

ROBUST'2000

SBORNÍK PRACÍ
JEDENÁCTÉ LETNÍ ŠKOLY JČMF

ZORGANIZOVANÉ ODBORNOU SKUPINOU
PRO VÝPOČETNÍ STATISTIKU PŘI MVS JČMF

ZA PODPORY

ČSS & KPMS MFF UK & KTM FS ČVUT & PF TUL & KMA ZČU

VE DNECH 11. – 15. ZÁŘÍ 2000 V NEČTINÁCH

USPOŘÁDALI: JAROMÍR ANTOCH & GEJZA DOHNAL

© JČMF 2001

ISBN 80-7015-792-5

PÁR SLOV ÚVODEM

Vážené kolegyně, vážení kolegové,

předkládáme Vám sborník z jubilejní jedenácté letní školy Jednoty českých matematiků a fyziků ROBUST'2000, která se konala ve dnech 11. – 15. 9. 2000 ve výukovém středisku Západočeské univerzity v Nečtinách. Tato akce byla zorganizována skupinou pro výpočetní statistiku při MVS JČMF a KPMS MFF UK za pomoci KTM ČVUT Praha, ČSS, PF TUL a KMA ZČU. Organizaci této již tradiční akce nám usnadnila pomoc grantu MŠMT MSM 113200008.

Letní školy se spolu s hosty zúčastnilo osmdesát jedna účastníků. Celkem bylo předneseno 50 přednášek, z toho 14 přednesli postgraduální studenti. K naší velké radosti bylo mezi řečníky tolik doktorandů, že jsme mohli z jejich vystoupení nejenom vytvořit samostatný půldenní blok, ale ocenit též nejlepší vystoupení/dosažené výsledky. Komise ve složení prof. RNDr. J. Štěpán, DrSc (MFF UK, předseda), ing. A. Carda, CSc. (Deloitte & Touche), prof. RNDr. J. Jurečková, DrSc. (MFF UK) a ing. Z. Roth, CSc, (SZÚ, předseda ČSS) vyhodnotila vystoupení třinácti přednášejících a navrhla fi Deloitte & Touche v rámci její iniciativy *Nejlepší k sobě* k ocenění Mgr. A. Fialovou, Mgr. M. Friesla a Mgr. H. Janečkovou. Dále pak navrhla firmě Elkan k ocenění za nejlepší prezentovanou práci s výrazně výpočetním zaměřením Mgr. K. Bodláka.

Děkujeme všem účastníkům za přednesené referáty a zároveň za srdečnou atmosféru, kterou během ROBUSTu vytvořili. Organizační výbor děkuje všem přednášejícím, kteří zaslali do sborníku svůj příspěvek. Velice též děkujeme všem za pomoc s recenzním řízením. Toto pečlivé recenzní řízení, jemuž několik příspěvků padlo za obět, vydání sborníku poněkud pozdrželo. Na druhé straně však, jak se domníváme, podstatně zvýšilo jeho kvalitu.

Na shledání na dvanácté, tentokrát zimní škole ROBUST'02, jež se uskuteční ve dnech 21. – 25. ledna 2002 v Hejnicích.

V Praze 1. 6. 2001

ROBUST'2000 – OBSAH

BODLÁK Karel, PONÍŽIL Petr a SAXL Ivan <i>Markov point process: 3D Voronoi tessellations generated by Strauss process</i>	8
BRABEC Marek <i>Modelování růstových křivek</i>	9
BUDÍKOVÁ Marie <i>Aplikace shlukové analýzy v ekologii</i>	21
DOSTÁL Petr <i>A note on convergence of local martingales</i>	29
FABIÁN Zdeněk <i>MM-odhady</i>	33
FIALOVÁ Alena <i>Odhad parametru chvostů distribuční funkce</i>	42
FORBELSKÁ Marie <i>Neparametrická diskriminační analýza</i>	50
FRANĚK Petr <i>Adaptivní přístup v Kalmanově filtru</i>	59
FRIEŠL Michal <i>Bayesovské odhady v exponenciálním modelu konkurujících si rizik</i>	65
HLUBINKA Daniel <i>Implicitní definice podmíněné pravděpodobnosti: Existence a některé speciální případy</i>	73
JANEČKOVÁ Hana <i>RCA(1) model with heteroscedasticity</i>	82
JANŽURA Martin a VRBENSKÝ Karel <i>Test existence vnějšího pole v Isingově modelu</i>	92
JARUŠKOVÁ Daniela <i>Odhad bodu vzniku kvadratického trendu</i>	102
KÁRNÍK Igor a LIPOLDOVÁ Marie <i>Využití dvourozměrného přímého aglomerativního shlukování pro analýzu imunitní odpovědi rekombinantních kongenních kmenů</i>	109
KOBÍŽKOVÁ Lenka <i>Dvouvýběrové podmíněné pořadové testy v analýze přežití</i>	113
KOMÁREK Arnošt <i>Matematika mezi §...§ aneb něco málo o diskriminaci</i>	119
KULICH Michal <i>Asymptotické testy hypotéz v modelech s rušivými parametry</i>	125
KUNDEROVÁ Pavla <i>Konfidenční a prahové elipsoidy v deformačních měřeních</i>	135
LACHOUT Petr <i>Proces odhadování parametrů modelu</i>	149
LINKA Aleš a VOLF Petr <i>Statistické metody pro hodnocení homogenity textilních materiálů</i>	164

MALÝ Marek	
<i>Dotazníky o kvalitě života</i>	176
MAREK Tomáš	
<i>O odhadu parametrů v jednoduchém nelineárním modelu</i> <i>klouzavých součtů</i>	184
MICHÁLEK Jaroslav	
<i>Dvě poznámky o metodě kriging</i>	189
MIŠÍK Ladislav, TVRDÍK Josef a KŘIVÝ Ivan	
<i>On Convergence of a Class of Stochastic Algorithms</i>	198
ORSAKOVÁ Martina	
<i>Regression models for longitudinal data</i>	210
PICEK Jan a JUREČKOVÁ Jana	
<i>A class of tests on the tail index extreme regression quantiles</i>	217
PRÁŠKOVÁ Zuzana	
<i>Metoda subsampling a její aplikace v časových řadách</i>	227
PŮLPÁN Zdeněk	
<i>Baeysov princip</i>	237
RIEČAN Beloslav	
<i>Entropy of fuzzy dynamical systems</i>	244
ROTKOVSKÝ Martin	
<i>Srovnání aproximačních metod v teorii rizika</i>	247
ŘEZANKOVÁ Hana a HŮSEK Dušan	
<i>Klasifikace v programových systémech pro analýzu dat</i>	257
SAVICKÝ Petr, KLASCHKA Jan a ANTOCH Jaromír	
<i>Optimální klasifikační stromy</i>	267
SAXL Ivan	
<i>Shapes of random closed sets</i>	284
STEHLÍK Milan	
<i>On some exact densities in an exponential family</i>	298
VESELÝ Vítězslav	
<i>Kernel frame smoothing operators</i>	308
VÍŠEK Jan Ámos	
<i>Regression with high breakdown point</i>	324
VOLF Petr	
<i>Statistical models and analysis of cumulated damage processes</i>	357
WITKOVSKY Viktor	
<i>Výpočet niektorých exaktných rozdelení pomocou</i> <i>charakteristických funkcií</i>	368
ZELINKA Jiří a HOROVÁ Ivana	
<i>Jádrové odhady derivace regresní funkce</i>	382
ZVÁRA Petr	
<i>Some notes concerning prediction in AR processes</i>	393

MARKOV POINT PROCESS: 3D VORONOI TESSELLATIONS GENERATED BY STRAUSS PROCESS

KAREL BODLÁK, PETR PONÍŽIL AND IVAN SAXL

ABSTRACT. The mutual arrangement of points constituting independent realizations of the conditional and unconditional Strauss process with variable parameters R, γ is characterized by the properties of Voronoi tessellations generated by examined point patterns.

Абстракт. Взаимное расположение точек, составляющих независимые реализации условного и безусловного Штраусовского процесса с переменными параметрами R, γ характеризуется свойствами мозаик Воронова генерированных на основе исследуемых точечных моделей.

1. INTRODUCTION

The Gibbs point processes [13] describe very large systems in the theories of statistical physics, *e.g.* mutual behaviour and arrangement of particles in some material at different temperatures. First we consider processes with a fixed number of points. Let data be represented by a finite point configuration $x = \{x_1, \dots, x_n\}$ in some bounded subset B of the d -dimensional Euclidean space. The used form of the probability density function with respect to the Lebesgue measure μ is

$$(1) \quad f_n(x) = \frac{1}{Z} \exp(-U(x)),$$

where Z is a normalizing constant, U is the energy function. Usually U is of a special form

$$U(x) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} \theta(\|x_i - x_j\|).$$

The function θ is called the pair potential and describes attractive and repulsion forces depending on inter-point distances.

The general form of a density of Markov point processes [12, 13] according to the Hammersley-Clifford theorem is of the form (1) [4]. Hence all Markov point processes are Gibbs point processes. We assume a special case of the pair potential $\theta(r)$ in this work ($b > 0, \rho > 0$):

$$\theta(r) = \begin{cases} \infty, & r = 0 \\ b, & 0 < r \leq \rho \\ 0, & r > \rho. \end{cases}$$

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 60J99; Secondary 62M30.

Key words and phrases. Strauss process, Voronoi tessellations, point patterns.

The research was supported by Grant No. 201/99/0269 of GA ČR (K.B., I.S.), by the Ministry of Education of the Czech Republic (contract No. VS96108 - P.P.) and by Grant No. 304/00/1622 of GA ČR (I.S.).

We obtain the specific Markov point process which is called the Strauss point process [12, 13, 15]. Its density is

$$(2) \quad f_n(x) = \frac{1}{Z} \exp(-bs(x)), \quad \rho > 0,$$

where $s(x)$ is the number of point pairs the Euclidean distance of which is less than ρ . Substituting $\gamma = \exp(-b)$, then $\gamma \in (0, 1)$ and the density (2) has the form

$$(3) \quad f_n(x) = \frac{1}{Z} \gamma^{s(x)}.$$

An elegant approach to a random number of points consists in considering the measurable space (N, \mathcal{N}) of finite sets of distinct points in B , - see [4]. Then the Strauss point process has a density with respect to the distribution of a Poisson point process with the finite intensity measure μ given by

$$(4) \quad f(y) = \alpha \beta^{n(y)} \gamma^{s(y)}, \quad y \in N,$$

where α is a normalization constant, $\beta > 0$ and $\gamma \in (0, 1)$ are parameters, $n(y)$ is number of points. $\gamma = 1$ gives a Poisson point process with intensity measure $\beta\mu$. The parameter $\gamma = 0$ conditionally on no point pair being closer than ρ produces a hard-core process. For $\gamma \in (0, 1)$, there is a repulsion between the points which increases as γ decreases (b is greater). The density (4) is not integrable for $\gamma > 1$.

