monte Carlo choice, we have

$$\begin{aligned} U_{q,n} &= \int \mathbf{I}_{[n^{-1}f_n(\mathbf{z}) \in E]} dQ_n(\mathbf{z}) = \int \mathbf{I}_{[n^{-1}f_n(\mathbf{z}) \in E]} dP_n(\mathbf{z}) \\ &= P(n^{-1}f_n(\mathbf{z}) \in E) = \nu_n \end{aligned}$$

and Theorem 6.1 reduces to the Gärtner-Ellis' Theorem A.3. This is not surprising since k times the variance of the Monte Carlo estimator is just $\nu_n(1 - \nu_n) = \nu_n - \nu_n^2 \approx \nu_n$ for very small ν_n . The asymptotic rate of the variance for the Monte Carlo estimator should be (and is) the same as the asymptotic rate of the probabilities ν_n . \square

Example 6.2. (Laplace distribution – revisited)

In Example 3.4 we were interested in estimating

$$\nu = P \left(\left| \frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} Z_j \right| > 3 \right), \quad (36)$$

where $\{Z_j\}$ are independent Laplace (double exponentially) distributed random variables with the density $q_1(x)$. To that purpose we used the variance scaling method with the density

$$q_a(x) = e^{-|x|/a} / 2a, \quad x \in \mathbb{R}_1, \quad a > 1. \quad (37)$$

Let us take a look how Theorem 6.1 can help us to find an “optimal value” of a . First notice that $E = (3, \infty)$ and $R(E) = R_a(3)$. Second calculate $c_a(\theta)$, i.e.

$$c_a(\theta) = \log \left(\int \frac{p^2(x)}{q_a(x)} e^{\theta x} dx \right) = \log \frac{2a - 1}{(1/a - 2)^2 - \theta^2}.$$

Now we compute $R_a(3) = \sup_{\theta} [\theta 3 - c_a(\theta)]$. Taking the derivative we have

$$\theta_{\{3,a\}} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 9(1/a - 2)^2}}{3},$$

$$R_a(3) = 3\theta_{\{3,a\}} - \log(1 - 2a) + \log\left(\theta_{\{3,a\}}^2 - \left(\frac{1}{a} - 2\right)^2\right).$$

The value of a for which $R_a(3)$ is maximized must be found numerically. We find easily that $a_{opt} = 3.05897$.

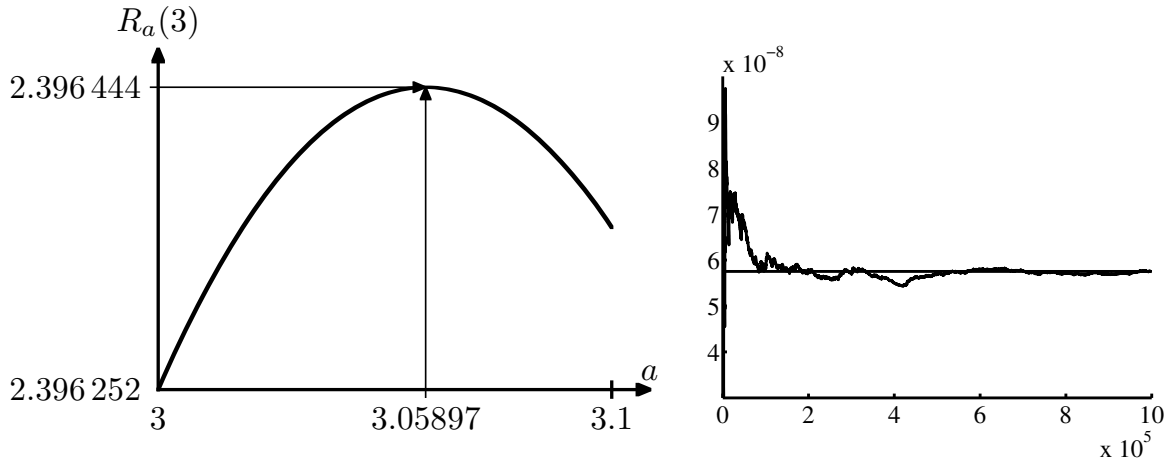


Figure 6.1: Plot of $R_a(3)$ and of one simulation trajectory.

The final estimate $\hat{\nu}_{q_{a_{opt}}}$ is (compare (17)) of the form

$$\hat{\nu}_{q_{a_{opt}}} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I} \left[\left| \frac{1}{10} \sum_{j=1}^{10} \tilde{X}_j^{(i)} \right| > 3 \right] \cdot \exp \left\{ 10 \log a_{opt} + \frac{1-a_{opt}}{a_{opt}} \cdot \sum_{j=1}^n |\tilde{X}_j^{(i)}| \right\}, \tag{38}$$

where $\tilde{X}_j^{(i)}$ follow Laplace distribution with the density $q_{a_{opt}}(x)$. \square

Remark 6.4. A guiding principle in the efficient estimation of rare-event probabilities by Monte Carlo is that importance sampling based on the change of measure suggested by a large deviations analysis can reduce variance by many orders of magnitude. In a variety of settings this approach has led to estimators that are optimal in an asymptotic sense. Let us summarize again the basic philosophy of the rare events simulations as considered in this report.

At first we attempt to “embed” that probability as but one member of the sequence of problems that are controlled by a large deviations theorem. For example, when we are interested in

$$\nu = P\left(10^{-1} \sum_{i=1}^{10} X_i > 3\right),$$

where $\{X_i\}$ are iid rv’s, the natural embedding is in the sequence of problems

$$\nu_n = P\left(n^{-1} \sum_{i=1}^n X_i > 3\right),$$

whose large deviation theory is given by the Cramér theorem. From this sequence we can define a sequence of simulation distributions that is efficient and to choose from it simulation distribution corresponding to $n = 10$ that will be used in computer simulation.

As with any procedure based on asymptotics, this approach can time to time give unsatisfactory results. Aside that, it is also important to keep in mind that:

- An efficient biasing scheme is not always available or, more frequently, one is not able to find the biasing distribution in a closed form.
- Choosing the biasing distribution must be done with a care. Whenever we bias the distribution we pay a certain loss. While it is hoped we will gain back more than this cost by sampling in a correct region, it is not guaranteed for sure.
- There exist examples, however, in which importance sampling estimators based on a large deviations change of measure have provably poor performance. The estimators can have variance that decreases at a slower rate than a naive estimator, variance that increases with the rarity of the event, and even infinite variance. For each such an example, the authors usually provide an alternative estimator with provably efficient performance. A common feature of all these examples is that they allow more than one way for a rare event to occur; so that the alternative estimators give explicit weight to lower probability paths neglected by leading-term asymptotics. For details see Glasserman and Kou (1995) or Glasserman and Wang (1997), among others. \square

6.2 Minimum and dominant rate points

We now present some models for which we can explicitly describe families of efficient importance sampling distributions. Suppose that given a sequence of \mathbb{S}_n -valued random variables $\{Z_{p,n}\}$, $\{f_n(Z_{p,n})\}$ is a sequence of \mathbb{R}_d -valued random variables. We are interested in simulating to obtain estimates of the probability

$$\nu_n = P(n^{-1}f_n(Z_{p,n}) \in E),$$

where E is a Borel set such that $E^\circ \neq \emptyset$, $\overline{E} = \overline{E^\circ}$. Denote

$$\varphi(\boldsymbol{\theta}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(\boldsymbol{\theta}) = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \mathbb{E} e^{\langle \boldsymbol{\theta}, f_n(Z_{p,n}) \rangle},$$

$$I(\boldsymbol{x}) = \sup_{\boldsymbol{\theta}} [\langle \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{x} \rangle - \varphi(\boldsymbol{\theta})] \quad \text{and} \quad I(E) = \inf_{\boldsymbol{x} \in E} I(\boldsymbol{x}),$$

and assume that $\varphi_n(\cdot)$ sequence satisfies the standard assumptions A1, A2 and A3 stated in Appendix A.2.

Definition 6.3. a) A point w is called a minimum rate point of the set E if $I(w) = I(E)$.

b) A point w is called a dominating point of the set E if w is a unique point such that:

1. $w \in \partial E$;
2. $\exists \theta_w \in \mathbb{R}_d$, θ_w unique, such that $\nabla \varphi(\theta_w) = w$;
3. $E \subset \{x \mid \langle \theta_w, x - w \rangle \geq 0\}$. □

Remark 6.5. From the convex function theory, for details see, e.g., Rockafellar (1970), it turns out that if dominating point exists then it is a unique minimum rate point. □

To see what the existence of a dominating point brings, we assume further that E has a dominating point w . Then it holds

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \nu_n = -I(w) = \sup_{\theta} [\langle \theta, w \rangle - \varphi(\theta)] = -[\langle \theta_w, w \rangle - \varphi(\theta_w)].$$

Hence ν_n^2 has a rate $-2I(w)$ and for any sequence of simulation (biasing) distributions $\{Q_n\}$ it must hold

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log U_{q,n} \geq -2I(w). \tag{39}$$

Notice that by Definition 6.1 any sequence of simulation distributions that meets in (39) an equality is efficient.

There exist, in general, many importance sampling procedures which are efficient according to Definition 6.1. One universal, but of no practical use as we could see already several times, is

$$dQ_n = \nu_n^{-1} \cdot \mathbf{I}_{[n^{-1} f_n(Z_{p,n}) \in E]} dP_n,$$

which gives $U_{q,n} = \nu_n^2$ and $k \cdot \text{var} \hat{\nu}_{q,n} = 0$. As already said several times, this choice is of a little interest since it requires exact knowledge of ν_n , which is what we are trying to estimate.

Another appealing choice is the family of exponential shifts, introduced in the simpler setting already in Remark 5.2, that is

$$dQ_n = \frac{e^{\langle \psi, f_n(z) \rangle} dP_n(z)}{\int e^{\langle \psi, f_n(z') \rangle} dP_n(z')}. \tag{40}$$

The rationale behind this choice is the following theorem, that shows that the use of the biasing density (40) results in efficient simulation.

Theorem 6.2. Suppose that E has a dominating point w . Then the sequence of simulation distributions given by

$$dQ_n = e^{-n\phi_n(\theta_w)} e^{\langle \theta_w, f_n(z) \rangle} dP_n(z)$$

is efficient.

Till the end of this section we will consider some specific probability models and corresponding “efficient” simulation strategies for them.

Example 6.3. (Sum of iid \mathbb{R}_d -valued random variables)

Consider for a moment the following “classical” setup, i.e., let $\{\mathbf{X}_i\}$ be a sequence of iid \mathbb{R}_d -valued random vectors with density (probability mass function, eventually) $p(\cdot)$. Suppose we are interested, for some measurable function $f : \mathbb{R}_d \rightarrow \mathbb{R}_{d'}$, to estimate the probability

$$\nu_n = P\left(n^{-1} \sum_{i=1}^n f(\mathbf{X}_i) \in E\right), \quad E \subset \mathbb{R}_{d'}.$$

Denote moment generating function of $f(\mathbf{X}_1)$ by $M_f(\theta)$ ($= \mathbb{E} e^{\langle \theta, f(\mathbf{X}_1) \rangle}$, $\theta \in \mathbb{R}_{d'}$). Instead of simulating $\{\mathbf{X}_i\}$ from $p(\cdot)$ we simulate another sequence of iid \mathbb{R}_d -valued random variables $\{\mathbf{Y}_i\}$ with the density (mass function) $q(\cdot)$ and use the estimator

$$\hat{\nu}_n = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{I}_{\left[n^{-1} \sum_{j=1}^n f(\mathbf{Y}_j^{(i)}) \in E\right]} \prod_{j=1}^n \frac{p(\mathbf{Y}_j^{(i)})}{q(\mathbf{Y}_j^{(i)})}.$$

According to the setup of the Section 6.1 we have $\mathbb{S}_n = \mathbb{R}_{n \cdot d}$, $Z_{p,n} = (\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_n)$, $Z_{q,n} = (\mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_n)$ and for $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}_d$, $f_n(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n) = \sum_{i=1}^n f(\mathbf{y}_i)$. Thus, for $\theta \in \mathbb{R}_{d'}$,

$$\begin{aligned} c_n(\theta) &= \frac{1}{n} \log \left[\prod_{j=1}^n \frac{p(\mathbf{y}_j)}{q(\mathbf{y}_j)} e^{\langle \theta, \sum_{j=1}^n f(\mathbf{y}_j) \rangle} \prod_{j=1}^n p(\mathbf{y}_j) d\mathbf{y}_1 \dots d\mathbf{y}_n \right] \\ &= \log \left(\int \frac{p^2(\mathbf{y})}{q(\mathbf{y})} e^{\langle \theta, f(\mathbf{y}) \rangle} d\mathbf{y} \right) = c(\theta) \end{aligned}$$

Notice that some conditions allowing the change $\int \prod \dots = \prod \int \dots$ must be fulfilled.