The simulation studies of 2D Strauss process [1, 3, 4, 5] have shown the results as follows. Patterns of a conditional model (fixed number of points n , called also the canonical ensemble in analogy to statistical physics) show regularity at $R = 0.35$ (after renormalizing ρ to the unit point intensity: $R = \rho n^{1/2}$) not only at $\gamma = 0.02$ but also at $\gamma = 0.5$ whereas at $R = 1.76$ clustering is pronounced at $\gamma = 0.05$ as well as at $\gamma = 0.02$ but the pattern of clusters is quasi-regular in the latter case [4] ($n = 50$ in a unit square). The clustering at $\gamma > 1$ is studied in [3] ($n = 100$ in the unit square, $R = 1$, $\gamma = 2$): an equilibrium state with few clusters and small number of isolated points was attained already after 200 iterations. As demonstrated by [1], the transition from the complete spatial randomness (binomial-like process) to clustering is abrupt without intermediate moderately clustered patterns. On the other hand, in contrast to hard-core processes of the Matérn type II and SSI (simple sequential inhibition), Strauss process at $\gamma = 0$ produces highly regular point patterns with the packing densities (the area fraction of non-overlapping discs of radius R centred in the points of the pattern) close to the theoretical values [5].

The process with random number of points (unconditional process, grand canonical ensemble) is less suitable for the analysis carried out in the present paper because cluster states cannot be attained by the used MCMC algorithm. A detailed investigation of this case is described in [2].

The methods used in the above papers include visual inspection, estimation of $n(x)$, $s(x)$, second- and third-order characteristics (the pair-correlation function, alignment function) and hexagonality number (the probability that a disk of radius $r \gtrsim R$ centred at a typical point x contains exactly 6 other points like in the close-packed arrangement of disks). There are no published papers on 3D Strauss model as yet, at least as far as the knowledge of the authors goes.

Here another approach is chosen, namely the analysis of the Voronoi tessellation generated by the examined point processes (a similar qualitative analysis was used in [3] for the 2D nearest-neighbour Markov point process). Because of the one-to-one correspondence between the generating point process and the tessellation, its

geometric characteristics sensitively reflect the spatial arrangement of the process. The standard goal of such an analysis concerns (i.) degree of the regularity of the pattern (translation lattices produce isohedral tilings, which are more or less distorted if generating patterns are displaced lattices of the Bookstein model type - [8]), (ii.) hard- or soft-core property (Matérn hard-core processes, process of the simple sequential inhibition - SSI, Strauss process, (iii.) mutual independence of the point positions (stationary Poisson point process), (iv.) tendency to clustering (Neyman-Scott processes [13], Bernoulli cluster fields [11]). In order to recognize the basic rule governing analyzed point pattern, it is sufficient to consider the unit tessellations only, which means that a point pattern is renormalized to the unit intensity $\lambda = 1$; then also the mean cell volume $\mathbf{E}v = 1/\lambda = 1$ and $R = \rho(\mathbf{E}n)^{1/3}$. The cell volume variance $\text{var } v$ (or, equivalently, CV v) is a sensitive characteristic of the point arrangement and its estimation is the primary step of the analysis. In the sequence of the above mentioned cases, $\text{var } v$ increases from zero (isohedral tilings) to 0.178 (Poisson-Voronoi tessellation - PVT) and attains typically the values between 1 and 100 for various tessellation generating cluster fields.

Further information is acquired by estimating other cell properties, like are cell surface area s , cell mean breadth w , shape factors $g = 6\sqrt{\pi}v/s^{3/2}$ (related to the isoperimetric inequality: $g = 1$ for a sphere) and $f = 6v/\pi w^3$ (related to the Bierbach inequality; again $f = 1$ for a sphere), number of cell faces n_f and in particular its variance $\text{var } n_f$, dihedral angles *etc.*

Even when the size characteristics of any cell are mutually independent, there is a certain degree of correlation between their statistical characteristics. In particular, if only hard-, soft- and pseudo-hard-core processes are considered, then $\mathbf{E}s$, $\mathbf{E}w$, $\text{var } n_f$ are approximately increasing and shape factors g , f approximately decreasing functions of $\text{var } v$, resp. - see Tab. 1. Small local extremes occur near the bounds represented by tilings generated by tightly packed body centred (tetrakaidecahedrons) and face centred (rhombic dodecahedrons) cubic lattices and PVT [7]; simple cubic tessellation behaves rather exceptionally - see Fig. 4. Some cell characteristics have discontinuity at $\text{var } v \rightarrow 0_+$ (*e.g.* n_f).

Table 1. Cell characteristics of unit 3D Voronoi tessellations

	tetrakai-decahedron	SSI ($R=0.82$)	PVT	Cluster field tessellations
$\text{var } v$	0	0.019	0.178	< 100
$\mathbf{E}w$	1.34	1.40	1.46	> 0.3
$\text{var } n_f$	0	3.54	11.1	< 100
$\mathbf{E}g$	0.87	0.80	0.73	> 0.4

2. SIMULATION

First the examined Strauss process was simulated by means of the Markov chain Monte Carlo (MCMC) technique. The idea of MCMC is as follows: let X be a finite point process with distribution Q . In order to generate samples of it a chain is constructed of point processes $X_0 \sim Q_0, X_1 \sim Q_1, \dots$ all on the same space such that $\lim_{t \rightarrow \infty} Q_t = Q$ weakly and it is assumed that X_n follows approximately the given equilibrium distribution Q for n large enough.

The Metropolis-Hastings algorithm is perhaps the most widely used tool for constructing Markov chains. Both the fixed and random number cases [4] were treated.

In the conditional Strauss process with $n(x) = k$, tightly clustered and regularly arranged patterns are formed for $\gamma > 0$ small and ρ exceeding certain value depending on k . For the unconditional Strauss process when β is large and γ is small (the number of points is large and the repulsion is great), the Metropolis-Hastings algorithm is inefficient: the attained number $\mathbf{E}n$ has an upper bound β and decreases with diminishing γ - see Tab. 3.

Table 2. Effect of variables R , γ on the selected unit tessellation characteristics: conditional Strauss process

R	γ	0.01	0.02	0.05	0.10	0.20	0.50	0.70	0.95
0.288	var v		0.160						
	$\mathbf{E}w$		1.46						
	var n_f		10.3						
	$\mathbf{E}g$		0.73						
0.4–0.7)*)*)*)*
0.72	var v	0.045	0.047	0.055		0.076	0.11		
	$\mathbf{E}w$	1.425	1.427	1.43		1.439	1.45		
	var n_f	5.41	5.54	5.94		7.09	8.66		
	$\mathbf{E}g$	0.79	0.78	0.77		0.76	0.74		
0.865	var v	0.035	0.039		0.055	0.066			
	$\mathbf{E}w$	1.411	1.415		1.43	1.44			
	var n_f	4.41	4.71		5.86	6.58			
	$\mathbf{E}g$	0.79	0.79		0.77	0.77			
1.01	var v		0.056						
	$\mathbf{E}w$		1.437						
	var n_f		5.52						
	$\mathbf{E}g$		0.76						
1.44	var v		0.213			0.20	0.12	0.105	
	$\mathbf{E}w$		1.49			1.49	1.49	1.47	
	var n_f		16.3			15.7	11.5	10.4	
	$\mathbf{E}g$		0.68			0.68	0.71	0.72	
2.88	var v		2.15				2.19	2.05	0.18
	$\mathbf{E}w$		1.23				1.24	1.24	1.46
	var n_f		26.3				25.7	26.5	11.6
	$\mathbf{E}g$		0.61				0.61	0.62	0.73

)* examined range of unconditional Strauss process - see Tab. 3

The second step consisted in construction of the tessellation by means of the incremental method with the nearest neighbour algorithm [6]. Edge effects have been carefully removed by wide protecting layer (*e.g.* only ≈ 1000 cells remained for the examination at $k = 3000$ in the conditional case). In the unconditional case ($\beta = 3000$), the attained number $\mathbf{E}n$, hence also the value of R at constant ρ , varied - see Tab. 3. The number of independent realizations ranged from 100 to 1000.

Main cell characteristics have been then determined by a direct calculation and their moments about the origin $\mu'_i(\bullet)$, $i = 1, 2, 3, 4$, estimated.

3. RESULTS

The obtained results are presented in the Tab. 2 for the conditional Strauss process and in Tab. 3 for the unconditional Strauss process. Only insufficient results have been obtained in the latter case, as the attained number of points produced in

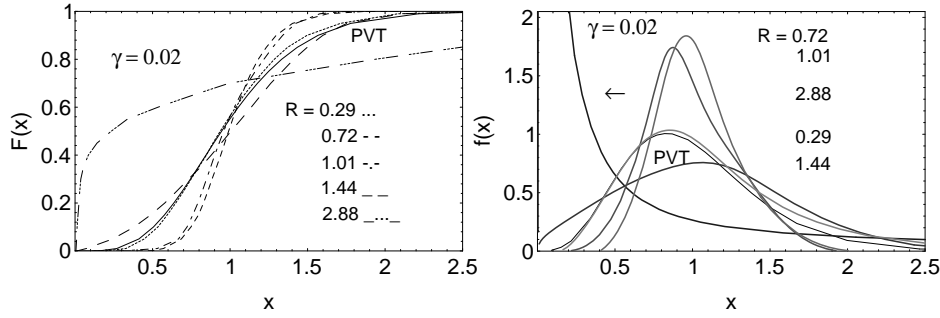


FIGURE 1. Distribution functions $F(x)$ and probability density functions $f(x)$ of the cell volume v at $\gamma = 0.02$ and variable R (note the high ordering at $R = 0.72$ and a heavy clustering at $R = 2.88$).

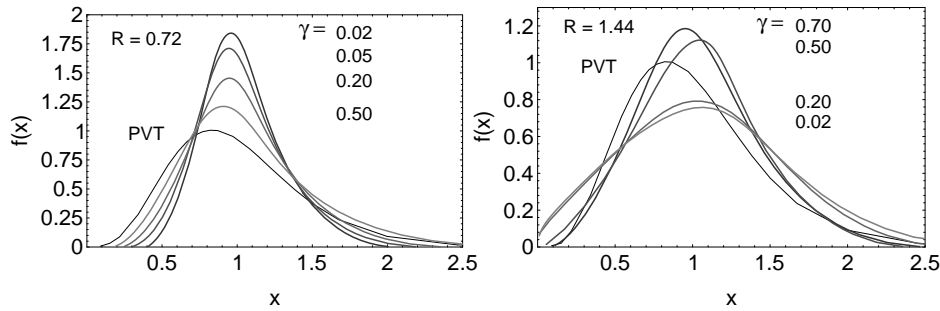


FIGURE 2. Probability density functions $f(x)$ of the cell volume (note gradually vanishing Poisson clusters with decreasing γ at $R = 0.72$ and gradually increasing amount of clustering with decreasing γ at $R = 1.44$).

the unit cube at a selected value of the parameter ρ decreased considerably with decreasing value of γ .

Table 3. Effect of variables R, γ on the selected unit tessellation characteristics unconditional Strauss process at $\rho = 0.05$ and $\beta = 3000$

γ	0.05	0.20	0.50	0.95
R	0.43	0.46	0.50	0.70
$\mathbf{E}n$	627	755	1105	2790
var v	0.07	0.085	0.108	0.152
$\mathbf{E}w$	1.44	1.44	1.45	1.44
var n_f	6.84	7.46	8.59	10.7
$\mathbf{E}g$	0.77	0.76	0.75	0.76

4. DISCUSSION OF RESULTS

A) Conditional Strauss process

Effect of variable parameter R at a small interaction parameter $\gamma (= 0.01, 0.02)$: the tessellation does not differ substantially from PVT at $R < 0.3$, a considerable ordering (var $v < 0.1$) takes place at $0.72 \leq R \leq 1.01$, the amount of Poisson clusters decreases along the sequence $R = 0.29 \rightarrow 0.72 \rightarrow 0.865$ and then again increases

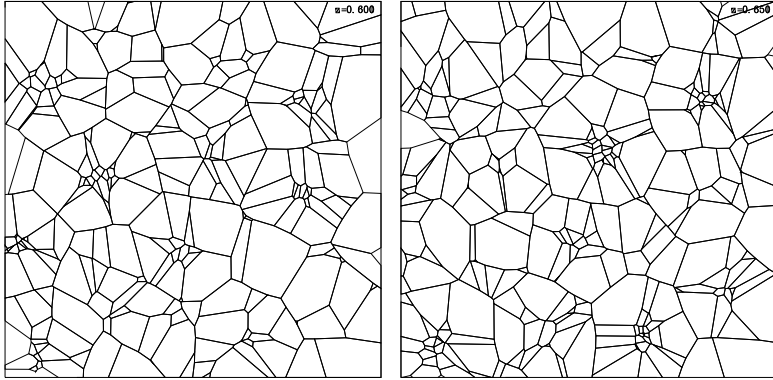


FIGURE 3. Examples of planar sections of 3D tessellations generated by the conditional Strauss process with $R = 2.88$, $\gamma = 0.5$.

with growing R ; note the corresponding shifts of the modes and variable weights of tails in Fig. 1. A tight clustering with the mode near $v \rightarrow 0_+$ is observed at $R = 2.88$.

Effect of variable interaction parameter γ at a medium value of the parameter R ($= 0.72, 0.865$): the value of 0.72 is already above the value of 0.554 of the mean nearest neighbour distance ρ_{PVT} in the stationary Poisson point process. The repulsion is pronounced at $\gamma \leq 0.2$ and still observable at $\gamma = 0.5$. At $0.01 \leq \gamma \leq 0.02$, the values of $\text{var } v$ and $\text{var } n_f$ are already lower than the corresponding values attainable in the tessellations generated by the Matérn type II process [7]. The shifts of the mode and the symmetrization of the cell volume probability density function are clearly perceptible, the both tails of the cell volume distributions are the lighter the smaller is γ - see Fig. 2. The equivalent diameter of the observed minimum cell in the samples (of the size 10^5 cells) $R_{min} = (6v_{min}/\pi)^{1/3}$ decreases from 0.85 ($\gamma = 0.02$, a strong repulsion) to 0.61 ($\gamma = 0.50$, a mild repulsion) in a rough agreement with the actual values of the parameter R .

Effect of variable interaction parameter γ at high values of R : A very similar tight clustering takes place at all but one (0.95) values of γ at $R = 2.88$, all characteristics are nearly the same in the broad examined range $[0.02, 0.7]$, which is rather surprising. The equivalent diameter R_{min} is of the order of 0.1 only, whereas the value of 0.5 can be expected for PVT and a sample of similar size. At $R = 1.44$, the amount of clustering is much less pronounced, however, it distinctly decreases with growing γ . In contrast to the case of medium and small values of R , the both tails of the cell volume distributions are the heavier the smaller is γ - Fig. 2. A similar value of $\text{var } v$ describes tessellations generated by Neyman-Scott process of Matérn clusters with the daughter number $N = 20$ and the ball diameter $R < 0.2\rho_{PVT}$. However, the quasi-regularity of cluster arrangement observable in 2D sections and number of hit small inner cells indicate that a comparison with tessellations generated by lattice cluster fields is more correct - then the estimate $N \approx 50$ would be more realistic [8, 9, 10]. The ordering of clusters is then similar as in the 2D case [4].

B) Unconditional Strauss process

The results can be incorporated into Tab. 2 - the row with *) - and then they do not differ substantially from the values obtained for the conditional Strauss process (see also Fig. 4). The obtained tessellations roughly correspond to the tessellations

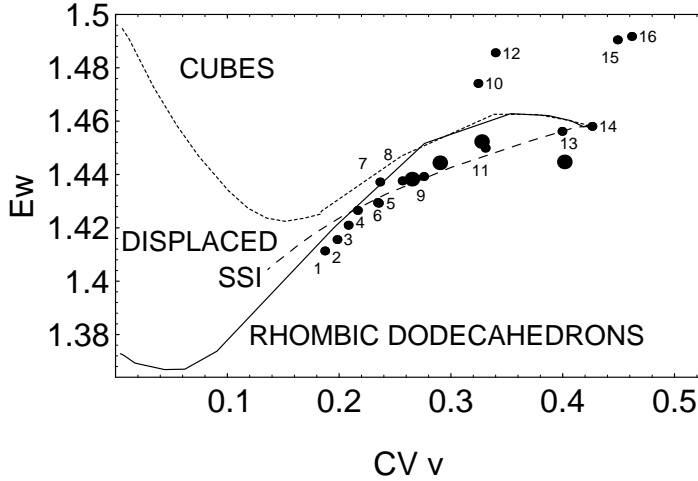


FIGURE 4. Mean widths of tessellations generated by displaced cubic simple and face centred cubic lattices, by the process of simple sequential inhibition (SSI) [7] and by examined cases of Strauss process (small numbered points - conditional process; great points - unconditional process); the tightly clustered cases 17–19 have been omitted (for explanation of low $\mathbf{E}w$ see [9]). The values of γ , R corresponding to the numbers in the plot are shown in the Tab. 5.

generated by the Matérn type II process [7] (Tab. 4). They may also be compared with the 2D simulation using Metropolis-Hastings algorithm [2]: at $\gamma = 0.75$, $\rho = 0.1$ and $\beta = 100$ in a unit square, the mean number of points $\overline{\mathbf{E}n} \approx 65 = 0.66\beta$ was attained. Renormalizing to a unit mean intensity, $R = \rho\sqrt{\overline{\mathbf{E}n}} \approx 0.1 \times 8.1 = 0.81$ and not 1 as expected. Similarly in Tab. 3: by interpolation between $\gamma = 0.5$ and 0.95 , the gain of points $1950/\beta$ is also $\approx 66\%$ at $\gamma = 0.73$ and $R = 0.62$.

Table 4. Selected characteristics of the unit tessellation generated by the 3D Matérn type II process

R	0.62	0.52	0.380	PVT
var v	0.057	0.088	0.134	0.178
$\mathbf{E}w$	1.43	1.44	1.45	1.46
var n_f	6.09	7.59	9.41	11.1
$\mathbf{E}g$	0.77	0.77	0.74	0.73

C) Conclusions

It can be concluded that if R is high ($\geq 5\rho_{PVT}$) clustering persists even at rather high values of γ (≈ 0.7) and a dissolution of clusters takes place only at γ as high as 0.95 . At $R \approx 2.6\rho_{PVT}$, clustering is distinct only at low values of γ , whereas partial order is established at higher values of γ and vanishes again at $\gamma \rightarrow 1$. Only at sufficiently low R , the degree of the order is inversely proportional to γ . On the other hand, ordering is poor even at small values of γ if R is low ($\leq 0.5\rho_{PVT}$). The results are comparable with the qualitative 2D results [4].

Table 5 Survey of examined cases (conditional Strauss process) - see Fig. 4

$R \setminus \gamma$	0.01	0.02	0.05	0.10	0.20	0.50	0.70	0.95
0.288		13						
0.72	3	4	5		9	11		
0.865	1	2		6	8			
1.01		7						
1.44		16			15	12	10	
2.88		18				19	17	14

Mean width $\mathbf{E}w$ together with CV v are two suitable characteristics of any tessellation; the comparison of $\mathbf{E}w$ vs CV v plots of tessellations generated by selected hard- and pseudo-hard-core processes with the values obtained in the present pilot study classifies the examined cases of the Strauss process in the broader framework. Clearly, lower values of γ and perhaps slightly higher values of R should be selected in order to obtain more regular point pattern and, consequently, a tessellation approaching isohedral tilings of the dodecahedral or tetrakaidecahedral types.

REFERENCES

- [1] GEYER, C.J., THOMPSON E.A.: Annealing Markov Chain Monte Carlo with Application to Ancestral Inference Analysis. *J. Amer. Statist. Assoc.* **90** (1995), 909-920.
- [2] GEYER, C.J., MØLLER J.: Simulation Procedures and Likelihood Inference for Spatial Point Processes. *Scand. J. Stat.* **21** (1994), 359-373.
- [3] MØLLER J.: Extensions of the Swendsen-Wang Algorithm for Simulating Spatial Point Processes. Research Report no.246, University of Aalborg, Aalborg 1992.
- [4] MØLLER J.: Markov Chain Monte Carlo and Spatial Point Processes. In: *Stochastic Geometry: Likelihood and Computation* (O.E. BARNDORFF-NIELSEN, W.S. KENDALL, M.N.M. VAN LIESHOUT, EDs.). Chapman and Hall, London 1999, p. 141-172.
- [5] MASE S., MØLLER J., STOYAN D., WAAGEPETERSEN R.P., DÖGE G.: Packing Densities and Simulated Tempering for Hard Core Gibbs Point Processes. Research Report R-99-2002, University of Aalborg, Aalborg 1999.
- [6] OKABE A., BOOTS B., SUGIHARA K.: Spatial Tessellations. J. Wiley & Sons, Chichester 1992.
- [7] PONÍŽIL P. AND SAXL I.: Properties of 3D Poisson hard-core and pseudo-hard-core fields II. Voronoi tessellations. In: *Proc. S⁴G, Int. Conf. on Stereology, Spatial Statistics and Stochastic Geometry*, (V. Beneš, J. Janáček and I. Saxl, eds.). JČMF, Praha 1999, p. 227-239. See also a substantial part of all data and a summarizing paper on the Internet address: <http://fyzika.zlin.vutbr.cz/voronoi/>.
- [8] SAXL I.: Analýza náhodných bodových vzdáleností a Voronoiovy teselace systémů. In: *Robust'98* (Antoch J. & Dohnal G., eds.). JČMF, Praha 1998, p. 161-178.
- [9] SAXL I. AND PONÍŽIL P.: 3D Voronoi tessellations of cluster fields. *Acta Stereol.* **17** (1998), 237-246.
- [10] SAXL I. AND PONÍŽIL P.: 3D Voronoi tessellations generated by Poisson and lattice cluster fields. *Acta Stereol.* **17** (1998) 247-252.
- [11] SAXL I., SÜLLEIOVÁ K., PONÍŽIL P.: 3D Simulations of intergranular fracture. In: *Proc. Int. Conf. "Fractography 2000"*, (Parilák L., ed.). Vysoké Tatry, 15 - 18. 10. 2000. ÚMV SAV, Košice 2000, p. 94-107.
- [12] SØRENSEN DAM T., THOMSEN B. J.: *Spatial Point Processes* (A Master of Science Thesis in Statistics). University of Aalborg, Aalborg 1999.
- [13] STOYAN D., KENDALL W. S. AND MECKE J.: *Stochastic Geometry and its Applications*. J. Wiley & Sons, New York 1995.
- [14] STOYAN D., STOYAN H.: *Fractals, Random Shapes and Point Fields*. J. Wiley & Sons, New York 1994.
- [15] STRAUSS D. J.: A model for clustering. *Biometrika* **63** (1975), 467-475.

E-mail address: bodlak@karlin.mff.cuni.cz, saxl@math.cas.cz, ponizil@math.cas.cz

MODELOVÁNÍ RŮSTOVÝCH KŘIVEK

MAREK BRABEC

ABSTRAKT. This paper presents a growth curve model for human growth data. It has a nonlinear regression form, allowing for interindividual variability in growth by introducing random effects describing variability in some of the model parameters. Interpretation of model parameters as well as some other features of biological interest is mentioned. The model is fitted to a longitudinal dataset and quality of the fit is checked from various viewpoints. Estimation of various features of anthropological interest is illustrated.