Suppose E has a dominating point w . This means that

$$I(E) = I(w) = \sup_{\theta} [\langle \theta, w \rangle - \log M_f(\theta)] = \langle \theta_w, w \rangle - \log M_f(\theta_w),$$

where θ_w satisfies $w = \nabla \log M_f(\theta_w)$. Put

$$q_0(\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}) e^{\langle \theta_w, f(\mathbf{x}) \rangle}}{M_f(\theta_w)}. \quad (41)$$

Then, taking into account Definition 6.2, we have

$$\begin{aligned} R_{q_0}(w) &= \sup_{\theta} \left[\langle \theta, \mathbf{x} \rangle - \log \int p(\mathbf{x}) e^{\langle \theta - \theta_w, f(\mathbf{x}) \rangle} d\mathbf{x} - \log M_f(\theta_w) \right] \\ &= \sup_{\theta} [\langle \theta, w \rangle - \log M_f(\theta - \theta_w) - \log M_f(\theta_w)] = 2I(E), \end{aligned}$$

where the maximum occurs for $\theta = 2\theta_w$. Thus we see that this choice of $q(\cdot)$ is efficient. \square

It is interesting to notice that if we restrict our simulation (biasing) random variables to be independent then the exponential shift $q_0(\cdot)$ is efficient simulation distribution choice. In fact, it holds more, namely:

Theorem 6.3. *In the setting of Subsection 6.3 the simulation distribution $q_0(\cdot)$ given by (41) is efficient iid simulation distribution and is unique.*

Remark 6.6. In the other words, in the iid sum setting the unique efficient iid simulation distribution is the exponential shift whose shift parameter is chosen so that its mean value corresponds to the dominating point of the set under consideration. \square

With the help of Theorem 6.3 we will “reconsider” several examples already studied in the previous paragraphs. The first two of them show that in some situations either the mean shifting or the variance scaling are indeed the intelligent choice when looking for the biasing distribution.

Example 6.4. (Normal distribution – estimation of a tail probability of the mean)

Let $\{X_j\}$ be independent one dimensional Gaussian random variables with $\mathbb{E} X_j = 0$, $var X_j = 1$ and we are interested in estimating $P(n^{-1} \sum_{j=1}^n X_j > T)$. We have already calculated $M_X(\theta) = e^{\theta^2/2}$, so that $(\log M_X(\theta))' = \theta$ and θ_T is a solution of $T = \theta_T$. Then the efficient exponential shift density is of the form

$$q_T(x) = \frac{\phi(x)e^{\theta_T x}}{M_X(\theta_T)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-(x-T)^2/2},$$

which means that the exponential shift efficient distribution corresponds to a mean shift of the original distribution. If $\{X_j\} \sim N(0, \sigma^2)$ then we get easily in the same manner that the exponential shift efficient distribution is $N(T, \sigma^2)$. \square

Example 6.5. (χ_n^2 distribution – estimation of the tail probability of the mean)

Let $\{X_j\}$ be independent one dimensional Gaussian random variables with $\mathbb{E} X_j = 0$ and $var X_j = 1$ and suppose we are interested in estimating $P(n^{-1} \sum_{j=1}^n X_j^2 > T)$. In this setting we have $f(x) = x^2$ and $M_f(\theta) = (1 - 2\theta)^{-1/2}$, $\theta < 1/2$. Then the efficient exponential shift density is of the form

$$q_\theta(x) = e^{\theta x^2} e^{-x^2/2} \frac{\sqrt{1-2\theta}}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \frac{1}{1-2\theta}}} e^{-x^2 / (2 \frac{1}{1-2\theta})},$$

i.e. the density of $N(0, \frac{1}{1-2\theta})$. It is easy to find that $\theta_T = (T - 1)/2T$, so that

$$q_T(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} e^{-x^2/2T}.$$

This means that a variance scaling of the original $N(0, 1)$ Gaussian distribution is an efficient simulation strategy in this setting. \square

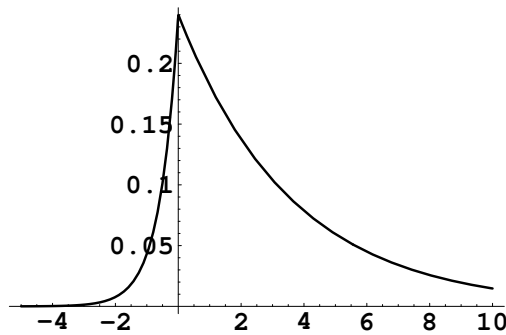
Example 6.6. (Laplace distribution – estimation of a tail probability of the mean)

Let $\{X_j\}$ be independent Laplace distributed random variables with the density (14) and we are again interested in estimating $P(n^{-1} \sum_{j=1}^n X_j > T)$. This situation has been already considered in Example 3.4 and Example 6.2. It is easy to calculate $M_X(\theta) = 1/(1 - \theta^2)$ for $|\theta| < 1$ and to verify the standard conditions A1.–A3. Then $(\log M_X(\theta))' = 2\theta/(1 - \theta^2)$ and $\theta_T = (\sqrt{1 + T^2} - 1)/T$ leading to the efficient exponential shift density of the form

$$q(x) = \frac{p(x)e^{\theta_T x}}{M(\theta_T)} = \frac{1}{2}e^{-|x|}e^{(\sqrt{1+T^2}-1)x/T} \cdot \left(1 - \frac{(\sqrt{1+T^2} - 1)^2}{T^2}\right).$$

If $\{X_j\}$ follow Laplace distribution with the density $q_a(x) = e^{-|x|/a}/2a$, $x \in \mathbb{R}_1$, $a > 1$, we will arrive analogously to $\theta_{T,a} = (\sqrt{a^2 + T^2} - a)/aT$ and the efficient exponential shift density of the form

$$q_a(x) = \frac{p(x)e^{\theta_{T,a} x}}{M(\theta_{T,a})} = \frac{1}{2a}e^{-|x|/a}e^{(\sqrt{a^2+T^2}-a)x/aT} \cdot \left(1 - \frac{(\sqrt{a^2+T^2} - a)^2}{T^2}\right).$$



Efficient exponential shift density $q(x)$ for $T = 3$. □

Example 6.7. (Binomial distribution – estimation of a tail probability)

Let $\{X_j\}$ be independent $Alt(p)$ distributed random variables and we are interested in estimating $P(n^{-1} \sum_{j=1}^n X_j > z)$. Then $M_X(\theta) = 1 - p + pe^\theta$ and $\theta_z = \log \frac{z(1-p)}{p(1-z)}$, leading to the efficient exponential shift density of the form $q_z(x) = z^x(1 - z)^{1-x}$, $x = 0, 1$, which corresponds to the random variable \tilde{X}_j with alternative distribution with $P(\tilde{X}_j = 1) = z$.

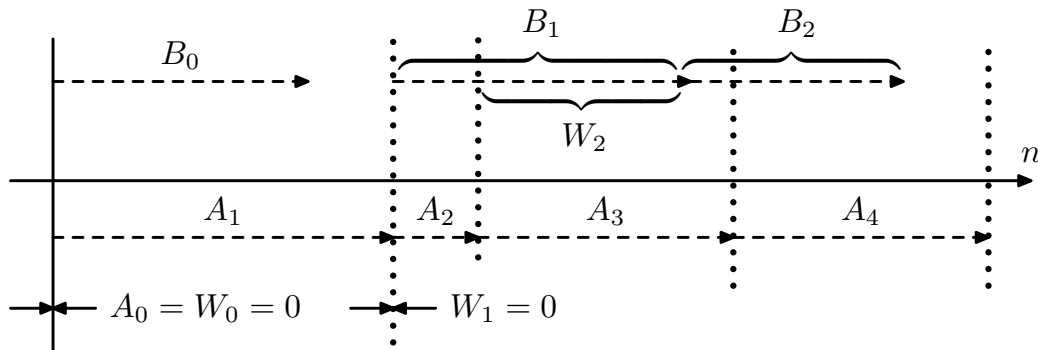
A desired efficient exponential shift density could be also derived directly. At first it is evident that the distribution must be again of the alternative type. Then by the mean shift property the mean value must be equal to the dominating point of the set, being z in our case. Therefore the efficient iid simulation distribution is alternative with the probability of success equal to z . □

6.3 Single-server queues and rare events simulation

The $GI/GI/1$ queue is a single server queue with customers denoted by $n = 0, 1, \dots$. Denote by $\{A_n\}$ the sequence of inter arrival times and by $\{B_n\}$ the sequence of service times. The basic assumption of the $GI/GI/1$ queues is that the sequences $\{A_n\}$ and $\{B_n\}$ are mutually independent and each of them is formed by the iid random variables. We denote by $F(\cdot)$ the distribution of the interarrival times and by $G(\cdot)$ the distribution of the service times.

Definition 6.4. *The waiting time (delay) W_n of the n^{th} customer is the time he spends from the arrival until he starts the service.*

The situation is illustrated in the following figure.



It is easy to check that for the sequence of waiting times following recursion² holds, i.e.

$$W_{n+1} = \max(0, W_n + B_n - A_{n+1}), \tag{42}$$

where $A_0 = W_0 = 0$. It is well known from the literature that if $\kappa = \mathbb{E} B_1 / \mathbb{E} A_1 < 1$ then the queue of the waiting times is stable and W_n is asymptotically distributed as W , so called equilibrium waiting time. In such a case it is natural to study,

$$P(W > x), \quad x \in \mathbb{R}_1^+, x \text{ large.}$$

Theorem 6.4. *Let $\{A_n\}$ be the sequence of interarrival times, $\{B_n\}$ the sequence of service times, $X_{n+1} = B_n - A_{n+1}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ and $Y_n = \sum_{i=1}^n X_i$. Then it holds:*

$$W_n = \max\{Y_n, Y_n - Y_1, \dots, Y_n - Y_{n-1}, 0\}, \quad n = 1, 2, \dots \tag{43}$$

$$W_n = Y_n - \min_{0 \leq k \leq n} Y_k \quad n = 1, 2, \dots \tag{44}$$

Důkaz. Let us start with the relation (43). By Lindley recursion the positive increments of $\{W_n\}$ are at least those of the $\{Y_n\}$, so that

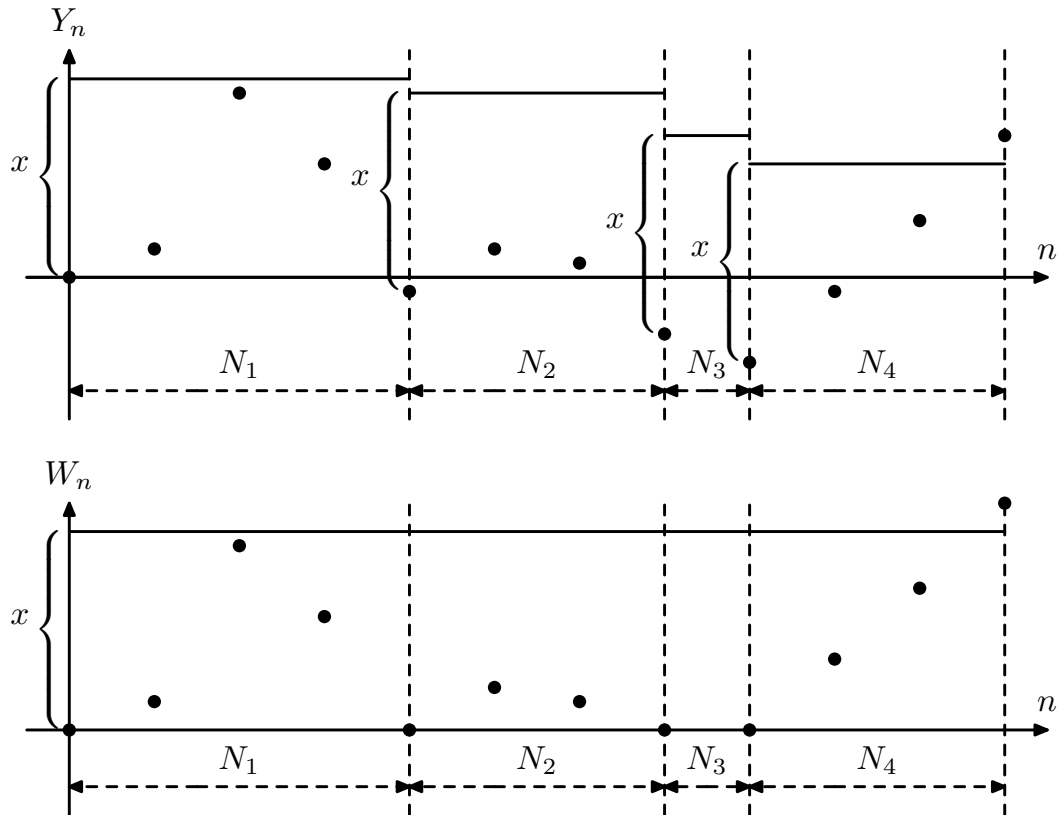
$$W_n - W_{n-k} \geq Y_n - Y_{n-k}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

²This recursion is in the literature known under the name Lindley recursion.

Since $W_{n-k} \geq 0$, then $W_n \geq Y_n - Y_{n-k}$ for $k = 0, 1, \dots, n$, and we have the “greater than” part of (43).

For the converse notice that either $W_n = Y_n$ or $W_n = Y_n - Y_{n-k}$ for some k . The first case occurs if $Y_k \geq 0$ for all $k \leq n$. Otherwise, $W_i = 0$ for some $l \leq n$ and letting k be the last such l , the Lindley recursion yields $W_n = Y_n - Y_{n-k}$ and hence (43).

Concerning the relation (44), it follows evidently from (43). □



Examples of behavior of the sequences $\{Y_n\}$ and $\{W_n\}$.
 N_i are the random variables describing (random) number
 before random walk Y_n establishes new minimum.

Remark 6.7. Notice that W_n measures the current height of the random walk $\{Y_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ above its minimal value. Whenever this random walk establishes a new minimum, i. e. $Y_n = \min_{0 \leq k \leq n} Y_k$, the process forgets its past and starts again in the sense that for all $j \geq 0$

$$Y_{n+j} - \min_{0 \leq k \leq n+j} Y_k = Y_{n+j} - Y_n - \min_{0 \leq k \leq j} (Y_{n+k} - Y_n).$$

Notice that we can look at W_n as on a random walk with one reflecting boundary. This situation is well known in the world of sequential testing, on-line quality control etc., and has been thoroughly studied in the literature. □

³Let U_1, U_2, \dots be iid real-valued random variables. Define $S_0 = z, S_n = S_0 + \sum_{i=1}^n U_i, n = 1, 2, \dots$. The sequence S_n is called a random walk on the real line starting at the point z .

If we assume that random variables X_i are iid, being the case of $GI/GI/1$ queues, and reverse the time, we get easily that $Y_n - Y_{n-k} = \sum_{i=n+k-1}^n X_i$ is distributed as Y_k , so that

$$W_n = \max_{0 \leq k \leq n} \{Y_n - Y_k\} \text{ is distributed as } \max_{0 \leq k \leq n} \{Y_k\}.$$

This means that the distribution of the waiting times is the same as the distribution of $\max_{0 \leq k \leq n} \{Y_k\}$.

Denote

$$W = \max_{0 \leq n \leq \infty} W_n \quad \text{and} \quad E = \max_{0 \leq n \leq \infty} Y_n.$$

Then it holds

$$P(W > x) = P(E > x) = P(T_x > x),$$

where T_x denotes the first time when random walk $\{Y_n\}$ exceeds threshold x .

We get easily that

$$\begin{aligned} \phi(\theta) &= n^{-1} \log \mathbb{E} e^{\theta Y_n} = \log \mathbb{E} e^{\theta X_{n+1}} = \log \mathbb{E} e^{\theta(B_n - A_{n+1})} \\ &= \log M_B(\theta) + \log M_A(-\theta), \end{aligned}$$

where $\theta \in \mathbb{R}_1$ and $M_B(\theta)$ and $M_A(\theta)$ are moment generating functions for distribution of service and interarrival times.

Denote the probability distribution function of X_1 by $p(x)$ and chose the biasing density of the form

$$q(x) = p(x)e^{\theta^* x},$$

where

$$\lim_{x \rightarrow \infty} x^{-1} \log P(T_x < \infty) = -\theta^*.$$

It can be shown that this choice of the biasing density is efficient.

Example 6.8. MI/MI/1 queue.

We assume that the distribution of service and interarrival times are independent and exponential with parameters μ and λ with $\lambda < \mu$ to ensure stability. Then

$$M_B(\theta) = \frac{\mu}{\mu - \theta} \quad \text{for } \theta < \mu \quad \text{and} \quad M_A(-\theta) = \frac{\lambda}{\lambda + \theta} \quad \text{for } \theta > -\lambda.$$

The distribution of $\{X_i\}$ is easily obtained by convolution giving

$$p_X(z) = \frac{\lambda\mu}{\lambda + \mu} e^{-\mu z} e^{(\lambda + \mu) \min(0, z)}, \quad z \in \mathbb{R}_1.$$

Solving for θ^* gives $\theta^* = \mu - \lambda$, leading to the biasing density of the form

$$q(z) = \frac{\lambda\mu}{\lambda + \mu} e^{-\lambda z} e^{(\lambda + \mu) \min(0, z)}, \quad z \in \mathbb{R}_1.$$

This means that the biasing density $q(x)$ can be obtained from the original density $p_X(x)$ by switching μ and λ . By the other words, the simulation strategy is to simulate an unstable queue with arrival intensity μ and service intensity λ . \square

A Basics of the large deviation theory

It may appear surprising that many (but not all) of the rare events people wish to simulate are the results of the occurrences of a large deviation events. In order to develop good simulation strategies for these events, it is good to understand something of the probability theory associated with them. The aim of this appendix is to introduce two of the basic concepts, i.e. Cramér's and Gärtner-Ellis theorems.

Suppose S_n is a sum of n iid random variables $\{X_i\}$ with $\mathbb{E} X_1 = m$ that exists and is finite. By the law of large numbers $n^{-1}S_n$ is converging to m . Suppose we ask what is $P(|n^{-1}S_n - m| \geq r)$. Cramér's theorem states that for r fixed

$$P(|n^{-1}S_n - m| \geq r) \approx f(n) \exp\{-n\mathcal{J}_C(r)\},$$

where $\mathcal{J}_C(r) \geq 0$ is so called *exponential rate constant* and $\{f(n)\}$ is a sequence going to zero more slowly than exponential. Typically $\{f(n)\}$ is going to zero as $const \cdot n^\kappa$, $\kappa < 0$. This sequence is difficult to be computed so that large deviation results are typically given in the form

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log P(|n^{-1}S_n - m| \geq r) = -\mathcal{J}_C(r).$$

A.1 Cramér's theorem (iid case)

Definition A.1. Let $\{X_i\}$ are iid random variables with $\mathbb{E} X_1 = m < \infty$ and $M_X(\theta) = \mathbb{E} e^{\theta X_1}$ is corresponding moment generating function. Then corresponding Cramér's large deviation rate function is defined as

$$\mathcal{J}_C(x) = \sup_{\theta \in \mathbb{R}_1} [\theta x - \log M_X(\theta)]. \quad \square$$

Recall first basic properties of $\mathcal{J}_C(x)$.

Theorem A.1. It holds:

1. $\mathcal{J}_C(x)$ is convex.
2. $\mathcal{J}_C(x)$ has its minimum at m and $\mathcal{J}_C(m) = 0$.
3. $\mathcal{J}_C(x)$ is non decreasing for $x > m$ and $\mathcal{J}_C(x)$ non increasing for $x < m$.
4. $M_X(\theta)$ is differentiable in the interior of its effective domain $D_M^\circ = \{\theta | M_X(\theta) < \infty\}$ and $M'_X(\theta) = \mathbb{E}(X_1 e^{\theta X_1})$.

5. If θ_x is a solution of $M'_X(\theta_x)/M_X(\theta_x) = x$ then $\mathcal{J}_C(x) = \theta_x x - \log M_X(\theta_x)$.

Důkaz. First given by Cramer (1938). More general setting and complete proof can be found, e.g., in Dembo and Zeitouni (1998). □

Notation: For any subset $H \subset \mathbb{R}_1$ will denote $\inf_{x \in H} \mathcal{J}_C(x)$ by $\mathcal{J}_C(H)$.

Example A.1. It is easy to verify that:

1. If $X_1 \sim N(0, 1)$ then $M_X(\theta) = e^{\theta^2/2}$ and $\mathcal{J}_C(x) = x^2/2$.
2. If $X_1 \sim \text{Alt}(p)$ then $M_X(\theta) = (1 - p) + pe^\theta$ and

$$\mathcal{J}_C(x) = \begin{cases} x \log(x/p) + (1 - x) \log((1 - x)/(1 - p)), & 0 \leq x \leq 1, \\ \infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

3. If $X_1 \sim \text{Exp}(\lambda)$ then $M_X(\theta) = \lambda/(\lambda - \theta)$ for $\theta < \lambda$ and

$$\mathcal{J}_C(x) = \begin{cases} \lambda x - 1 - \log(\lambda x), & x > 0, \\ \infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

4. If $X_1 \sim U[0, 1]$ then $M_X(\theta) = \theta^{-1}(e^\theta - 1)$ and

$$\mathcal{J}_C(x) = \sup_{\theta} [\theta x - \log(\theta^{-1}(e^\theta - 1))],$$

which unfortunately does not have a closed form solution. Nevertheless, one can find desired value quite easily numerically.

□

Theorem A.2. (*Cramér's theorem*)

Let $\{X_i\}$ are iid random variables, $\mathbb{E} X_1 = m < \infty$ and $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$. Then it holds:

For every closed subset $F \subset \mathbb{R}_1$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log P(n^{-1} S_n \in F) \leq - \inf_{x \in F} \mathcal{J}_C(x);$$

for every open subset $G \subset \mathbb{R}_1$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log P(n^{-1} S_n \in G) \geq - \inf_{x \in G} \mathcal{J}_C(x).$$

Důkaz. First given by Cramer (1938). More general setting and complete proof can be found, e.g., in Dembo and Zeitouni (1998). □

Remark A.1. One of the most interesting aspects of this theorem is that the asymptotics of the probability of the sample average lying in some set away from the mean depend essentially on one point. Indeed, the logarithmic asymptotic of $P(n^{-1}S_n \in (m + \epsilon, m + 2\epsilon))$ is the same as for $P(n^{-1}S_n \in (m + \epsilon, \infty))$. A point of a set where $\mathcal{J}_C(x)$ attains its minimum is called a *minimum rate point of that set* and the Cramér's theorem states that the minimum set point(s) of the set essentially determine the asymptotic rate with which its probability goes to zero. \square

Remark A.2. One should point out that the asymptotic upper bound of the Cramér's theorem holds for every n , not just n large enough. This means that if $a > m$ then

$$P(n^{-1}S_n \in [a, b]) \leq \exp \{ -n\mathcal{J}_C(a) \} \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

In the communications and information theory is this upper bound usually called the *Chernoff's bound*. \square

Remark A.3. Proof of the Cramér's theorem, not presented here due to the lack of place, heavily depends on transforming original random variables $\{X_i\}$ into another random variables $\{X_i^{\theta_y}\}$ with the distribution function

$$P(X_i^{\theta_y} < x) = \frac{\int_{-\infty}^x e^{\theta_y z} dP(z)}{M_X(\theta_y)},$$

where $X_i \sim P$ and θ_y is the point such that $\mathcal{J}_C(y) = \theta_y y - \log M_X(\theta_y)$. This distribution has variety of names and applications. The primary reason for this “shift of the probability mass” of the original random variables is that the mean value of $\{X_i^{\theta_y}\}$ equals the minimum rate point of the set under consideration, allowing to establish asymptotically efficient (from the point of view of large deviations) estimators. Notice that this type of distributions can be found in the literature under different names, e.g., *twisted* or *tilted distribution*, the *exponential change of measure* etc. \square

A.2 Gärtner-Ellis theorem

Cramér first presented his theorem in 1938. Since then the theory has been considerably broadened. One of the most useful generalizations is due to Gärtner (1977) and Ellis (1984). These authors dispense with assumptions about the independence structure of the random variable sequence and work entirely with assumptions on a sequence of moment generating functions. Their methods thus allow large deviation results to be derived for dependent random processes such as Markov chains, functionals of Gaussian random processes etc. However, as pointed out M. Janžura, generality of the Gärtner-Ellis approach is a bit dubious. On one hand this approach covers triangular arrays as we will see in Example A.5. On the other hand:

- One must assume what should hold “naturally”.

- The assumptions, especially those concerning the smoothness of the limit function, are quite strong.
- The results do not have so nice interpretation from the point of view of the information theory.

Suppose we have some infinitive sequence of \mathbb{R}_d -valued random vectors $\{\mathbf{Y}_n\}$ and no (direct) assumption is done about their dependence structure. Define for $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_d$

$$\varphi_n(\boldsymbol{\theta}) = n^{-1} \log \mathbb{E} e^{\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_n \rangle}. \tag{45}$$

It is evident that $\varphi_n(\boldsymbol{\theta})$ is convex (use Hölder inequality to check it). We now list four assumptions, so called *standard assumptions*, for any sequence of convex functions $\varphi_n(\cdot)$.

- A1. $\varphi(\boldsymbol{\theta}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(\boldsymbol{\theta})$ exists⁴ for all $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_d$, where we allow ∞ both as a limit value and an element of the sequence $\{\varphi_n(\boldsymbol{\theta})\}$.
- A2. The origin belongs to the interior⁵ of D_φ^o and $\varphi(\cdot)$ itself is lower continuous.
- A3. $\varphi(\cdot)$ is essentially smooth⁶.
- A4. $\varphi(\cdot)$ is strictly convex.

Definition A.2. Let $\{\mathbf{Y}_n\}$ are \mathbb{R}_d -valued random vectors and $\varphi(\boldsymbol{\theta})$ is a function introduced in A1. Then corresponding Gärtner-Ellis large deviation rate function is defined as

$$\mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x}) = \sup_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_d} [\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle - \varphi(\boldsymbol{\theta})].$$

Notation: Analogously as above, for any subset $H \subset \mathbb{R}_d$ we will denote $\inf_{\mathbf{x} \in H} \mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x})$ by $\mathcal{J}_{GE}(H)$.

Remark A.4. If $\varphi(\cdot)$ satisfies A.2.–A.4. then it is the convex conjugate of $\mathcal{J}_{GE}(\cdot)$

$$\varphi(\boldsymbol{\theta}) = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}_d} [\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \rangle - \mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x})].$$

□

Theorem A.3. (*Gärtner-Ellis theorem*) Let $\{\mathbf{Y}_n\}$ are \mathbb{R}_d -valued random vectors and $\mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x})$ corresponding Gärtner-Ellis large deviation rate function.

⁴Notice that D_φ^o of $\varphi(\cdot)$ is convex, and thus $\varphi(\cdot)$ is convex being a limit of convex functions over a convex set.

⁵Remind that we have always $\mathbf{0} \in D_\varphi^o$ because $\varphi(\mathbf{0}) = 0 < \infty$.

⁶A convex function $\varphi(\cdot)$ is called *essentially smooth* if it is differential everywhere in D_φ^o , D_φ^o is nonempty and $\lim_{i \rightarrow \infty} |\nabla \varphi(x_i)| = \infty$ whenever $\{x_i\}$ is a sequence in D_φ^o converging to a boundary point of D_φ^o .