Резюме: Исследуется проблема оценивания параметров функции роста детей при помощи модели случайных эффектов.

Růstové křivky, zejména ty vzniklé jako výsledek měření velikosti živých subjektů jsou zajímavým zdrojem komplikací pro formulaci statistického modelu a následnou analýzu naměřených dat. Komplikace jsou spojeny

- s výraznou *nelinearity* (přítomností asymptot)
- *chybějícími daty* (nestejným rozvrhem měření pro různé subjekty)
- nezanedbatelnou *korelací* mezi měřeními provedenými na stejném subjektu.

Na analýzu růstových křivek tedy můžeme pohlížet jako na jistou směs problémů nelineární regrese a časových řad. Vzhledem k tomu, že počet měření provedených na jednom jedinci je poměrně malý (např. křivka pro tělesnou výšku dosahuje asymptoty kolem 18. roku věku a normálního jedince lze jen stěží nutit k více než 1 až 2 měřením za rok), musí být model z hlediska časových řad či procesů nutně poněkud skromnější. Výhodou je naopak to, že k dispozici je vícero nezávislých realizací (řad měření různých jedinců).

1. RŮSTOVÉ KŘIVKY DĚTÍ

Typická data (laskavě poskytnutá doc. Prokopcem) kterými se budeme dále zabývat, pocházejí z longitudinální studie z níž máme k dispozici měření tělesné výšky 85 chlapců a 86 dívek od 3 měsíců do 22 let (s různým počtem měření na dítě) ukazuje obrázek 1. Co se týče tvaru růstové křivky jako funkce času, existuje celá řada víceméně empirických modelů. Snadno použitelné a proto populární jsou modely polynomického tvaru (se všemi typickými nechtěnostmi). Mezi antropology patří ke klasice několik modelů nelineárního charakteru a různého stupně sofistikovanosti - od po intervalech formulovaných předpisů (bez požadavku spojitosti v hraničních bodech!) [Karlberg et al., 1987] až po různé spojité modely s asymptotou [Preece a Baines, 1978], [Jolicœur et al., 1988]. Typicky jsou v praxi takové křivky prokládány pro každého jedince zvlášť a výsledné parametry sumarizovány průměrováním. Jednou z alternativ je vícerozměrná analýza [Rao, 1965], založená na lineárním modelu a odhadu (nestrukturované) kovarianční matice mezi pozorováními v různých časech. Ta zohledňuje závislost mezi měřeními jednoho individua, nemá však přímou biologickou interpretaci. Odhad pak vyžaduje kompletní a poměrně

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62J02; Secondary 62J10, 62P10.

Klíčová slova. Růstové křivky, individuální data, průřezová data.

rozsáhlá data (bez „děr“ způsobených chybějícími měřeními i nedodržením zcela stejných časů měření u všech jedinců).

Chceme-li růst charakterizovat alespoň trochu realisticky, měli bychom se zajímat o model popisující nejen závislost průměrné hodnoty na čase (eventuelně i kovariátách), ale i variabilitu okolo ní, při zohlednění autokorelace mezi měřeními provedenými v různých časech na stejném jedinci. Biologicky interpretovatelný model by měl umožňovat rozklad celkové variability

- na část spojenou s odlišností dynamiky růstu mezi různými jedinci (tedy takřka jíc variabilitu *strukturální*)
- část spojenou s variabilitou uvnitř daného jedince (interpretovatelnou převážně jako *měřicí chyba*).

Rozklad na inter a intra-individuální variabilitu má poměrně dlouhou tradici v kontextu lineárního modelu se smíšenými efekty, tedy i v kontextu klasické analýzy longitudinálních dat - např. [Laird a Ware, 1982], včetně tzv. „hierarchických“ modelů polynomického tvaru [Goldstein, 1995], tedy polynomů s (některými) náhodnými koeficienty. Takové modely jsou však v podstatě čistě popisného charakteru - bez interpretace svého tvaru či hodnot koeficientů. Trpí samozřejmě neduhy známými ze situace bez přítomnosti náhodných efektů a navíc problémy spojenými s tím, že variabilita koeficientů implikuje jistý, dosti striktně vymezený tvar závislosti mezi rozptylem okolo průměrné křivky a časem.

Tvar nelineární regresní funkce, stejně jako model pro náhodné efekty by měl být kromě kvality empirického proložení diktován i věcnou interpretací. V následujícím se o formulaci jednoho takového modelu pokusíme.

2. FORMULACE MODELU

Chování růstových rychlostí (derivace růstové křivky tělesné výšky, Y'), ilustrované na obrázku 2 pro jedno konkrétní dítě (odhad pomocí smoothing spline) nás motivuje k tomu uvažovat pro výšku daného jedince (v mm) změřenou v čase x_j (let) model

$$(1) \quad k + p(1 - \exp(-a(x_j - 0.25))) + \sum_{l=1}^2 \frac{p_l}{1 + \exp(-t_l(x_j - m_l))} + \epsilon_{ij}$$

kde ϵ_{ij} má v zásadě interpretaci měřicí chyby (pomineme-li jistý systematický nesoulad mezi komplikovaným procesem růstu a hladkým, poměrně jednoduchým modelem). Regresní model tedy sestává z aditivních částí; dvou logistických křivek, exponenciály a konstanty. Pro derivace máme (v souladu s typickým empirickým chováním růstových rychlostí) dva píky logistického tvaru a počáteční exponenciální pokles. Interpretace parametrů je přímočará: p , p_1 , p_2 jsou celkové přírůstky v jednotlivých „fázích“ růstu, m_1 , m_2 odpovídají polohám logistických píků, hodnoty $\frac{1}{t_1}$, $\frac{1}{t_2}$ kontrolují jejich tvar.

Není bez zajímavosti si povšimnout formální podobnosti daného problému s problémem odhadu směsi několika parametrizovaných hustot. Exponenciální a logistické části hrají roli směřovaných měř. Komplikací zde je, že váhy samozřejmě nejsou normovány (naopak, jejich součet souvisí s celkovým přírůstkem od 3 měsíců do dospělosti a jako takový je parametrem značného praktického významu).

Při modelování variability růstové dynamiky mezi subjekty bereme v úvahu empirický fakt, dobře známý antropologům, totiž že podstatná část „strukturální“ variability, je spojena s proměnlivostí posledního píku růstové rychlosti (tzv. píku

pubertálního) – a to jak jeho polohy, tak tvaru a velikosti. To nás vede k následující specifikaci celkového nelineárního modelu se smíšenými efekty. Pro subjekty $i = 1, \dots, N$ a měření uvnitř i -tého subjektu $j = 1, \dots, n_i$:

$$(2) \quad Y_i(x_j) = K_i + P_i(1 - \exp(-a(x_j - 0.25))) + \frac{P_1}{1 + \exp(-t_1(x_j - m_1))} + \frac{P_{2i}}{1 + \exp(-T_{2i}(x_j - M_{2i}))} + \epsilon_{ij}$$

Některé „parametry“ individuálního modelu bereme nyní jako náhodné (normálně rozdělené) veličiny, proměnlivé mezi subjekty. Tedy: $K_i \sim N(k, \sigma_k^2)$, $P_i \sim N(p, \sigma_p^2)$, $M_{2i} \sim N(m_2, \sigma_{m_2}^2)$, $P_{2i} \sim N(p_2, \sigma_{p_2}^2)$, $T_{2i} \sim N(t_2, \sigma_{t_2}^2)$, $\epsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$, vše navzájem nezávislé. Kromě náhodného pubertálního píku zmíněného výše tedy ještě dovoluujeme interindividuální variabilitu ve velikosti přírůstku v počáteční (exponenciální) fázi a v konstantě.

Model má 9 parametrů spojených s průměry (tzv. *pevných efektů*), 5 *komponent rozptylu*, spojených s *náhodnými efekty* (tj. prvky „strukturální“ variability) a 1 komponentu rozptylu spojenou s *reziduální variabilitou* („měřicí chybou“). Počet parametrů je samozřejmě mnohem nižší než v praxi často používaném „individuálním“ modelu, který je prokládán pro každý subjekt zvlášť (kde máme počet parametrů individuální křivky krát počet subjektů a náhodné efekty se odhadují zcela bez jakékoli struktury přes subjekty).

3. ODHADY

Odhad parametrů (simultánně pevných efektů i komponent rozptylu) byl proveden s pomocí algoritmu NLME (Non Linear Mixed Effects) [Lindstrom a Bates, 1990], implementovaného v programovém balíku S-plus. Výsledkem je maximálně věrohodný odhad pevných efektů i komponent rozptylu a empiricky Bayesovský odhad náhodných efektů. Je založen na maximalizaci funkce

$$(3) \quad g(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\theta}, \sigma^2 | \mathbf{Y}) = - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (\mathbf{Y}_i - \boldsymbol{\eta}_i(\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{B}\mathbf{b}_i))^T (\mathbf{Y}_i - \boldsymbol{\eta}_i(\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{B}\mathbf{b}_i)) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{b}_i^T \text{diag}(\boldsymbol{\theta})^{-1} \mathbf{b}_i$$

$\boldsymbol{\beta} = (k, p, a, p_1, t_1, m_1, p_2, t_2, m_2)^T$ je vektor *pevných efektů*, $\mathbf{b}_i = (K_i - k, P_i - p, P_{2i} - p_2, T_{2i} - t_2, M_{2i} - m_2)^T$ je vektor *náhodných efektů*, $\boldsymbol{\eta}(\cdot)$ je dána specifikací modelu výše, \mathbf{A}, \mathbf{B} jsou příslušné matice jejichž modifikací můžeme snadno modelovat i vliv případných kovariát, $\boldsymbol{\theta} = (\sigma_K^2, \sigma_P^2, \sigma_{P_2}^2, \sigma_{T_2}^2, \sigma_{M_2}^2)^T$ je vektor *komponent rozptylu* náhodných efektů, \mathbf{Y}_i je vektor pozorování na i -tém subjektu. Vidíme tedy, že prakticky jde o minimalizaci reziduálního součtu čtverců, s penalizací variability náhodných efektů. Na druhý člen pravé strany (3) se můžeme dívat i např. jako na člen spojený s (normálním) apriorním rozdělením „náhodných koeficientů“ apod. Maximalizace probíhá iterováním dvou kroků:

- (1) Kroku PD (Pseudo Data), ve kterém jsou aktualizovány hodnoty $\boldsymbol{\beta}$ a $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_N$ (při ostatních parametrech fixovaných na hodnotách z předchozího kroku). Výpočet je realizován doplněním pozorovaných dat tzv. *pseudodat* a následným řešením problému na nelineární nejmenší čtverce. Jde o obdobu metody, známé z lineárních modelů se smíšenými efekty, kde odhady

pevných i náhodných efektů jsou řešením soustavy „mixed model equations“. Ekvivalentně tyto rovnice dostaneme doplněním pozorovaných dat tzv. pseudodaty.

- (2) Kroku LME (Linear Mixed Effects), ve kterém jsou aktualizovány hodnoty β, θ, σ^2 . Je obdobou výpočtů v lineárním modelu se smíšenými efekty, kde je MLE odhad komponent rozptylu založen na marginálním rozdělení $p(\mathbf{Y}) = \int p(\mathbf{Y} | \mathbf{b})p(\mathbf{b})d\mathbf{b}$. Vzhledem k nelinearitě η je zmíněná integrace obtížná, proto je skutečná věrohodnostní funkce nahrazena aproximací založenou na normalitě a lokální linearizaci η okolo odhadů $\beta, \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_N$ z předchozího kroku.