1. Assume A1. Then for every compact subset $K \subset \mathbb{R}_d$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log P(n^{-1} \mathbf{Y}_n \in K) \leq - \inf_{\mathbf{x} \in K} \mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x}).$$

2. Assume A1 and A2. Then for every closed subset $F \subset \mathbb{R}_d$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log P(n^{-1} \mathbf{Y}_n \in F) \leq - \inf_{\mathbf{x} \in F} \mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x}).$$

3. Assume A1 and A3. Then for every open subset $G \subset \mathbb{R}_d$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log P(n^{-1} \mathbf{Y}_n \in G) \geq - \inf_{\mathbf{x} \in G} \mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x}).$$

Důkaz. See Gärtner (1977) and Ellis (1984). □

To point out in an informal fashion what the differences between Cramér’s and Gärtner-Ellis theorems are, Table A.1 show the relevant quantities and results for each theorem in the scalar variable setting.

<i>Cramér</i>	<i>Gärtner-Ellis</i>
$S_n = \sum_{i=1}^n X_i, \{X_i\}$ iid R_1 -valued	Y_n
$\log M_X(\theta) = \log \mathbb{E} e^{\theta X_1} = n^{-1} \log \mathbb{E} e^{\theta S_n}$	$\phi(\theta) = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \mathbb{E} e^{\theta Y_n}$
$\mathcal{J}_C(x) = \sup_{\theta} [\theta x - \log M_X(\theta)]$	$\mathcal{J}_{GE}(x) = \sup_{\theta} [\theta x - \phi(\theta)]$
$P(n^{-1} S_n \in E) \approx f_C(n) e^{-n \mathcal{J}_C(E)}$	$P(n^{-1} Y_n \in E) \approx f_{GE}(n) e^{-n \mathcal{J}_{GE}(E)}$

Table A.1: Basic differences between Cramér’s and Gärtner-Ellis approaches.

Finally, we give several examples that rely on the Gärtner-Ellis approach.

Example A.2. Consider the autoregressive process

$$X_n = \alpha X_{n-1} + \varepsilon_n, \quad n = 1, 2, \dots,$$

where $|\alpha| < 1$, $X_0 = 0$ and ε_i are iid random variables with $\mathbb{E} \varepsilon_1 = 0$. We are interested in $P(Y_n > y)$, where $y > 0$ and $Y_n = \sum_{i=1}^n X_i$.

It is easy to show that Y_n can be written in the form

$$Y_n = \frac{\alpha^n - 1}{\alpha - 1} \varepsilon_1 + \frac{\alpha^{n-1} - 1}{\alpha - 1} \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_n.$$

If we reverse the time, i.e. put $\varepsilon_i^* = \varepsilon_{n-i+1}$ and denote $Z_i = \frac{1-\alpha^i}{1-\alpha} \cdot \varepsilon_i^*$, then $Y_n = \sum_{i=1}^n Z_i$. Taking into account independence of ε_i we have

$$e^{n\varphi_n(\theta)} = \prod_{i=1}^n M_{Z_i}(\theta),$$

so that

$$\varphi_n(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log M_{Z_i}(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log M_\varepsilon\left(\theta \cdot \frac{1-\alpha^i}{1-\alpha}\right).$$

This implies that

$$\varphi_n(\theta) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \log M_\varepsilon\left(\frac{\theta}{1-\alpha}\right).$$

Hence, the asymptotics of the sum Y_n is the same as the asymptotics of a sum of iid random variables with the same distribution as $\varepsilon_1/(1-\alpha)$.

a) Let ε_i be independent $N(0, 1)$ distributed random variables. Then

$$M_{Z_i}(\theta) = \exp\left\{\frac{\theta^2}{2} \left(\frac{1-\alpha^i}{1-\alpha}\right)^2\right\},$$

so that

$$\begin{aligned} \varphi_n(\theta) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\theta^2}{2} \left(\frac{1-\alpha^i}{1-\alpha}\right)^2 \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\theta^2}{2} \cdot \frac{1}{(1-\alpha)^2} = \frac{1}{(1-\alpha)^2} \cdot \log M_{X_1}(\theta) \\ &= \frac{1}{(1-\alpha)^2} \cdot \log M_{\varepsilon_1}(\theta), \end{aligned}$$

being in an agreement with the general result obtained above.

We get easily that

$$\mathcal{J}_{GE}(x) = \frac{x^2(1-\alpha)^2}{2}.$$

b) Consider now another type of errors, which are more and more common in (ultraprecise) digital measurement systems, i.e. let

$$P(\varepsilon_1 = 1/2) = P(\varepsilon_1 = -1/2) = 1/2.$$

Then it holds for $\forall \alpha \in (0, 1)$ that $M_{\varepsilon_1/(1-\alpha)}(\theta) = \cosh(\theta/2(1-\alpha))$ and

$$\mathcal{J}_{GE}(x) = \sup_{\theta} \left[\theta x - \log \left(\cosh \frac{\theta}{2(1-\alpha)} \right) \right].$$

From here we get $\theta_x = 2(1-\alpha) \operatorname{arc tanh}(2(1-\alpha)x)$, so that for $|x| < \frac{1}{2(1-\alpha)}$

$$\mathcal{J}_{GE}(x) = 2x(1-\alpha) \operatorname{arc tanh}(2(1-\alpha)x) - \log \left[\sqrt{\frac{1+2(1-\alpha)x}{1-2(1-\alpha)x}} \sqrt{\frac{1-2(1-\alpha)x}{1+2(1-\alpha)x}} \right],$$

and $\mathcal{J}_{GE}(x) = \infty$ otherwise. □

Example A.3. Let $\{\mathbf{Y}_n\}$ be a sequence of independent d -dimensional Gaussian random vectors with the mean value $\boldsymbol{\mu}$ and covariance matrix $\boldsymbol{\Sigma}$ which is of a full rank. The moment generating function is well known to be

$$\mathbb{E} e^{\langle \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y} \rangle} = e^{\langle \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\mu} \rangle + \boldsymbol{\theta}' \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{\theta} / 2},$$

so that

$$\mathcal{J}_{GE}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}).$$

The situation for $d = 1, \mu = 0$ and $\Sigma = 1$ has been considered in Example 3.2. \square

Example A.4. Let $E \sim \text{Exp}(1)$ and $\{X_i\}$ are independent $N(1, 1)$ distributed random variables that are jointly independent of E . We are interested in

$$P\left(E + \sum_{i=1}^n X_i > nA\right), \quad A \in \mathbb{R}_1.$$

Define $Y_n = E + \sum_{i=1}^n X_i$. Thanks to the independence we have

$$\mathbb{E} e^{\theta Y_n} = \mathbb{E} e^{\theta E + \theta \sum_{i=1}^n X_i} = \mathbb{E} e^{\theta E} e^{\theta \sum_{i=1}^n X_i} = \mathbb{E} e^{\theta E} \cdot (\mathbb{E} e^{\theta X_1})^n.$$

We know from Example A.1 that

$$M_E(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{1-\theta}, & \theta < 1, \\ \infty, & \theta \geq 1, \end{cases} \quad \text{and} \quad M_{X_1}(\theta) = e^{\theta + \theta^2/2},$$

so that

$$n^{-1} \log \mathbb{E} e^{\theta Y_n} = n^{-1} \log \mathbb{E} e^{\theta E} + n^{-1} \log (\mathbb{E} e^{\theta X_1})^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \theta + \theta^2/2, \quad \theta < 1.$$

This means that

$$\varphi(\theta) = \begin{cases} \theta + \theta^2/2, & \theta < 1, \\ \infty, & \theta \geq 1. \end{cases}$$

Notice that the standard assumptions A1 and A4 hold while A2 and A3 do not. Concerning A2, 0 is in the interior of D_φ^0 but $\varphi(\cdot)$ is not closed because $\{\theta \in \mathbb{R}_1 : \varphi(\theta) \leq t\} = [-1 - \sqrt{2t + 1}, 1)$ is not closed. A3 fails because $\varphi(\cdot)$ is not steep. Analogously we might construct another examples to demonstrate the situations when other standard assumptions do not hold.

Now we can calculate the large deviation rate function

$$\mathcal{J}_{GE}(x) = \sup_{\theta} [\theta x - \varphi(\theta)] = \sup_{\theta < 1} [\theta x - \theta - \theta^2/2] = \begin{cases} (x - 1)^2/2, & x < 2, \\ x - 3/2, & x \geq 2. \end{cases}$$

Since A1 holds, we can use this upper bound to the true rate for compact sets A . The use for closed general sets and to open sets fails.

This example shows that adding even one “heavy-tailed” random variable to a sample average can significantly distort the large deviation asymptotics

from one might expect. In this example the usual reaction is to think that addition of just one exponential random variable to a very large sum of iid normal random variables will not make much difference in the overall scope of the things. Counter intuitively this turns out to be false. \square

Example A.5. Suppose that $\{X_i^{(n)}\}$ is a collection of independent random variables, where $\{X_i^{(n)}\}$ is uniform on the points $\{0, \frac{1}{n}, \dots, \frac{n-1}{n}\}$ and put $Y_n = \sum_{i=1}^n X_i^{(n)}$. We are interested in

$$P(n^{-1}Y_n > 0.7) = P\left(n^{-1} \sum_{i=1}^n X_i^{(n)} > 0.7\right).$$

Notice that $\{X_i^{(n)}\}$ form for $n = 1, 2, \dots$ triangular array. Therefore, Cramér’s theorem cannot be used since the distribution of random variables in the sum changes with n , so that Gärtner-Ellis theorem must be used instead.

Taking into account that $\{X_i^{(n)}\}$ are for each n independent and $M_{X_1^{(n)}}(\theta) = \frac{1}{n} \cdot \frac{e^\theta - 1}{e^{\theta/n} - 1}$, we get

$$\begin{aligned} \varphi_n(\theta) &= n^{-1} \log \mathbb{E} e^{\theta Y_n} = n^{-1} \log \left(\mathbb{E} e^{\theta X_1^{(n)}}\right)^n = \\ &= n^{-1} \log \left[\frac{1}{n} \frac{e^\theta - 1}{e^{\theta/n} - 1}\right]^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \log \left(\frac{e^\theta - 1}{\theta}\right) = \varphi(\theta). \end{aligned}$$

Interesting point, however not surprising, is that $\varphi_n(\theta)$ converges to the moment generating function of the random variable Y with (continuous) uniform distribution on $[0, 1]$. The rate function is thus

$$\mathcal{J}_{GE}(x) = \sup_{\theta} \left[\theta x - \log \left(\frac{e^\theta - 1}{\theta}\right) \right],$$

which do not have a closed form solution. Numerically we can easily find that $\mathcal{J}_{GE}(0.7) \approx 0.2528$ giving $\theta_x \approx 2.67$. \square

B Stein’s two step procedure

It is well known that the length of the confidence interval for the mean of $N(\mu, \sigma^2)$ depends on the observations (measurements). Let us consider the simplest case. Let X_1, X_2, \dots, X_n be random sample from $N(\mu, \sigma^2)$ with both μ and σ^2 unknown. Confidence interval for μ with the coefficient of confidence (reliability) $1 - \alpha$ is given by

$$\left(\bar{X}_n - \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\alpha/2, n-1}, \bar{X}_n + \frac{s}{\sqrt{n}} t_{1-\alpha/2, n-1} \right), \tag{46}$$

where

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i, \quad s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2}$$

and $t_{1-\alpha/2, n-1}$ denotes 100 $(1-\alpha/2)\%$ quantile of the Student's t -distribution with the $n-1$ degrees of freedom. The length of this interval is

$$2t_{1-\alpha/2, n-1} \frac{s}{\sqrt{n}},$$

is evidently the function of unknown s .

The construction of the interval (46) is based on the following well known fact. We have an estimator (in our case \bar{X}_n) of unknown mean value μ with the distribution $N(\mu, \sigma^2/n)$. Aside that we have an estimator (in our case s^2) of unknown variance σ^2 , which has the distribution as $\sigma^2 \chi_{n-1}^2/(n-1)$ and is independent of \bar{X}_n . Finally, we can apply the fact that the ratio

$$\frac{\bar{X}_n - \mu}{\sigma} \sqrt{n} \bigg/ \sqrt{\frac{s^2}{\sigma^2}}$$

has Student's t -distribution with $n-1$ degrees of freedom.

There offers also the following idea, i. e. to establish the number of observations n during the experiment "randomly" in such a way that

$$2t_{1-\alpha/2, n-1} \frac{s}{\sqrt{n}} \leq d,$$

where d is given constant. In such a case we can have desired length of the interval bounded by the prescribed size d .

Another possibility is to imagine the problem in the way that we would like to "plan the size of the sample" X_1, X_2, \dots, X_n in such a way that

$$P\left(|\bar{X} - \mu| < d\right) = 1 - \alpha, \quad (47)$$

where d is given number. Probability (47) can be rewritten in the form

$$P\left(\frac{|\bar{X} - \mu|}{\sigma} \sqrt{n} < \frac{d}{\sigma} \sqrt{n}\right) = 1 - \alpha,$$

from where easily follows

$$\Phi\left(\frac{d}{\sigma} \sqrt{n}\right) = 1 - \frac{\alpha}{2}, \quad \text{resp.} \quad n = \frac{\sigma^2}{d^2} u_{1-\alpha/2}^2.$$

Due to the fact that we want to have the n as small as possible and that $n \in \mathbb{N}$, better (more precise) choice is

$$n = \min \left\{ k \mid k \in \mathbb{N}, k \geq \frac{\sigma^2}{d^2} u_{1-\alpha/2}^2 \right\}.$$

We cannot find such a n provided σ^2 is unknown. Nevertheless, let us imagine that we can find an estimator s^2 of the unknown variance σ^2 based

on ν degrees of freedom such that $\nu s^2/\sigma^2$ has the distribution χ_ν^2 and that we shall fix \tilde{n} as

$$\tilde{n} = \min \left\{ k \mid k \in \mathbb{N}, k \geq a s^2 \right\}. \quad (48)$$

If we shall realize the random sample of the size \tilde{n} , then conditional distribution of $\bar{X}_{\tilde{n}}$ for given $\tilde{n} = n$ will be $N(\mu, \sigma^2/n)$, i.e.

$$\begin{aligned} P\left(|\bar{X}_{\tilde{n}} - \mu| < d \mid \tilde{n} = n\right) &= P\left(\frac{|\bar{X}_n - \mu|}{\sigma} \sqrt{n} < \frac{d}{\sigma} \sqrt{n}\right) = \\ &= P\left(\frac{(\bar{X}_n - \mu)^2}{\sigma^2} n < \frac{d^2}{\sigma^2} n\right) = P\left(V^2 < \frac{d^2}{\sigma^2} n\right), \end{aligned}$$

where V has distribution $N(0, 1)$. Moreover, due to the choice of \tilde{n} according to (48) we have

$$\frac{d^2}{\sigma^2} \tilde{n} \geq \frac{d^2}{\sigma^2} a s^2,$$

so that

$$P\left(V^2 < \frac{d^2}{\sigma^2} \tilde{n}\right) \geq P\left(V^2 \leq \frac{d^2}{\sigma^2} a s^2\right). \quad (49)$$

According to the assumption about s^2 we know that s^2/σ^2 has the distribution like χ_ν^2/ν . Unconditional probability $P(|\bar{X}_n - \mu| < d)$ than can be calculated as

$$\int_0^\infty P\left(|\bar{X}_{\tilde{n}} - \mu| < d \mid \tilde{n} = n\right) f(s^2) ds^2.$$

Therefore, according to (49)

$$P\left(|\bar{X}_n - \mu| < d\right) \geq \int_0^\infty P\left(V^2 \leq d^2 a w\right) f(w) dw (\equiv I_1), \quad (50)$$

where $f(w)$ is density of the random variable χ_ν^2/ν . Integral I_1 on the right hand side of (50) is equal to

$$P\left(\frac{V^2}{W} \leq d^2 a\right),$$

where V and W are independent, $V \sim N(0, 1)$ and $W \sim \chi_\nu^2/\nu$. It is evident that $I_1 = P(F_{1,\nu} \leq d^2 a)$, so that for the fulfilment of the requirement (47) the number a must be taken such that

$$P\left(F_{1,\nu} \leq d^2 a\right) = 1 - \alpha,$$

from where easily

$$a = \frac{F_{1,\nu}(1 - \alpha)}{d^2} \left(\equiv \frac{t_{1-\alpha/2,\nu}^2}{d^2} \right),$$

where $F_{1,\nu}(1-\alpha)$ is $100(1-\alpha)\%$ quantile of the F -distribution with 1 and ν degrees of freedom. Notice that within this second formulation the number d corresponds to the half of the length of the confidence interval!

The use of the general approach described above is “evident”. In the case of our simulations it is their “splitting into two steps”. More precisely, consider for simplicity the basic situation described in Section 3, where we estimate $\nu = \mathbb{E} \eta(X)$ using the importance sampling estimator

$$\widehat{\nu}_{q,k} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \eta(Y^{(i)}) \frac{p(Y^{(i)})}{q(Y^{(i)})},$$

$Y^{(1)}, \dots, Y^{(k)}$ being a random sample from a biasing density $q(\cdot)$.

- First, we fix the preliminary number of simulations k , e.g. according to the previous experience, simulate $Y^{(1)}, \dots, Y^{(k)}$ and calculate both $\widehat{\nu}_{q,k}$ and its sample variance $s_{\widehat{\nu}_{q,k}}^2$.
- Second, we set

$$N = \min \left\{ k \mid k \in \mathbb{N}, k \geq \frac{s_{\widehat{\nu}_{q,k}}^2}{(\gamma \widehat{\nu}_{q,k})^2} t_{1-\alpha/2, n-1}^2 \right\},$$

γ being prescribed accuracy of desired estimator (for details see Section 4).|

- Third, we simulate another random variables $Y^{(k+1)}, \dots, Y^{(N)}$ and return

$$\widehat{\nu}_{q,N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta(Y^{(i)}) \frac{p(Y^{(i)})}{q(Y^{(i)})},$$

being the final estimator of ν with desired accuracy.

C Historical remarks

The *importance sampling* idea, that is of focusing on the region(s) of importance so as to save computational resources springs from the paper Marschal (1956). Since that time it has been several times reinvented under different names and became a part of classical simulation methods. Notice, however, that it is but one of a variety of variance reduction techniques well known to and used by the simulation practitioners. The notion of the conditional importance sampling first introduced by Srinivasan (at least in the engineering literature) under the name *g*-method. The notion of input versus output importance sampling estimators was first posed (at least in the engineering literature) by Hahn and Jeruchin (1987). The basic theorem comes from Bucklew and Gubner (2003). A readable introduction to the subject of the importance sampling can be found in Srinivasan (2002).

Cramer (1938) is usually credited with presenting the first *large deviation asymptotic expansion*. He gave not only the exponential rate but also an expansion for slowly varying constants in front of the exponential for the case of iid random variables with a continuous component and for the case of infinite intervals (such as $(0, \infty)$). Chernoff (1952) later showed that whatever the type of random variable (discrete, continuous or mixed) the large deviation rate function gives the correct exponential rate in the iid case. This original work was extended in various directions. Gartner (1977) is credited with being the first to consider looking only at the convergence properties of the moment generating function of a sequence of random variables. He assumed throughout that $M_{\bullet}(\theta) < \infty \forall \theta$. His results were generalized to the form presented in this report by Ellis (1984), one of the pioneers in the use of convex analysis in the theory of large deviations.

Bounding (or estimating) the “fine structure” of rare event probabilities has a long history in communications theory. *Chernoff’s bound* is the most frequently resorted to communications theory technique for these sorts of situations. Chernoff’s (1952) original paper was concerned with the asymptotic discernibility of two iid sequences of random variables. He showed that the logarithmic rate of the probability of error to zero was given by the now-called *Chernoff entropy*, i.e.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log P(\text{error given first } n \text{ observations}) = \inf_{\alpha} \log H(\alpha),$$

where $H(\alpha) = \int (dp/dw)^{\alpha} (dq/dw)^{1-\alpha} dw$, where p and q are the distributions of one element of the sequence under the two hypotheses and w is any measure dominating them. Applying Markov’s inequality, one can obtain so called Chernoff’s bound, i.e.

$$P(\text{error given first } n \text{ observations}) \leq (\inf_{\alpha} H(\alpha))^n.$$

Chernoff’s result can be regarded as a particular application to the case of likelihood ratio tests of the large deviations theorem of Cramér. Myriad other work followed.

Reference

- [1] Bucklew J.A. (1990). *Large Deviations Techniques in Decision, Simulation and Estimation*. J. Wiley, New York.
- [2] Bucklew J.A. (2004). *Introduction to Rare Events Simulation*. Springer-Verlag, Heidelberg.
- [3] Bucklew J.A. and Gubner J.A. (2003). *Input versus output analysis in the importance sampling. Monte Carlo simulation of systems*. IEEE Transactions on Signal Processing **51**, 152–159.
- [4] Bucklew J.A. and Radeke R. (2003). *On the Monte Carlo simulation of digital communication systems in Gaussian noise*. IEEE Transactions on Communications **51**, 267–274.

- [5] Chernoff H. (1952). *A measure of asymptotic efficiency for tests of a hypothesis based on sums of random variables*. Annals of Mathematical Statistics **23**, 493–507.
- [6] Cramér H. (1938). *Sur un nouveau théorème-limite de la théorie des probabilités*. Actualités Scientifiques et Industrielles **736**, Colloque consacré à la théorie des probabilités, Vol. 3. Hermann, Paris, 5–23.
- [7] Dembo A. and Zeitouni O. (1998). *Large Deviation Techniques and Applications, 2nd ed.* Springer-Verlag, New York.
- [8] Dieker A.B. and Mandjes M. (2005). *On asymptotically efficient simulation of large deviation probabilities*. Adv. in Appl. Probab. **37**, 539–552.
- [9] Ellis R. (1984). *Large deviations for a general class of random vectors*. Annals of Probability **12**, 1–12.
- [10] Ellis R. (1985). *Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag, New York.
- [11] Gärtner J. (1977). *On large deviations from the invariate measure*. Theory of Probability and its Applications **22**, 24–39.
- [12] Glasserman P. and Kou S-G. (1995). *Analysis of an importance sampling estimator for tandem queues*. ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation **5**, 22–42.
- [13] Glasserman P. and Wang Y. (1997). *Counterexamples in importance sampling for large deviations probabilities*. The Annals of Applied Probability **7**, 731–746.
- [14] Hahn P. and Jeruchim M. (1987). *Developments in the theory and application of importance sampling*. IEEE Transactions on Communications **35**, 706–714.
- [15] Lehtonen T. and Nyrhinen H. (1992). *Simulating level crossing probabilities by importance sampling*. Advances in Applied Probability **24**, 858–874.
- [16] Marschal A. (1956). *The use of multi-stage sampling schemes in Monte Carlo computing*. In: Symposium on Monte Carlo Methods, M. Meyer ed., J. Wiley, New York.
- [17] Nelson W.B. (2005). *A bibliography of accelerated test plans*. IEEE Transactions on Reliability **54**, 194–197 and 370–373.
- [18] Ney P. (1983). *Dominating points and the asymptotics of large deviations for random walk in \mathbb{R}_d* . Annals of Probability **11**, 158–167.
- [19] Rockafellar R.T. (1970). *Convex Analysis*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey.
- [20] Smith P.J., Shafi M. and Gao H. (1997). *Quick simulation: A review of importance sampling techniques in communication systems*. IEEE Journal on Selected Areas in Communications **15**, 597–613.
- [21] Smith P.J. (2000). *Underestimation of rare events probabilities in importance sampling simulations*. Simulations **76**, 140–150.

- [22] Srinivasan R. (2002). *Importance Sampling*. Springer-Verlag, Berlin.
- [23] Stein Ch. (1945). *A two sample test for a linear hypothesis whose power is independent of the variance*. The Annals of Mathematical Statistics **16**, 243–258.

Acknowledgement: The paper has been prepared during the visit of the authors at the University Bordeaux 1 supported by Aclimat, PIDEA 02.134. Thanks go also to the project GAČR 201/06/0186 and MSM 0021620839.

Address: J. Antoch, MFF UK, KPMS, Sokolovská 83, 186 75 Praha 8 – Karlín

E-mail: jaromir.antoch@mff.cuni.cz

Markovské modely spolehlivosti software

Gejza Dohnal

Klíčová slova: Spolehlivost software, nehomogenní Poissonův proces, markovský proces.

Abstrakt: Většina matematických modelů spolehlivosti software předpokládá, že všechny chyby způsobující softwarové selhání jsou detekovatelné a beze zbytku opravitelné. Navíc se obvykle předpokládá, že při jejich odstraňování nejsou vnášeny další chyby (perfect debugging). Tento předpoklad lze použít v případě poměrně jednoduchých projektů (jednoduché webové aplikace, programy se stromovou architekturou). V případě složitých programových systémů se však tento požadavek ukazuje jako nereálný. Jeden z možných přístupů je aplikace Markovských modelů. Příspěvek ukazuje použití modelů hromadné obsluhy pro popis procesu odhalování a opravy chyb.

A Úvod

Spolehlivost software (*software reliability*) je pojem, který se začal rozvíjet zhruba před pětadvaceti lety – je tedy přibližně tak starý, jako tato konference. První modely z osmdesátých let – dnes už označované jako „klasické“ jsou neustále rozvíjeny a upřesňovány směrem k reálným softwarovým systémům. Matematické modely spolehlivosti jsou používány k ohodnocení stavu vývoje programových produktů, ke sledování provozuschopnosti software, stejně tak jako i ke kvantitativnímu ohodnocení technologie (nástrojů) softwarového inženýrství. *Spolehlivost* je zde obvykle chápána v užším smyslu, tedy spíše jen ve smyslu *bezporuchovosti*, to jest pravděpodobnosti, že počítačový program, či programový systém, bude schopen bezchybně pracovat v daném prostředí po určitou dobu. Ostatní aspekty spolehlivosti, jako je udržitelnost, opravitelnost, délka životního cyklu, zůstávají poněkud stranou zájmu matematiků.

V tomto příspěvku budu používat pojem „software“ pro označení počítačového programu či programového systému. Vlastnosti a funkce software jsou plně určeny jeho kódem. Při sledování spolehlivosti software se realizují dva procesy. Prvním je *proces testování*, jehož cílem je detekce vadného chování programu – poruchy. Druhým procesem je *odstraňování vad (debugging)*. *Vadou* zde chápeme jakoukoli chybu v programovém kódu, která může způsobit disfunkčnost programu, tedy jeho chování, odlišné od deklarovaných vlastností (dochází k chybné transformaci vstupních dat). Je zřejmé, že chyby v kódu mohou vzniknout pouze programátorskou činností při tvorbě programu a nevznikají používáním programu. *Porucha* nastává v okamžiku, kdy se toto vadné chování projeví. Změnou programového kódu může dojít k opravě chyby a tím k odstranění vadného chování. Při procesu odstraňování

vad se tedy neustále snižuje počet chyb v kódu a tím i pravděpodobnost jejich odhalení. Na druhé straně, spolehlivost software se tímto procesem zpravidla zvyšuje.