Počáteční hodnoty pro pevné efekty byly získány jako průměr, resp. medián parametrů individuálně proložených křivek, pro náhodné efekty pak $\mathbf{0}$. Takto získané počáteční hodnoty byly navíc opakovaně perturbovány náhodnými odchylkami (vygenerovanými z odhadnutého rozdělení náhodných efektů) pro posouzení stability konečných odhadů.

4. PROLOŽENÝ MODEL

Proložení modelu naměřenými daty se zdá být vcelku uspokojivé - viz obr. 3 reziduí pro chlapce. Otázkou zůstává do jaké míry kvalita proložení pro věk okolo 2-2.5 let. Dočasná deprese hodnot naměřených v tomto období může souviset s esovitým zakřivováním páteře na počátku „chodícího období“. Dále se můžeme zajímat o kvalitu proložení z hlediska odhadu „marginálních“ charakteristik $\mu(x) := EY(x)$, $\sigma(x) := \sqrt{\text{var}Y(x)}$. Srovnání odhadů z modelu (získanými jako průměr, resp. směrodatná odchylka, simulací z modelu při odhadnutých parametrech) s odhady empirickými (tj. průměry a směrodatnými odchylkami (s) spočtenými zvlášť pro jednotlivé časy) poskytuje obrázek 4. „Vybočující“ empirické odhady směrodatných odchylek v pravé části křivky jsou založeny na velmi nízkém počtu pozorování (do 4). Podobně vypadá srovnání pro kvantily, včetně poměrně extrémních (0.1 a 0.9).

Z přítomnosti individuálních náhodných efektů je zřejmé, že model implikuje jistý stupeň závislosti mezi měřeními provedenými na témže subjektu. Obrázek 5 porovnává odhad korelace mezi výškou ve věku x let a ve 3 měsících, resp. 5 letech. Vidíme, že i z hlediska již poněkud subtilnější charakteristiky jakou je korelační struktura uvnitř opakovaných měření se model nechová špatně. Obrázky také ilustrují poměrně komplikované, nestacionární chování řady měření jednoho subjektu. Není také nezajímavé si povšimnout toho, že empirické korelace naznačují, že $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \text{Cor}(Y(x + \Delta), Y(x)) \neq 1$, tedy jev známý v kontextu „spatial analysis“ jako tzv. *nugget effect*. I tento aspekt je vcelku věrně reprodukován našim modelem s poměrně velmi jednoduchou strukturou náhodných efektů.

Odhady parametrů (pevných efektů i komponent rozptylu) shrnuje pro chlapce i dívky následující tabulka.

Efekt	Parametr	Chlapci	Dívky
Pevné efekty	m_1 (let)	7.0	5.3
	m_2 (let)	13.4	11.2
	p_1 (mm)	438.8	383.1
	p_2 (mm)	310.7	339.8
	t_1	0.479	0.593
	t_2	1.011	0.801
	a	0.435	0.586
	p (mm)	431.8	353.7
	k (mm)	617.9	595.4
Komponenty rozptylu	σ (mm)	10.62	9.98
	σ_{m_2} (let)	0.81	0.68
	σ_{p_2} (mm)	41.0	42.1
	σ_{t_2}	0.209	0.132
	σ_p (mm)	46.1	32.4
	σ_k (mm)	17.2	18.2

Odtud jasně vidíme některé dobře známé rozdíly v dynamice růstu mezi pohlavími. Např. poslední pik růstové rychlosti („pubertální spurt“) nastupuje u dívek dříve a je poněkud plošší. U dívek je patrný také rychlejší pokles růstové rychlosti v období po narození.

5. ODVOZENÉ CHARAKTERISTIKY

Z modelu lze poměrně snadno získat informaci o poněkud subtilnějších charakteristikách růstových křivek. Derivací odhadu průměrné křivky lze (za předpokladu zaměnitelnosti pořadí derivování a integrování) snadno získat křivku „průměrné růstové rychlosti“ či zrychlení jako explicitní funkce parametrů. Obrázek 6 obsahuje takové odhady $\frac{d}{dx}\widehat{\mu}(x)$ a $\frac{d^2}{dx^2}\widehat{\mu}(x)$.

Mezi antropology se těší značné popularitě i charakteristiky komplikovanější, jako je např. poloha maxima rychlosti v pubertálním spurtu, spolu s hodnotou výšky a růstové rychlosti v tomto bodě. Zájem je přitom nejen o odhad populačního průměru ale i o odhad variability takových veličin mezi individui. Pro pubertální spurt dostáváme z proloženého modelu následující hodnoty:

Veličina	Pohlaví	Střední hodnota	Směrodatná odchylka
Poloha maxima, x_0 (v letech)	Chlapci	13.2	0.8
	Dívky	10.9	0.7
Výška v maximu rychlosti, $Y(x_0)$ (v mm)	Chlapci	1609	52
	Dívky	1471	39
Maximální rychlost, $\dot{Y}(x_0)$ (v mm/rok)	Chlapci	88	13
	Dívky	76	7.2

6. PODMÍNĚNÉ STANDARDY

Jedním z hlavních praktických důvodů pro měření růstu dětí je potřeba tzv. „růstových standardů“ pro děti různého věku jako prostředku pro posuzování toho zda daný jedinec roste méně, stejně nebo více než je pro danou populaci typické. Standardy jsou tedy dány pomocí několika kvantilů rozdělení výšky. Jsou stanovovány

různým způsobem, v praxi však nejčastěji s referencí k normalitě, z průměru a směrodatné odchylky pro děti daného věku. V každém případě však po jednotlivých hodnotách věku (bodově). Takovéto standardy lze samozřejmě konstruovat i z tzv. *průřezových studií*, kdy jsou změřeny ve stejné době děti různého věku, každé jen jednou. Naopak longitudinální data spolu s naším modelem umožňují zkonstruovat kromě výše zmíněných standardů „marginálních“ i standardy „podmíněné“ - tedy standardy typu podmíněných kvantilů (kvantil výšky ve věku x_2 pro jedince, jehož výška ve věku $x_1 < x_2$ je dána). Takové podmíněné standardy mohou být prakticky užitečné např. pokud má být posouzeno opakované měření jednoho jedince, jež byl při prvním měření dle „marginálního“ standardu posouzen jako „malý“ s cílem rozeznat zda se mezi prvním a druhým měřením jeho původní zaostávání v růstu ještě dále prohlubuje nebo zda je jeho růst již vpořádku byt je jeho celková výška nižší díky nižšímu tempu růstu před prvním měřením. V praxi není neobvyklé, že bodově konstruovaný standard je nesprávně použit jako standard simultánní pro obě měření. Obrázek 7 ilustruje jak se rozchází (aproximace pro) podmíněný standard a standard marginální. Zobrazena je střední hodnota (pro chlapce), spolu s 20. a 80. percentilem. Plnou čarou marginální, tečkovaně podmíněné hodnoty, spočtené pro každý čas zvlášť (za podmínky, že výška 5 let je na úrovni marginálního 20. percentilu).

Podmíněný standard lze snadno získat z našeho modelu s pomocí jednoduché aproximace dvojrozměrného rozdělení výšek v časech x_1, x_2 normálním rozdělením jehož momenty jsou získány Taylorovým rozvojem. S ohledem na nelinearitu regresní funkce vzhledem k náhodným efektům, nedostaneme střední hodnotu $\mu(x)$ pouhým vyhodnocením „náhodných parametrů“ v jejich střední hodnotě. Takovéto vyhodnocení, $\mu_1(x)$ je jen první aproximací. Druhé přiblížení pak dostáváme jako $\mu_2(x) := \mu_1(x) + (\exp(-t_2(x - m_2)) - 1) \frac{p_2 \exp(-t_2(x - m_2))}{2(1 + \exp(-t_2(x - m_2)))^3} (\sigma_{m_2}^2 t_2^2 + \sigma_{t_2}^2 (x - m_2)^2)$. Z provedených srovnání je patrné, že i takto jednoduchá aproximace dává překvapivě dobré výsledky. Podobně dostáváme přibližnou marginální směrodatnou odchylku $\sigma_1^2(x)$ i kovarianci $c_1(x_1, x_2)$ mezi měřeními v časech x_1 a x_2 . Přibližné podmíněné normální rozdělení $Y(x_2)$ dáno $Y(x_1) = y_1$ má pak momenty $\mu_2(x_2) + \frac{c_1(x_1, x_2)}{\sigma_1^2(x_1)}(y_1 - \mu_2(x_1))$ a $\sigma_1^2(x_2) - \frac{c_1^2(x_1, x_2)}{\sigma_1^2(x_1)}$. Odtud pak již snadno dostáváme i kvantily.

Jiným, mezi antropology živě diskutovaným tématem je i spor o „křížení růstových kanálů“, tedy spor o to nakolik je či není obvyklé, že jedinec nacházející se svou výškou v intervalu $I_1 := (F^{-1}(p_{11}, x_1), F^{-1}(p_{12}, x_1))$ daném „marginálními“ kvantily v čase x_1 je v čase x_2 mimo interval $I_2 := (F^{-1}(p_{21}, x_2), F^{-1}(p_{22}, x_2))$ s $p_{21} = p_{11}, p_{22} = p_{12}$. Pomocí výše popsané normální aproximace snadno spočteme pravděpodobnost $P\{Y(x_2) \in I_2 | Y(x_1) \in I_1\}$ pro libovolné I_1, I_2 . Obrázek 8 ukazuje tuto pravděpodobnost pro chlapce s $p_{11} = 0.1, p_{12} = 0.2$, tři různá x_1 a o 2.5 roku pozdější x_2 : 9.2; 11.7 (plnou čarou), 4.2; 6.7 (tečkovanou čarou), 0.25; 2.75 (čerchovanou čarou). Čísla 1; ...; 10 na horizontální ose odpovídají volbě I_2 s $p_{21} = 0, p_{22} = 0.1; \dots; p_{21} = 0.9, p_{22} = 1$. Vidíme tedy, že tendence zůstávat ve stejném tzv. „růstovém kanálu“ (intervalu vymezeném stejnými kvantily) silně závisí na uvažovaném počátečním věku - nejvyšší je mezi obdobím počátečního prudkého růstu a obdobím variabilního posledního píku růstové rychlosti. Variabilita tohoto píku (tvaru i polohy) ke „křížení růstových kanálů“ výrazně přispívá.

7. PRŮŘEZOVÉ STUDIE

Model, o kterém jsme mluvili byl navržen pro longitudinální data. Zajímavé může být, jak se chová v situaci na kterou nebyl cvičen, tedy při použití na data ze studie průřezové. Je třeba poznamenat, že rozdíl mezi těmito typy studií nespočívá jen ve formátu dat (longitudinální s opakovanými měřeními téhož jedince, průřezové jen s jedním měřením), ale částečně i ve struktuře studované populace. Jde o to, že v longitudinální studii jsou typicky sledováni jedinci s podobným rokem narození, zatímco v průřezové studii se kalendářní rok narození samozřejmě značně liší. To může hrát podstatnou roli v souvislosti s tzv. sekulárním trendem (tak antropologové říkají odlišnostem v dynamice růstu různých ročníků narození) např. pozdější ročníky mají tendenci nabývat dospělé výšky dříve).