Základní matematické modely, používané pro modelování softwarové spolehlivosti jsou v literatuře rozdělovány zhruba do dvou skupin: modely doby mezi poruchami (*Times Between Failures – TBF Models*) a modely počtu výskytu chyb (*Fault Count – FC Models*).

B Modely doby mezi poruchami

Klasické modely z této skupiny předpokládají, že software obsahuje na počátku testování předem známý (odhadnutelný) počet N_0 vzájemně nezávislých chyb, se stejnou možností odhalení a že doby mezi odhalením jednotlivých chyb jsou nezávislé náhodné veličiny.

Jelinski–Moranda (JM) De–Eutrophication Model navíc předpokládá, že odhalené chyby jsou okamžitě odstraněny a nejsou přitom vneseny žádné nové chyby. Doby mezi odhalením chyby jsou nezávislé náhodné veličiny s exponenciálním rozdělením. Intenzita odhalení chyb se mění přímo úměrně počtu odhalených chyb i podle vztahu

$$\lambda_{JM}(t_i) = \phi(N_0 - i), \quad i = 1, 2, \dots, N_0,$$

kde ϕ je konstanta úměrnosti, t_i je doba od odhalení i -té chyby. Distribuční funkce doby T_i do odhalení další chyby, bylo-li již odhaleno i chyb, je ve tvaru

$$P(T_i < t_i) = \lambda_{JM} \exp(\lambda_{JM} t_i), \quad i = 1, 2, \dots, N_0.$$

Schick–Wolverton (SW) Model je založen na stejných předpokladech, jako JM model. Kromě toho předpokládá, že intenzita chyb je závislá také na čase t_i od odhalení poslední chyby. Časová závislost je opět ve tvaru přímé úměry:

$$\lambda_{SW}(t_i) = \phi(N_0 - i) t_i, \quad i = 1, 2, \dots, N_0.$$

Intenzita chyb je v tomto modelu po odhalení chyby nulová a s narůstajícím časem roste až do odhalení další chyby. Variantou je model s kvadratickou závislostí na čase

$$\lambda_{SW}(t_i) = \phi(N_0 - i) (-at_i^2 + bt_i + c), \quad i = 1, 2, \dots, N_0.$$

Goel–Okomuto Imperfect Debugging Model respektuje možnost děletrvajících oprav. Předpoklad okamžitého odstranění chyby v předchozích modelech je příliš omezující a tak byl vytvořen model, který rozšiřuje JM model a tento předpoklad alespoň částečně odstraňuje. Označme p pravděpodobnost nedokončení opravy. Potom

$$\lambda_{SW}(t_i) = \phi(N_0 - p \cdot i), \quad i = 1, 2, \dots, N_0.$$

Littlewood–Verrall (LV) Bayesian Model nepředpokládá, že doba mezi poruchami (odhalením chyby) závisí přímo na počtu odhalených chyb. Předpokládá sice exponenciální rozdělení doby mezi poruchami ve tvaru

$$f(t_i|\lambda_i) = \lambda_i e^{-\lambda_i t_i},$$

nicméně parametr λ_i považuje za náhodnou veličinu s rozdělením gama

$$f(\lambda_i|\alpha, \psi(i)) = \frac{(\psi(i)\lambda_i)^\alpha e^{-\psi(i)\lambda_i}}{\Gamma\alpha},$$

kde $\psi(i)$ charakterizuje kvalitu programátorů a obtížnost programové úlohy.

C Modely založené na počtu výskytu chyb

Počet odhalených chyb v čase t tvoří *nehomogenní Poissonův proces (NHPP)*. V tomto procesu se předpokládá proměnná intenzita poruchy, závislá na čase $\lambda(t)$. Proces $N(t)$ se potom řídí Poissonovým rozdělením pravděpodobnosti s parametrem

$$m(t) = \int_0^t \lambda(\tau) d\tau,$$

tedy

$$P(N(t) = n) = \frac{(m(t))^n}{n!} e^{-m(t)}, \quad t \geq 0, \quad n = 0, 1, \dots$$

Funkce $m(t)$ je zároveň rovna střední hodnotě procesu $N(t)$. Obráceně, intenzitu poruchy lze vyjádřit pomocí parametru $m(t)$ jako $\lambda(t) = \frac{dm(t)}{dt}$.

Goel–Okumoto Nonhomogenous Poisson Process nepředpokládá, že doba mezi poruchami (odhalením

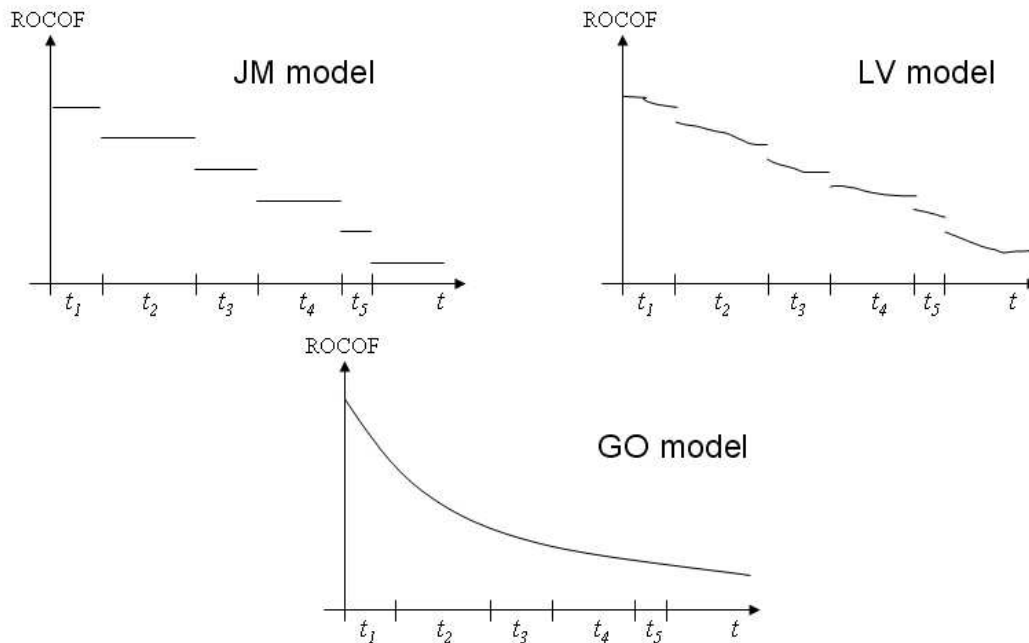
D Software Reliability Growth Models (SRGM)

– modely rostoucí spolehlivosti software.

Označme T_i , $i = 1, 2, \dots$ dobu mezi $i-1$ -ní a i -tou poruchou a $S_i = \sum_{k=1}^i T_k$ dobu do odhalení i -té chyby. Spolehlivost je potom kvantifikována podmíněnou pravděpodobností

$$R(s|t) = P(T_{i+1} > s | S_i = t), \quad s, t > 0$$

Protože je $P(T_i > s | S_i = t) = P(N(t+s) = i | N(t) = i) = \exp\left(-\int_t^{t+s} \lambda(\tau) d\tau\right)$, je $R(s|t)$ nezávislé na i . Tyto modely se dělí na modely s exponenciální křivkou spolehlivosti a modely, jejichž křivka spolehlivosti má tvar „S“ (S-křivka).



Obrázok 1: Srovnání ROCOF pro různé modely: JM = Jelinski–Moranda, GO = Goel–Okumoto, LV = Littlewood–Verrall

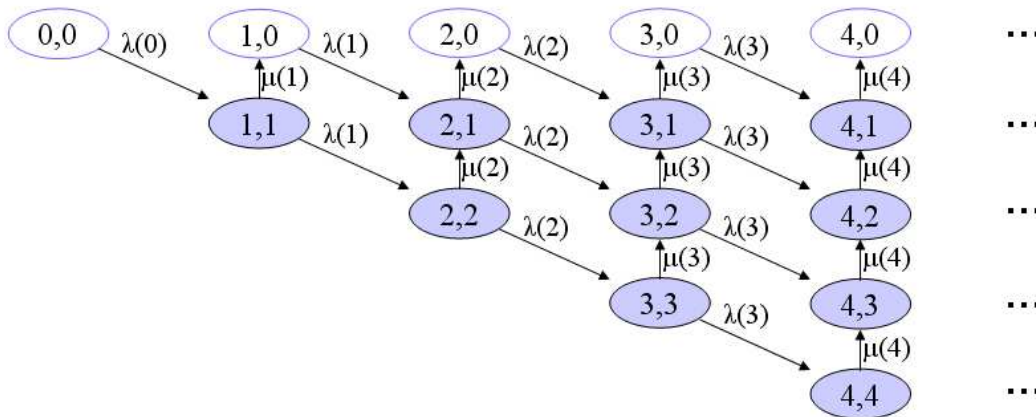
E Markovské modely spolehlivosti software

Všechny klasické modely spolehlivosti software předpokládají, že chyby jsou ihned odstraněny ve chvíli, kdy jsou odhaleny. Připustí-li neúplné odstranění chyb (imperfect debugging), potom neúplně odstraněné chyby zůstávají v software a čekají na „nové odhalení“. Připustíme-li, že odstranění chyby vyžaduje nějaké úsilí, charakterizované časem do odstranění chyby, dostáváme klasický model obslužného systému, v němž vstupní proud tvoří odhalované chyby, výstupní proud tvoří odstraněné chyby a ve frontě čekají odhalené, ale doposud neodstraněné chyby. Spolehlivost software je pravděpodobnost nulového počtu „zakázek“ v systému. Pokud bychom předpokládali, že intenzita odhalování poruch i intenzita oprav jsou konstantní a doby mezi poruchami, stejně jako doby do odstranění chyby, jsou nezávislé exponenciální náhodné veličiny, dostaneme klasický M/M/k model. Tento předpoklad by znamenal „nevyčerpatelný“ zdroj chyb a je tedy nereálný. Proto musíme uvažovat minimálně systém s proměnnou – klesající – intenzitou odhalování poruch.

Uvažujme Markovský proces se spočetně mnoha stavy $E_{ij} = (i, j)$, kde i je počet odhalených chyb, $i = 0, 1, \dots$ a $j = 0, 1, \dots, i$, je počet dosud neodstraněných chyb v čase t . Budeme předpokládat, že intenzita objevení nové chyby $\lambda(i)$, stejně tak jako intenzita opravy $\mu(i)$, se mění s počtem dosud

odhalených chyb. Matice intenzit přechodu $Q = \{q_{(a_i, b_i; c_j, d_j)}\}_{i=0, \dots}^{j=0, \dots}$ má prvky

$$\begin{aligned} q_{(i,0;i,0)} &= -\lambda(i), \\ q_{(i,j;i+1,j+1)} &= \lambda(i), \\ q_{(i,j;i,j-1)} &= -\mu(i), \quad j > 0 \\ q_{(i,j;i,j)} &= -(\lambda(i) + \mu(i)), \quad j > 0. \end{aligned}$$



Obrázok 2: Schéma markovského procesu

Soustavu Kolmogorovových diferenciálních rovnic pro absolutní pravděpodobnosti $p_{ij}(t)$ v uvedeném modelu lze zapsat takto:

$$\begin{aligned} p'_{0,0}(t) &= -\lambda p_{0,0}(t), \\ p'_{i,0}(t) &= -\lambda(i)p_{i,0}(t) + \mu(i)p_{i,1}(t), & i = 1, \dots, \\ p'_{i,j}(t) &= \lambda(i-1)p_{i-1,j-1}(t) - (\lambda(i) + \mu(i))p_{i,j}(t) + \mu(i)p_{i,j+1}(t), & i = 1, \dots, \\ & & j = 1, \dots, i-1, \\ p'_{i,i}(t) &= \lambda(i-1)p_{i-1,i-1}(t) - (\lambda(i) + \mu(i))p_{i,i}(t), & i = 1, \dots. \end{aligned}$$

V modelu M/M/1 mají tyto rovnice tvar

$$\begin{aligned} p'_{0,0}(t) &= -\lambda p_{0,0}(t), \\ p'_{i,0}(t) &= -\lambda p_{i,0}(t) + \mu p_{i,1}(t), & i = 1, \dots, \\ p'_{i,j}(t) &= \lambda p_{i-1,j-1}(t) - (\lambda + \mu)p_{i,j}(t) + \mu p_{i,j+1}(t), & i = 1, \dots, \\ & & j = 1, \dots, i-1, \\ p'_{i,i}(t) &= \lambda p_{i-1,i-1}(t) - (\lambda + \mu)p_{i,i}(t), & i = 1, \dots. \end{aligned}$$

Pro výpočet spolehlivosti jsou důležité stavy, kdy je systém prázdný (všechny odhalené chyby jsou i odstraněny) – v našem modelu jsou to stavy (i, i) .

Označme $\Pi(s, t) = \sum_{i=0}^{\infty} p_{i,i} s^i$. Vynásobením poslední rovnice s^i , $i = 1, 2, \dots$ a sečtením přes všechna i dostaneme rovnici

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Pi(s, t)}{\partial t} &= \lambda s \Pi(s, t) - (\lambda + \mu) \Pi(s, t) + \mu p_{0,0} \\ \frac{\partial \Pi(s, t)}{\partial t} &= (\lambda s - \lambda - \mu) \Pi(s, t) + \mu p_{0,0} \\ \Pi(s, t) &= C \frac{1}{1 - \frac{\lambda}{\mu} s} e^{-\lambda t} + K(s) e^{(\lambda s - \lambda - \mu)t}\end{aligned}$$

Po rozvinutí posledního členu v řadu

$$\Pi(s, t) = C e^{-\lambda t} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\mu} s\right)^i + K(s) e^{-(\lambda + \mu)t} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^i}{i!} s^i,$$

odkud po dosazení počáteční podmínky pro $p_{0,0}$ dostaneme řešení

$$\begin{aligned}p_{0,0} &= C e^{-\lambda t}, \\ p_{i,i} &= C \left[\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^i e^{-\lambda t} + \frac{(\lambda t)^{i-1}}{(i-1)!} e^{-(\lambda + \mu)t} \right].\end{aligned}$$

Budeme předpokládat, že intenzita objevení nové chyby $\lambda(i)$, stejně tak jako intenzita opravy $\mu(i)$, se mění s počtem dosud odhalených chyb geometrickou řadou. Nechť

$$\lambda(i) = \lambda \alpha^i, \mu(i) = \mu \beta^i, \quad i = 1, 2, \dots$$

Je rozumné předpokládat, že $\alpha < 1$ (intenzita objevení další chyby klesá s počtem odhalených chyb) a $\beta \geq 1$ (intenzita opravy se vzrůstajícím počtem chyb neroste). Matice intenzit přechodu $Q = \{q_{(a_i, b_i; c_j, d_j)}\}_{i=0, \dots}^{j=0, \dots}$ má v tomto případě prvky

$$\begin{aligned}q_{(i,0;i,0)} &= -\lambda \alpha^i, \\ q_{(i,j;i+1,j+1)} &= \lambda \alpha^i, \\ q_{(i,j;i,j-1)} &= -\mu \beta^j, \quad j > 0 \\ q_{(i,j;i,j)} &= -(\lambda \alpha^i + \mu \beta^j), \quad j > 0.\end{aligned}$$

Soustavu Kolmogorovových diferenciálních rovnic pro absolutní pravděpodobnosti $p_{ij}(t)$ v uvedeném modelu lze zapsat takto:

$$\begin{aligned}p'_{0,0}(t) &= -\lambda p_{0,0}(t), \\ p'_{i,0}(t) &= -\lambda \alpha^i p_{i,0}(t) + \mu \beta^i p_{i,1}(t), & i = 1, \dots, \\ p'_{i,j}(t) &= \lambda \alpha^{i-1} p_{i-1,j-1}(t) - (\lambda \alpha^i + \mu \beta^j) p_{i,j}(t) + \mu \beta^j p_{i,j+1}(t), & i = 1, \dots, \\ & & j = 1, \dots, i-1, \\ p'_{i,i}(t) &= \lambda \alpha^{i-1} p_{i-1,i-1}(t) - (\lambda \alpha^i + \mu \beta^i) p_{i,i}(t), & i = 1, \dots\end{aligned}$$

Reference

- [1] Malaiya Y. K., Srimani P. K. (1991) *Software Reliability Models*. IEEE Computer Society Press Technology Series, California 1991.
- [2] Goel A. L. (1985) *Software Reliability Models: Assumptions, Limitations and Applicability*. IEEE Transactionson Software Engineering **12**, 1411 – 1423.
- [3] Tokuno K., Yamada S. (2003) *Markovian Software Reliability Measurement with a Geometrically Decreasing Perfect Debugging Rate*. Math. and Comp. Modelling **38**, 1443 – 1451.

Poděkování: Tato práce byla podporována projektem MŠMT č. 1M06047.

Adresa: Fakulta strojní ČVUT v Praze, Ústav technické matematiky, Karlovo nám. 13, 121 35 Praha 2

E-mail: gejza.dohnal@fs.cvut.cz

Klasifikační stromy ve spolehlivosti software

Jan A. Strouhal

Klíčová slova: Klasifikační strom, spolehlivost software

Abstrakt: Příspěvek se zabývá konstrukcí klasifikačních stromů pro použití ve spolehlivosti software. V první části je popsána základní konstrukce, která počítá s expertním počtem i hodnotami hranic metrik, v další části jsou popsány vylepšení této základní konstrukce vyhledáním optimálních hranic metrik. Příspěvek také popisuje rozšíření základní klasifikační škály na více skupin.

A Úvod

V poslední době se využívá výpočetní technika téměř všude kolem nás. Existuje nepřehledné množství počítačových programů od jednoduchých her až po složité programové systémy používané v jaderném inženýrství. Všechny programy procházejí svými životními fázemi od analýzy, návrhu, vývoje, ladění, používání až po opravy a dodatky. Koncový uživatel v závěrečné fázi, ve fázi užívání, požaduje aby tento program byl maximálně spolehlivý, neboli aby bezchybně vykonával požadované funkce po danou dobu. A tak výrobce programu musí vyprodukovat natolik spolehlivý software, aby byl zákazník spokojen. Vyrobit naprosto bezchybný program je téměř nemožné, ale jsou cesty, které umožňují chybovost software snížit. Jedna z cest je otestovat (někdy i opakovaně) všechny funkce programu za všech možných podmínek a při jakékoli opravě programu znovu vše podrobně otestovat. Tento postup je náročný nejen na pracovní síly a na prostředky, ale je zejména náročný na čas a toho je v dnešní době stále méně (zákazník na zadaný program většinou spěchá). A tak nastává otázka, zda by nebylo možné proces testování (popřípadě i ladění) v něčem urychlit. Odpověď je jednoduchá. Vždyť přece není nutné testovat části programu, které se dle předchozích zkušeností jeví jako části nenáchylné k chybám neboli bylo v nich detekováno jen málo chyb a naopak zacílit úsilí na ty části programu, které se dle předchozích zkušeností jeví jako části ve kterých byla spousta chyb, tedy části náchylné k chybám. Pokud tedy zjistíme charakter (vlastnosti) těchto dvou skupin a podle těchto vlastností dokážeme určit náchylnost k chybám nemusíme pak testovat části, které se jeví jako nenáchylné k chybám. Vezmeme-li části programu, které jsme již v minulosti testovali, můžeme z nich zkonstruovat klasifikační strom, kterým pak můžeme klasifikovat části programu, u kterých chceme zjistit, zda je máme či nemusíme testovat. A tak nám tento zkonstruovaný strom může pomoci zkrátit dobu testování nebo dokonce zvýšit spolehlivost, protože se při testování zaměříme více na části, které jsou skutečně potřeba otestovat a odladit.

B Základní pojmy potřebné pro klasifikační stromy

B.1 Moduly

Celý softwarový systém pro tvorbu klasifikačních stromů rozložíme na řadu modulů. Jsou to relativně samostatné části kódu na kterých lze snadno měřit jejich vlastnosti. Velikost modulů volíme přiměřeně k velikosti softwarového systému, avšak podvědomě se snažíme o co nejmenší velikost a co největší počet modulů, abychom měli dostatečný vzorek pro vytváření klasifikačních stromů. Musíme si ale stále dávat pozor, aby nevznikly moduly, které nejsou dostatečně samostatnými částmi softwarového systému. Pro příklad, máme-li softwarový systém pro skladové hospodářství můžeme jej rozdělit na modul příjmu, výdeje, faktur, účetních dokladů atd.

B.2 Metriky

Metrikami v této souvislosti nazýváme vlastnosti, které zaznamenáváme na modulech a o kterých víme (nebo si myslíme) že mají vliv na chybovost. Za metriky lze zvolit jakoukoli měřitelnou vlastnost. Například počet hodin strávených programováním nebo analýzou, počet zjištěných chyb při ladění, počet změn, počet nutných překladů, počet revizí návrhu, použité návrhové a programovací techniky (jazyk, CASE systémy), počet modulových funkcí, rozhraní, doba testování, počet nutných testů, náklady spojené s nefunkčností a podobně.

Funkce výběru metrik (F je v rozsahu $[0,1]$) je pro dvouskupinové dělení definované vztahem:

$$F(p_i; n_i) = -\frac{p_i}{p_i + n_i} \log_2 \frac{p_i}{p_i + n_i} - \frac{n_i}{p_i + n_i} \log_2 \frac{n_i}{p_i + n_i}$$

kde p je počet pozitivních modulů (náchylné k chybám), a n je počet negativních modulů v i -tém uzlu. Hodnoty F jsou v intervalu $[0,1]$. Čím je F menší, tím větší je *homogenita* v uzlu. Pro každý uzel dělení vypočítáme také váhu: $weight_i = \frac{p_i + n_i}{|C|}$ Metriku A , pro níž je $E(C, A) = \sum_{i=1}^v [weight_i * F(p_i + n_i)]$ minimální použijeme jako nový kořen pro další zpracování. Dělení provádíme až do vyčerpání všech metrik nebo do splnění *kritéria terminace*.

Nejjednodušším kritériem terminace je nulaprocentní tolerance, požadující, že všechny moduly v koncovém listu patří do jedné skupiny.

Pro každou metriku jsou určeny *hranice*. Jsou to zvolené nebo jinak určené hodnoty metrik, podle kterých se modul v určitém uzlu třídí do několika poduzlů. Máme-li např. metriku počet řádků programového kódu, může být hranicí číslo 10000. Pokud má modul méně než tento počet, zařadíme jej do levého poduzlu, pokud alespoň tento počet, zařadíme jej do pravého poduzlu.

B.3 Klasifikace, skupiny, listy

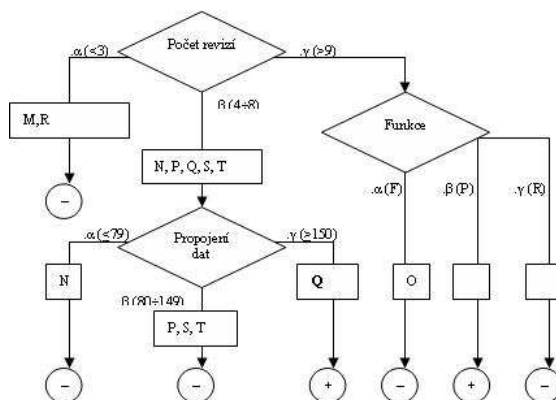
Cílem je zařazení modulu do některé z cílových klasifikačních skupin (klasické dělení je na skupinu modulů náchylných k chybám (+) a skupiny modulů

nenáchylných k chybám (-)).

Listem se rozumí uzel, který již dále nerozkládáme dle žádné metriky na další poduzly. Pokud se v tomto uzlu vyskytují moduly pouze jedné skupiny, mluvíme o *homogenním listu*. Pokud při tvorbě stromu vytvoříme list, který neobsahuje žádný modul (mohlo by se stát například volbou hranice metriky vyšší než maximum naměřené na všech modulech) mluvíme o *slepém listu*.

C Klasifikace

Ukážeme názorný příklad klasifikace modulu Q v již vytvořeném stromě. Modul má tyto vlastnosti: počet revizí 7, propojení dat 172 a funkci P (řízení procesu). V prvním kroku jej tedy klasifikujeme do větve β dle metriky počet revizí a následně do větve γ dle metriky propojení dat. Pomocí klasifikace



jsme zjistili, že klasifikovaný modul Q je pravděpodobně náchylný k chybám (skončil v + listu) a měli bychom jej testovat.

D Metodika tvorby klasifikačního stromu

Při vytváření klasifikačních stromů používáme údaje o vlastnostech modulů zjištěné na základě pozorování podobných objektů. Na rozdíl od regresních stromů zde nepoužíváme binární dělení, ale uzel se může dle hodnot jedné metriky rozdělit na více poduzlů (můžeme použít více hranic dělení). Obecný postup při konstrukci klasifikačních stromů začíná rozkladem systému na moduly, ohodnocením do skupin, volbou množiny metrik, volbou hranic metrik. Pomocí funkce výběru metrik a váhy na poduzlech najdeme vhodné dělení. Toto provádíme pro každý uzel až do kritéria terminace nebo do vyčerpání všech metrik.

Rozklad na moduly Softwarový systém rozložíme na řadu modulů. Lepší je větší počet modulů, ale dbáme na to aby moduly stále byly dostatečně samostatnými částmi softwarového systému.

Ohodnocení do skupin Zvolíme ohodnocení do skupin (v tomto případě dvou: náchylné a nenáchylné k chybám) podle nějakého spolehlivostního kritéria (faktoru), například podle počtu chyb (bylo-li v modulu při testování zjištěno méně než tento počet chyb, zařadíme jej do skupiny nenáchylné k chybám, jinak jej zařadíme do skupiny náchylné k chybám).