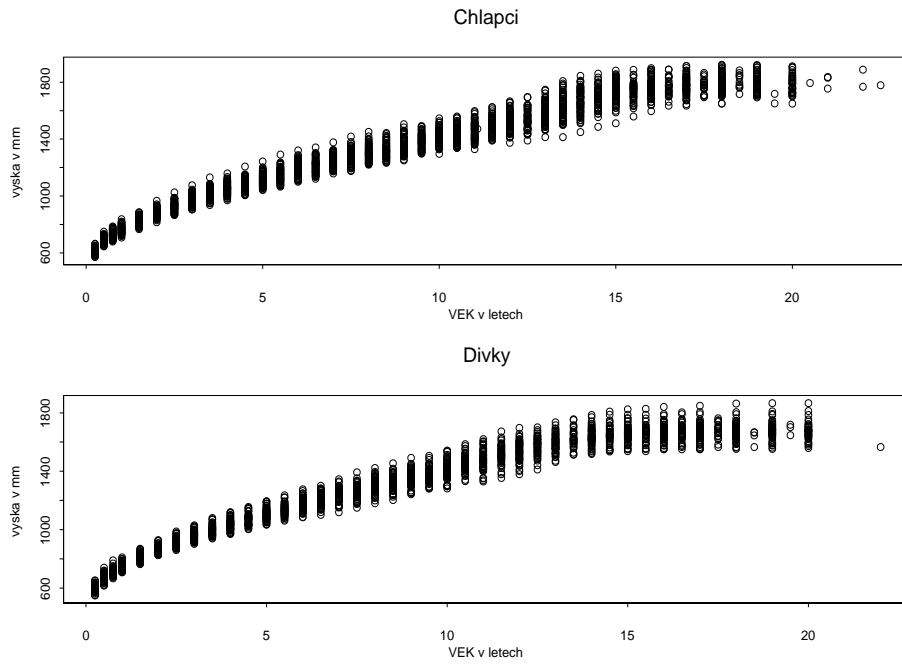
Průřezová data (ve formě průměrů a směrodatných odchylek výšek, spočtených po jednotlivých letech věku) byla proložena aproximacemi zmíněnými výše.

- Nejprve průměry aproximací střední hodnoty dané modelem,
- potom směrodatné odchylky aproximací $\sigma_1(x)$ (přičemž byly odhadnuty komponenty rozptylu, pevné efekty byly fixovány na hodnotách z prvního kroku).

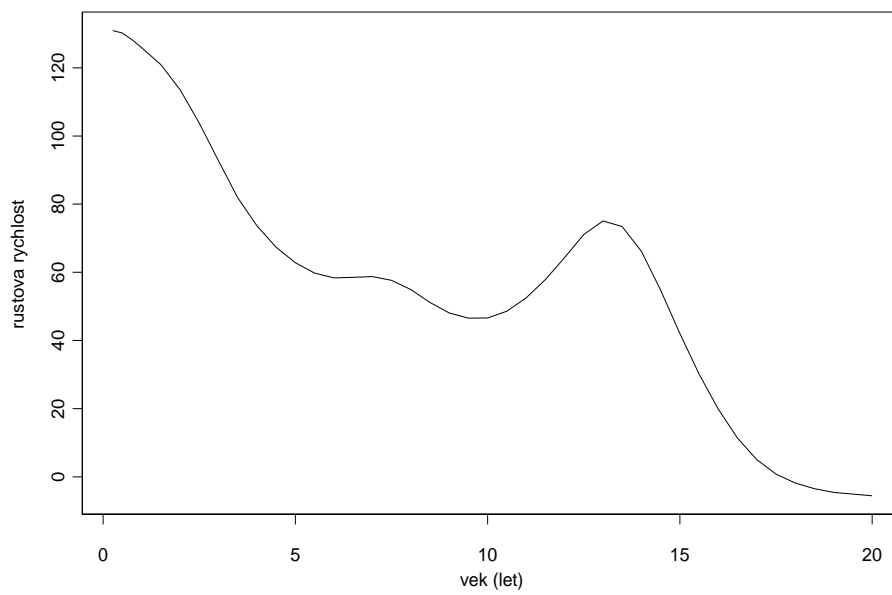
Obrázek 9 srovnává data pro chlapce ze studie [Lhotská et al., 1993] (průměry resp. směrodatné odchylky jako kroužky) a odhady z (aproximace) modelu (plná čára). Vidíme, že i v této situaci není proložení špatné, včetně vystižení poměrně komplikovaného tvaru závislosti marginální variability na věku. Mírné podhodnocení marginální směrodatné odchylky v předpubertálním období může být způsobeno přítomností sekulárního trendu, který vnáší do dat další zdroj variability (spojený s rozdílným *tvar*em růstové křivky pro různé ročníky narození zastoupené ve studii) s nímž longitudinální model nepočítá. Toto vysvětlení je podpořeno i tím, že proložení je lepší pro pozdější průřezové studie, v nichž je dle antropologů sekulární trend mezi sledovanými ročníky slabší.

LITERATURA

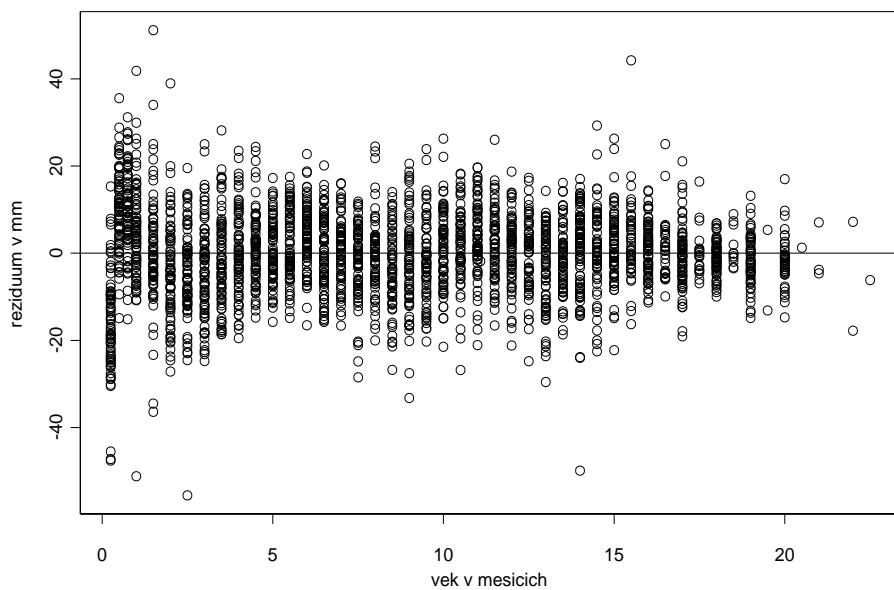
- [Goldstein, 1995] Goldstein H. (1995): Multilevel statistical models. (2. vyd.) Edward Arnold. London.
- [Jolicoeur et al., 1988] Jolicoeur P., Pontier J., Pernin M.O., Sempe M. (1988): A lifetime asymptotic growth curve for human height. *Biometrics*, 44, 995-1003
- [Laird a Ware, 1982] Laird N.M., Ware J.H. (1982): Random-effects models for longitudinal data. *Biometrics*, 38, 963-974
- [Lhotská et al., 1993] Lhotská L., Bláha P., Vignerová J., Roth Z., Prokopec M. (1993): 5. celostátní antropologický výzkum dětí a mládeže, 1991 (české země). Antropologické charakteristiky. SZÚ Praha.
- [Lindstrom a Bates, 1990] Lindstrom M.J., Bates D.M. (1990): Nonlinear mixed effects models for repeated measures data. *Biometrics*, 46, 673-687
- [Karlberg et al., 1987] Karlberg J., Fryer J.G., Engstrom I., Karlberg P. (1987): Analysis of linear growth using a mathematical model. II. From 3 to 21 years of age. *Acta Paediatr. Scand. Suppl.* 337, 12-29
- [Preece a Baines, 1978] Preece M.A., Baines M.J. (1978): A new family of mathematical models describing the human growth curve. *Annals of Human Biology* 5, 1-24
- [Rao, 1965] Rao C.R. (1965): The theory of least squares when the parameters are stochastic and its application to the analysis of growth curves. *Biometrika*, 52, 447-458



OBRÁZEK 1. Data

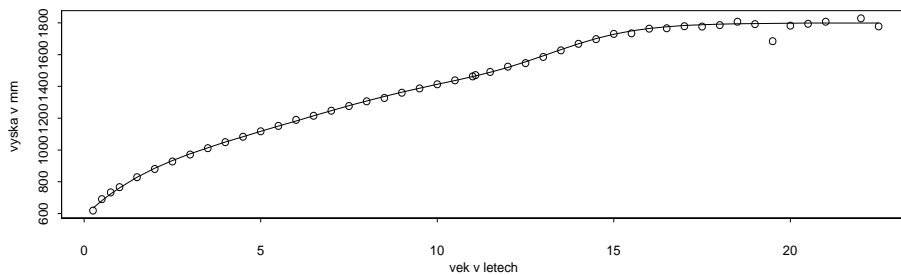


OBRÁZEK 2. Odhad růstové rychlosti jednoho chlapce

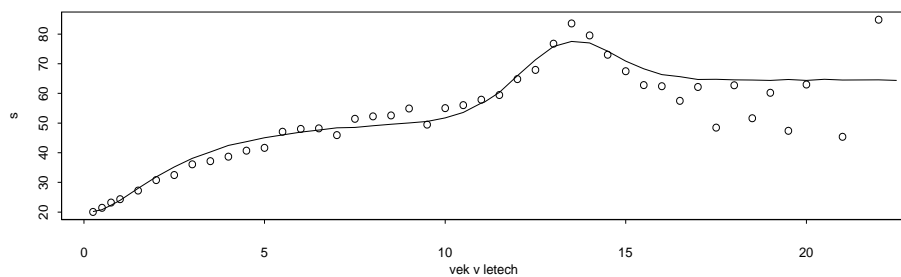


OBRÁZEK 3. Rezidua pro chlapce

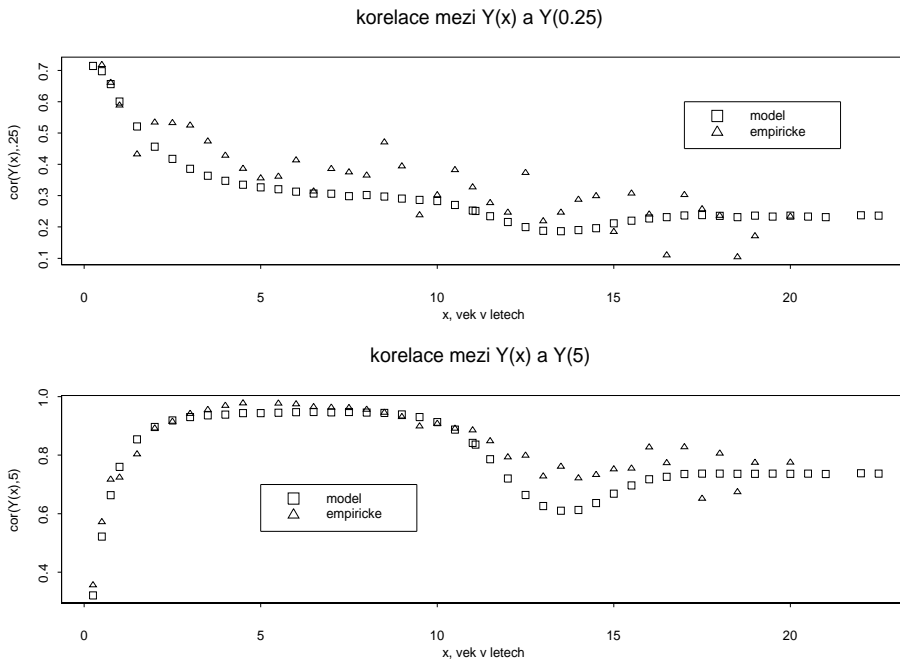
Chlapci, model vs. empirická růstová křivka