Zavedení, výběr a volba metrik Další částí tvorby klasifikačního stromu je, že na všech modulech zavedeme množinu metrik podle kterých bude prováděna klasifikace. Změříme hodnoty všech metrik pro všechny moduly. Správná volba metrik, ze kterých bude strom tvořen je důležitou částí tvorby klasifikačního stromu. Všechny metriky, které bychom chtěli použít by měli mít vždy nějaký vliv na počet chyb v modulu. Pokud použijí například počet úhozů do klávesnice při psaní programového kódu, logicky použijí nesprávnou metriku, protože tato metrika nemá na počet chyb v modulu žádný vliv. Pro některé typy úloh a programů se může zdát vhodné použít některé metriky, pro jiné typy úloh a programů zase jiné. Výběr je obvykle záležitostí experta na analýzu softwarové spolehlivosti. Lépe je upřednostňovat ty metriky, které lze snadno a dostupnými prostředky přesně zjistit (počet řádků programového kódu v modulu). Počet zvolených a naměřených metrik by neměl být malý, nicméně, optimální počet metrik, které bychom měli ke tvorbě stromu použít nelze předem zjistit. Prakticky je téměř vždy možné použít všechny metriky, které jsme na modulech měřili. Výjimku tvoří navzájem *redundantní metriky*. Pokud jsou dvě metriky navzájem zastupitelné vychází při tvorbě stromu stejné nebo hodně podobné $E()$ pro obě metriky u všech výpočtů a obě metriky vždy rozdělují moduly do stejných nebo hodně podobných skupin. Tím je i naznačena určitá korelace mezi těmito metrikami, jedna metrika je redundantní a je nutné ji ze seznamu vyřadit. Většinou jsou tyto metriky vyřazeny předem na základě logické úvahy o jejich fyzické nebo matematické podstatě. Příkladem může být metrika počtu řádků kódu v modulu a počet znaků kódu v modulu. Protože bývá počet znaků kódu na řádek kódu průměrně ve všech modulech stejné číslo, je mezi těmito dvěma metrikami jistá lineární závislost a není nutné používat k tvorbě stromu obě tyto metriky.

Volba hranic Abychom mohli moduly rozdělovat pomocí určité metriky z hlavního uzlu do poduzlů, je nutné si pro tuto metriku stanovit také počet dělení a hranice dělení. Expertní hodnoty hranic se většinou stanovují z předchozích zkušeností nebo dle nějakého obecného principu. Jako příklad si uveďme volbu hranic pro metriku propojení dat. Na všech modulech jsme spočítali, že metrika propojení dat nabývá hodnot od 0 do 200, tudíž si můžeme například stanovit hranice 65 a 130 (tak abychom rozdělili interval 0-200 na přibližně tři stejné intervaly)

Vhodné dělení V každém kroku tvorby stromu se snažíme vyhledat vhodné dělení uzlu na poduzly. Pomáhá nám k tomu funkce výběru metrik, která nám ukazuje na homogenitu v jednotlivých uzlech. Vynásobíme-li výsledky této funkce váhou (poměr počtu modulů v uzlu z celkového počtu zbývajících modulů) získáme $E()$. Metriku, pro níž je $E()$ minimální použijeme jako nový kořen pro další zpracování, tuto metriku vyřadíme ze seznamu metrik a pro všechny vzniklé poduzly opakujeme postup dělení. Dělení provádíme až do vyčerpání všech metrik nebo do splnění *kritéria terminace*.

E Optimalizace při tvorbě klasifikačního stromu

Při vytváření klasifikačního stromu předem dané (expertní) hranice metrik nemusí být vždy optimální a mohou způsobovat vytvoření stromu se slepými koncovými listy nebo s koncovými listy, které jsou stále nehomogenní přestože jsou již vyčerpány všechny metriky.

Slepé listy mohou přiřadit k vedlejšímu listu (jako by se vynechala hranice mezi listem a slepým listem) a tudíž použít méně hranic. Slepé listy mohou také odstranit tím, že hledám vedle nejvhodnější metriky pro daný uzel zároveň i nejvhodnější meze (například ze všech možných hranic, které vzniknou v polovině mezi naměřenými hodnotami metrik) pro tuto metriku.

E.1 Výběr nejvhodnějších kombinací z celkového počtu

Pro snížení nároků na čas při výpočtu při rozsáhlých údajích bychom mohli vybrat nikoli všechny kombinace, ale jen ty, které skutečně vedou k nalezení vhodných metrik. Jak ale poznat, které varianty bychom mohli ihned zavrhnout bez propočtu a zajistit aby nebyla podmínka zavrhnutí výpočetně složitější než propočet samotný? Jedním z možných postupů je výběr z těch hranic, které vzniknou pouze z hodnot metrik modulů, které nám zbývají ve větvi, tedy nikoli ze všech modulů a tudíž všech naměřených hodnot metrik. Tím se nám ve větvích, které jsou blíže ke koncovým listům sníží počet hranic pro výběr a zároveň se i zrychlí výpočet. Představme si například, že máme naměřené hodnoty ve všech modulech pro jednu metriku 2, 4, 6 a 8. Z toho jsou dány hranice 3, 5 a 7. Ale protože již máme jen část modulů, kde jsou naměřené hodnoty metriky jen 4 a 8 dostaneme pro hranice 5, 6 a 7 stejné hodnoty $E()$ a pro hranici 3 by se nám dokonce vytvořil strom se slepým listem.

E.2 Počet použitých hranic metrik

Ve stávajícím systému se hledá pouze předem zadaný počet hranic. Například se předem rozhodne na základě expertních znalostí že bude počet hranic roven třem pro všechny metriky. Ale jaký počet je optimální? Odpověď není jednoduchá. Pokud bychom zvolili nízký počet hranic, může se nám stát, že při tvorbě stromu vyčerpáme metriky dříve nežli dostaneme homogenní listy.

Naopak pokud zvolíme vysoký počet hranic (nejvýše počet naměřených hodnot dané metriky snížený o jednu) vytvoříme strom o nízkém počtu dělení dle metrik, nevyužijeme všech dostupných metrik a je větší pravděpodobnost, že strom bude chybně interpretovat výsledky u nových klasifikovaných modulů. Také se nám může stát, že dostaneme slepé listy.

E.2.1 Optimalizace počtu hranic výběrem nejlepšího počtu Počet hranic můžeme například optimalizovat tím, že vypočteme stromy pro všechny možné počty hranic a pozorujeme maximum $E()$ pro celý strom, počet použitých metrik a pozorujeme homogenitu v koncových listech (poměr homogenních listů ku všem listům).

- Tvorbu stromu neprovádíme v případech, kdy máme dva (a více) modulů se stejnými hodnotami všech metrik, ale s odlišnou skupinou (+ nebo -). Nikdy bychom totiž nedosáhli homogenity v koncovém listu a vždy bychom v jednom koncovém listu měli oba inkriminované moduly.
- Pro všechny metriky volíme stejný počet hranic. Na počátku tvorby zvolíme jednu hranici a tento počet postupně zvyšujeme.
- Tvorbu stromů ukončíme ihned, jakmile budeme mít v právě prováděném stromu všechny koncové listy homogenními.
- Dodržujeme podmínku, že metrika nemůže mít více hranic, nežli je počet naměřených odlišných hodnot mínus jedna pro tuto metriku. Pokud nastane tato podmínka, pro tuto metriku již počet hranic nezvyšujeme.
- Pokud již nemáme možnost zvýšit počet hranic u žádné z metrik, tvorbu stromů ukončíme.

Na všech získaných stromech spočítáme použitelnost stromu jako počet použitých metrik, dělených násobkem $E()$ a homogenity v koncových listech (násobek poměrů vyššího zastoupení skupiny ku všem modulům v listu). Ze všech stromů pak vezmeme ten, který má tuto použitelnost stromu nejvyšší. Nastává ale otázka, zda je stejný počet hranic pro všechny metriky skutečně optimální, nebo zda je lepší pro každou metriku zvolit zvlášť optimální počet hranic. Počet stromů vytvořených metodou nejlepšího počtu, ze kterých bychom vybírali jeden optimální, by mohl být obrovský. Proto musíme, pokud chceme zvolit pro každou metriku jiný optimální počet hranic, použít jinou metodu a to optimalizací počtu hranic postupným zvyšováním.

E.2.2 Optimalizace počtu hranic postupným zvyšováním Pro optimalizaci počtu hranic použijeme následující postup. Budeme postupně vytvářet klasifikační strom běžným způsobem s proměnným počtem hranic a budeme zaznamenávat maximum $E()$ pro celý strom a pozorovat homogenitu v koncových listech.

- Tvorbu stromu neprovádíme v případech, kdy máme dva (a více) modulů se stejnými hodnotami všech metrik, ale s odlišnou skupinou (+ nebo -). Nikdy bychom totiž nedosáhli homogenity v koncovém listu a vždy bychom v jednom měli oba inkriminované moduly.
- Na počátku tvorby zvolíme jednu hranici pro všechny metriky.
- Tvorbu stromu ukončíme ihned, jakmile budeme mít všechny koncové listy homogenními.
- Pokud bude existovat nehomogenní koncový list, zvýšíme počet hranic o jedničku tam, kde nám vychází nejvyšší $E()$.
- Pokud bude existovat nehomogenní koncový list a ve stejné metrice jako v bezprostředně předchozí tvorbě stromu se nám objeví maximum $E()$, které je vyšší nebo rovno maximu při bezprostředně předchozí tvorbě stromu, vrátíme počet hranic v této metrice na bezprostředně předchozí. V této metrice již nikdy počet hranic nezvyšujeme a zvyšujeme počet hranic u metriky, která má druhé (popř.další) nejvyšší $E()$.
- Pokud bude existovat nehomogenní koncový list a ve stejné metrice jako v bezprostředně předchozí tvorbě stromu se nám objeví maximum $E()$, které je nižší než při bezprostředně předchozí tvorbě stromu, zvýšíme počet hranic o jedničku u této metriky jen tehdy, pokud nám nevyšel stejný strom. Jestliže stejný strom vyšel, vrátíme počet hranic v této metrice na bezprostředně předchozí. V této metrice již nikdy počet hranic nezvyšujeme a zvýšíme počet hranic u metriky s druhým (popř.dalším) nejvyšším $E()$.
- Pokud při zvyšování počtu hranic v dané metrice narazíme na počet všech možných (odlišných) hodnot pro danou metriku mínus jedna, počet hranic u této metriky nezvyšujeme a zvyšujeme počet hranic u jiné.
- Nemáme-li již možnost zvýšit počet hranic u žádné z metrik, tvorbu stromu ukončíme.

F Rozšíření klasifikační škály

Klasifikace na "pozitivní" a "negativní" moduly, uvažovaná v literatuře se v praxi ukazuje jako nedostatečná. Vhodným vylepšením klasifikace je rozšíření klasifikační škály na více skupin podle důležitosti modulu a závažnosti následků jeho selhání. Takovým rozšířením může být například pětistupňová škála (pět skupin):

1. netestovat (--)
2. testovat jen namátkově; projít (-)
3. testovat na hlavní funkce, zkráceně (o)

4. testovat po určitou dobu (+)
5. důkladně otestovat, dokud nedosáhneme požadované spolehlivosti, případně do stanovené doby (++)

Na konci klasifikace samozřejmě nemusí být jen informace o nutnosti testování v její pětistupňové škále, ale i informace o rozdělení závažnosti chyb.

Pro pětistupňovou škálu se změní funkce výběru, protože nyní již neuvažujeme pouze rozdělení na pozitivní a negativní moduly, ale rozdělujeme moduly do pěti skupin. Funkce výběru metrik pro pětistupňovou škálu (F je v rozsahu $[0,1]$) je:

$$F(a_i; b_i; c_i; d_i; e_i) = -\frac{a_i}{s_i} \log_5 \frac{a_i}{s_i} - \frac{b_i}{s_i} \log_5 \frac{b_i}{s_i} - \frac{c_i}{s_i} \log_5 \frac{c_i}{s_i} - \frac{d_i}{s_i} \log_5 \frac{d_i}{s_i} - \frac{e_i}{s_i} \log_5 \frac{e_i}{s_i},$$

kde a_i jsou moduly prvního stupně škály (méně náchylné k chybám - netestovat), b_i je počet modulů druhého stupně škály v i -tém uzlu, c_i je počet modulů třetího stupně škály v i -tém uzlu, d_i je počet modulů čtvrtého stupně škály v i -tém uzlu a e_i je počet modulů pátého stupně škály v i -tém uzlu. Součet s_i je součet všech modulů v i -tém uzlu $s_i = a_i + b_i + c_i + d_i + e_i$. Čím je $F()$ menší, tím větší je homogenita v uzlu.

Nejjednodušším kritériem terminace pro pětistupňovou škálu je nulaprocentní tolerance, požadující, že všechny moduly patří do určité skupiny, což se pro pětistupňovou škálu těžko dá zajistit, toto kritérium je příliš přísné. Je lepší použít mírnější kritérium, požadující, že například polovina a více modulů patří do určité skupiny a zbytek patří do skupin sousedících. Například šest modulů patří do skupiny 2, dva do skupiny 1 (sousedící) a tři do skupiny 3 (také sousedící). Při vyhodnocování lze s úspěchem využívat i fuzzy matematického aparátu.

Reference

- [1] Savický P., Klaschka J. & Antoch J. (2000): Optimal classification trees. In: *COMPSTAT 2000, Proceedings in Computational Statistics* (eds. J.G. Bethlehem & P.G.M. van der Heiden), 427–432. Heidelberg: Physica-Verlag.
- [2] Savický P., Klaschka J. & Antoch J. (2001): Optimální klasifikační stromy. In: *ROBUST 2000, Sborník prací jedenácté letní školy JČMF* (eds. J. Antoch & G. Dohnal), 267–283. Praha: JČMF.

Poděkování: Tato práce byla podporována Centrem pro jakost a spolehlivost výroby.

Adresa: ČVUT Praha, Fakulta strojní, Ústav přístrojové a měřicí techniky, Technická 4, 160 00 Praha 6

E-mail: jstrouhal@email.cz