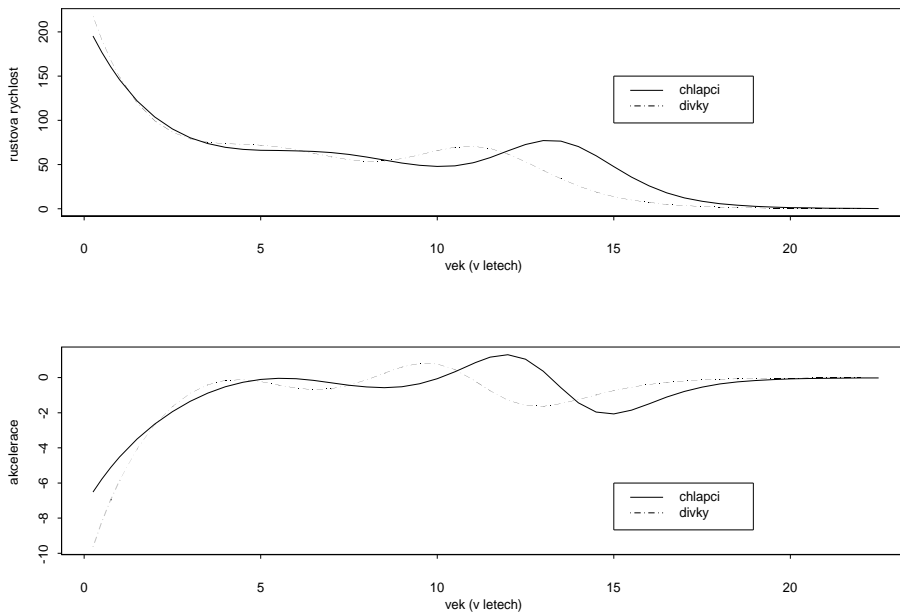
Chlapci, s, model vs. empirická



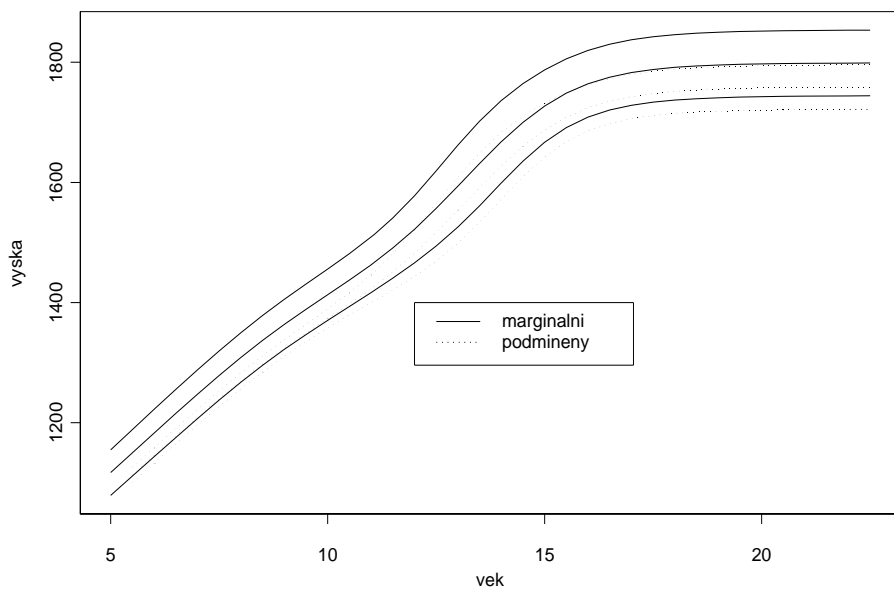
OBRÁZEK 4. Marginální charakteristiky pro chlapce



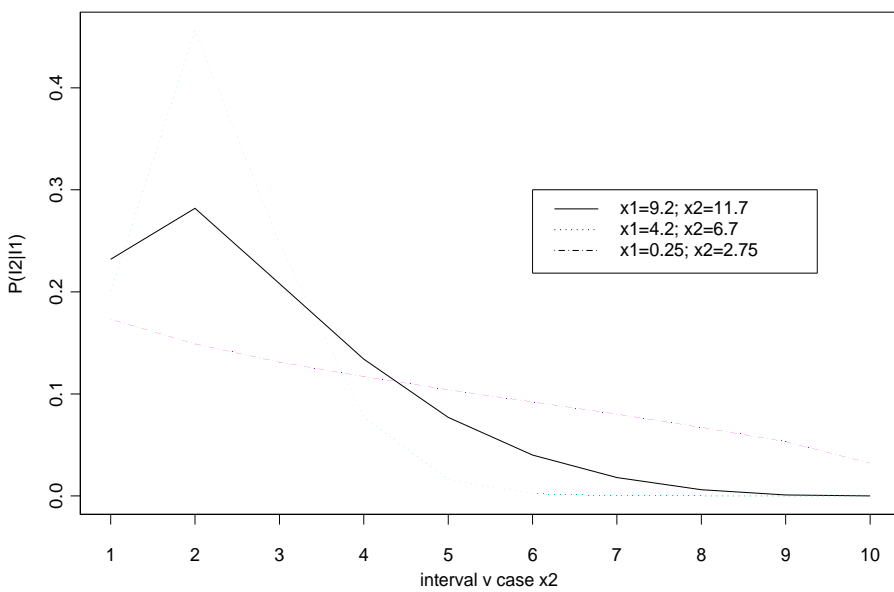
OBRÁZEK 5. Korelace mezi výškou ve dvou vybraných časech, chlapci



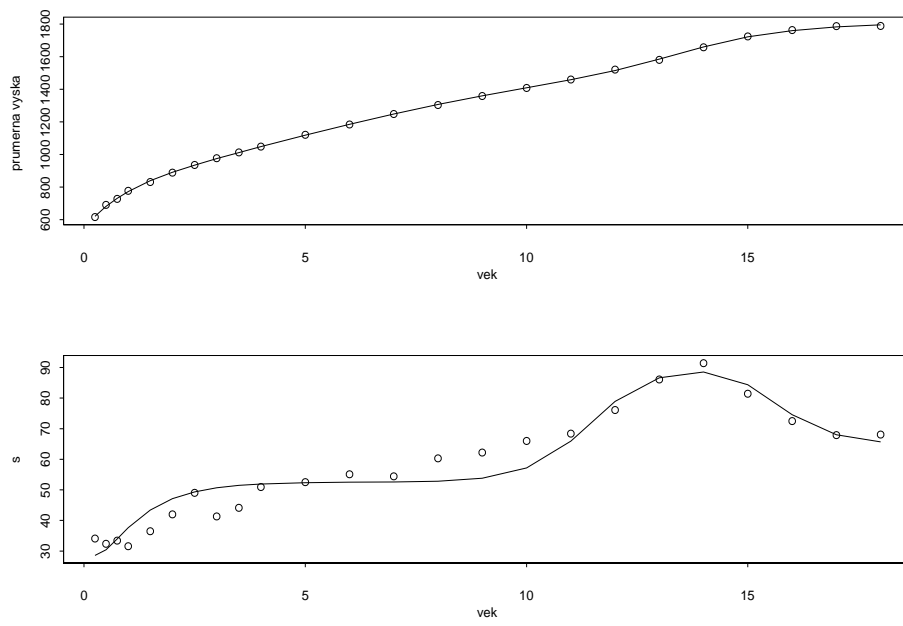
OBRÁZEK 6. $\frac{d}{dx}\widehat{\mu}(x)$ a $\frac{d^2}{dx^2}\widehat{\mu}(x)$



OBRÁZEK 7. „Marginální“ a „podmíněný standard“, chlapci



OBRÁZEK 8. Pravděpodobnost přechodu mezi „růstovými kanály, chlapci“



OBRÁZEK 9. Proložení průřezových dat pro chlapce

APLIKACE SHLUKOVÉ ANALÝZY V EKOLOGII

MARIE BUDÍKOVÁ

ABSTRAKT. In this paper, the basic principles of hierarchical cluster analysis are described. An example of calculation and application of cluster analysis is presented. This example illustrates how the different regions in Brno can be classified by means of annual concentrations of SO_2 .

Резюме: Эта работа показывает главные принципы иерархической группировки объектов. Показан один пример этой группировки. Станции в городе Брно вводятся в группы на основании концентраций SO_2 .

1. VYMEZENÍ PROBLÉMU

Na katedře geografie Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity v Brně byly v rámci bakalářské práce [5] shromážděny údaje o průměrných měsíčních hodnotách oxidu siřičitého v období 1984 - 1998 na deseti monitorovacích stanicích na území města Brna. Jednalo se o stanice umístěné v lokalitách Dobrovského, Húskova, Krasová, Kroftova, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita, Polní, Přízřenice, Skaunicové, Soběšice a Tuřany, ve zkratkách DOB, HUS, KRA, KRO, MZL, POL, PRI, SKA, SOB, TUR. Rozmístění stanic na území Brna znázorňuje obr. 1



Obr. 1 - Rozmístění monitorovacích stanic na území Brna

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62H30; Secondary 62P12.

Klíčová slova. Aglomerativní hierarchické shlukování, dendrogram, kofenetický koeficient korelace, fúzní koeficient.

Příspěvek vznikl s podporou výzkumného záměru MŠMT MSM 143100001.

Tyto údaje by měly - mimo jiné - posloužit k řešení problému optimalizace sítě monitorovacích stanic. Cílem tedy bylo najít stanice, které mají podobné rysy chování. K dosažení tohoto cíle byly použity postupy shlukové analýzy. Výpočty byly provedeny pomocí systému SPSS 8.0.

Uvedené stanice jsou obhospodařovány jednak brněnskou pobočkou Českého hydrometeorologického ústavu (to jsou stanice KRO, MZL, PRI, SOB, TUR) a jednak Městskou hygienickou stanicí (DOB, HUS, KRA, POL, SKA). Každá z těchto institucí však zjišťuje hodnoty SO_2 jinou metodou - ČHMÚ gravimetrickou a MHS aspiračně kolorimetrickou. Teprve od r. 1993 jsou výsledky kolorimetrické metody přepočítávány tak, aby odpovídaly výsledkům metody gravimetrické.

Do našeho zpracování tedy byly zahrnuty údaje až od r. 1993. Zabývali jsme se průměrnými ročními koncentracemi SO_2 . Podle zákona o ochraně ovzduší před znečišťujícími látkami činí nejvyšší přípustná průměrná roční koncentrace SO_2 $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

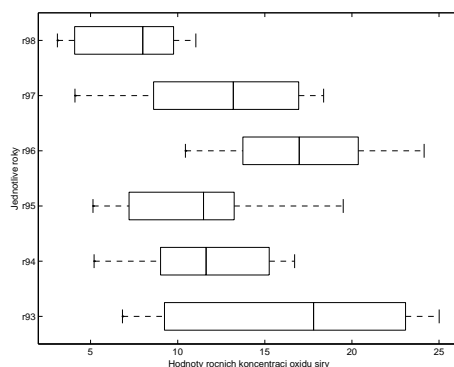
2. POPIS A ÚPRAVA DAT

Tabulka 1 obsahuje hodnoty průměrných ročních koncentrací SO_2 v $\mu\text{g}/\text{m}^3$ v letech 1993 - 1998 na sledovaných deseti stanicích.

Stanice	Rok pozorování					
	1993	1994	1995	1996	1997	1998
DOB	6.828	5.202	5.137	11.568	4.104	3.097
HUS	9.241	9.281	10.259	10.442	7.035	3.857
KRA	7.205	5.535	5.197	13.741	8.651	4.085
KRO	24.039	9.018	12.237	18.189	15.601	9.762
MZL	23.079	16.222	13.353	20.363	15.312	7.925
POL	25.005	14.568	10.723	15.760	11.068	4.916
PRI	15.874	15.251	13.241	19.435	16.943	8.081
SKA	14.297	9.490	7.209	14.434	10.961	8.063
SOB	19.728	13.772	12.943	20.948	17.564	11.039
TUR	22.524	16.708	19.502	24.144	18.377	11.024

Tabulka 1 - Průměrné roční koncentrace SO_2

Prvním krokem při zpracování naměřených koncentrací bylo provedení průzkumové analýzy dat pomocí krabicových diagramů.



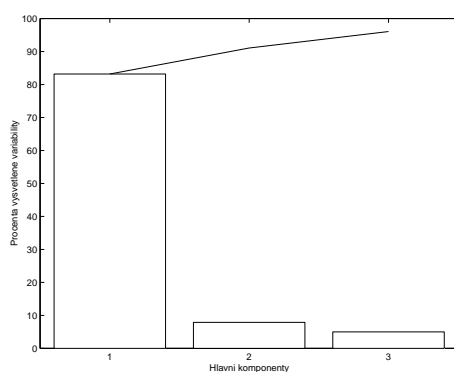
Obr. 2 - Krabicové diagramy ročních koncentrací oxidu siřičitého

Z obr. 2 je zřejmé, že údaje v jednotlivých letech vykazují dosti rozdílnou variabilitu, největší v r. 1993, nejmenší v r. 1998. Přistoupili jsme tedy ke standardizaci a nadále pracovali se standardizovanými hodnotami.

3. METODA HLAVNÍCH KOMPONENT

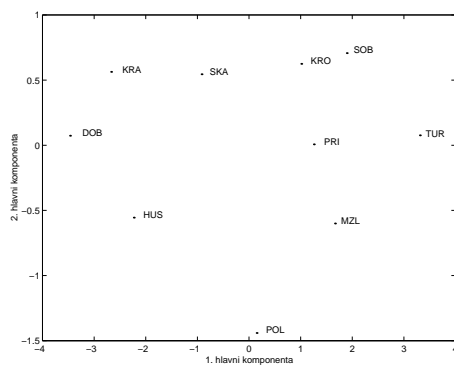
Při grafickém znázornění vícerozměrných dat se velmi často používá metoda hlavních komponent, která informace obsažené v datech dokáže vyjádřit několika málo novými proměnnými, které jsou získány jako lineární kombinace původních proměnných. Nazývají se hlavní komponenty.

Z Paretova diagramu hlavních komponent sestrojeného pro naše data vyplývá, že první hlavní komponenta vyčerpává asi 83 % variability obsažené v datech, druhá asi 8 % a třetí pouhých 5 %.



Obr. 3 - Paretoův diagram hlavních komponent

Rozmístění stanic na ploše prvních dvou hlavních komponent je znázorněno na obr. č. 4.



Obr. 4 - Poloha stanic v novém souřadném systému

Z obr. 4 bychom mohli usoudit, že stanice DOB, KRA, HUS, SKA tvoří jeden shluk, stanice KRO, SOB, PRI, TUR, MZL druhý shluk a stanice POL se chová poněkud atypicky.

4. SHLUKOVÁ ANALÝZA

4.1. Cíl shlukové analýzy. Cílem shlukové analýzy je rozřídění n objektů, z nichž každý je popsán p -rozměrným vektorem pozorování, do několika pokud možno homogenních shluků. Přesný počet shluků většinou není předem znám. Požadujeme, aby objekty uvnitř jednotlivých shluků si byly podobné co nejvíce, zatímco objekty z různých shluků si mají být podobné co nejméně.

4.2. Podobnost objektů. Podobnost či rozdílnost objektů posuzujeme pomocí různých měr. Pro proměnné intervalového či poměrového typu se nejčastěji používá euklidovská vzdálenost. Vzdálenosti vypočtené pro všechny dvojice objektů se uspořádají do matice vzdáleností. Je zřejmé, že je to čtvercová symetrická matice, která má na hlavní diagonále nuly.

4.3. Hierarchické shlukování. Při aplikacích shlukové analýzy se velmi často používá aglomerativní hierarchická procedura. Její princip spočívá (viz [4]) v postupném slučování objektů, a to nejprve nejbližších a v dalších krocích pak stále vzdálenějších.

Algoritmus:

- 1. krok:** Každý objekt považujeme za samostatný shluk.
- 2. krok:** Najdeme dva shluky, jejichž vzdálenost je minimální.
- 3. krok:** Tyto dva shluky spojíme v nový, větší shluk a přepočítáme matici vzdáleností. Její řád se sníží o 1. Vrátime se na 2. krok.

Funkce algoritmu končí, až jsou všechny objekty spojeny do jediného shluku.

Vzdálenost mezi shluky se počítá různými způsoby. V našem případě jsme použili tři metody, a to metodu nejbližšího souseda, nejvzdálenějšího souseda a metodu průměrné vazby.

Popis metod:

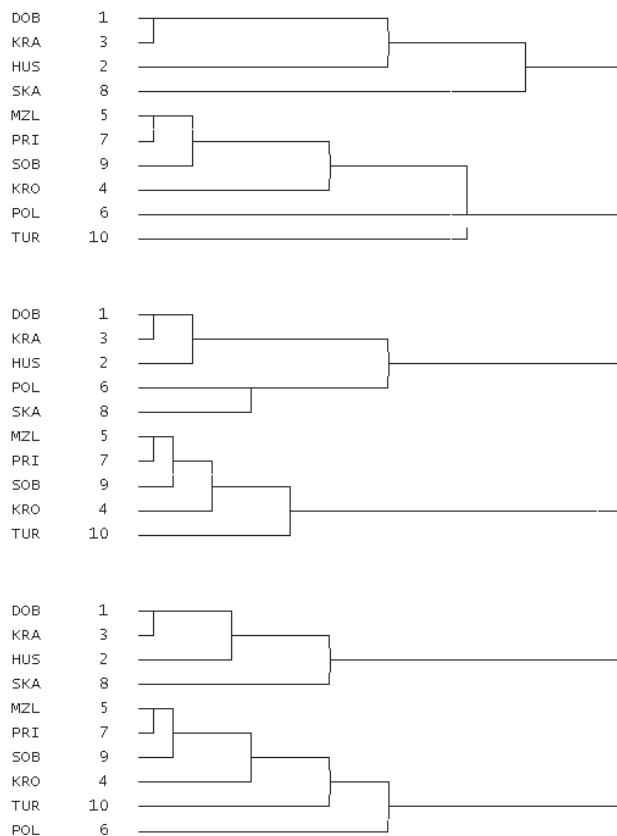
Metoda nejbližšího souseda: Vzdálenost mezi dvěma shluky je minimem ze všech vzdáleností mezi jejich objekty.

Metoda nejvzdálenějšího souseda: Vzdálenost mezi dvěma shluky je maximem ze všech vzdáleností mezi jejich objekty.

Metoda průměrné vazby: Vzdálenost mezi dvěma shluky je průměrem ze všech vzdáleností mezi jejich objekty.

Výsledky aglomerativní hierarchické procedury se zpravidla znázorňují pomocí dendrogramu, což je posloupnost dvojic $\{(\nu_1, S^{(1)}), \dots, (\nu_n, S^{(n)})\}$, kde $\{\nu_i\}$ je neklesající posloupnost úrovní spojování shluků a $\{S^{(i)}\}$ je rozřídění objektů odpovídající úrovni ν_i .

Na obr. 5 jsou zachyceny výsledky uvedených tří shlukovacích procedur.



Obr. 5 - Dendrogramy pro metodu nejbližšího souseda, nejvzdálenějšího souseda a metodu průměrné vazby

4.4. Kofenetický koeficient korelace. Jak je vidět na obr. 5, mohou různé shlukovací procedury poskytovat různé výsledky. K posouzení shody mezi maticí vzdáleností objektů a dendrogramem lze použít např. kofenetický koeficient korelace (viz [3]). Je to koeficient korelace mezi $n(n - 1)/2$ prvky umístěnými nad (nebo pod) hlavní diagonálou matice vzdáleností a odpovídajícími prvky kofenetické matice. Přitom (i, j) -tý prvek této matice je definován jako ta vzdálenost i -tého a j -tého objektu, při níž jsou tyto objekty poprvé spojeny do jednoho shluku. Z uvažovaných shlukovacích metod pak vybereme tu, která poskytuje nejvyšší kofenetický koeficient korelace.

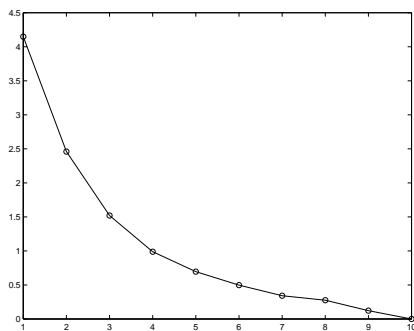
Hodnoty kofenetických koeficientů:

- metoda nejbližšího souseda: 0,737
- metoda nejvzdálenějšího souseda: 0,715
- metoda průměrné vazby: 0,783.

Nejvyšší kofenetický koeficient korelace byl dosažen pro metodu průměrné vazby. Budeme ji tedy nadále používat.

4.5. Stanovení optimálního počtu shluků. Pro řešení tohoto problému byla vypracována celá řada postupů - od heuristických až po formální testy (viz [2]). Z heuristických metod zde uvedeme graf závislosti hodnot fúzních koeficientů na počtu shluků (viz [1]). Jedná se o analogii tzv. „scree testu“ známého z faktorové analýzy.

Fúzním koeficientem pro k shluků rozumíme průměr maximálních vzdáleností uvnitř těchto k shluků. Pokud se v grafu závislosti hodnot fúzních koeficientů na počtu shluků objeví určité zploštění, svědčí to o tom, že zmenšení počtu shluků již není vhodné.



Obr. 6 - Průběh závislosti hodnot fúzních koeficientů na počtu shluků

Z obr. 6 vyplývá, že bude vhodné rozdělit stanice do dvou shluků. Při pohledu na dendrogram pro metodu průměrné vazby zjistíme, že stanice DOB, KRA, HUS a SKA tvoří jeden shluk, zbylých šest stanic druhý shluk. Přitom stanice POL, která se na ploše prvních dvou hlavních komponent poněkud vyčleňovala, se ke 2. shluku skutečně připojí nejpозději.

4.6. Metoda k -průměrů. Chceme-li porovnat výsledek dané hierarchické shlukovací metody s jiným postupem, můžeme tak učinit např. pomocí metody k -průměrů, což je nehierarchická shlukovací metoda vycházející z následujícího algoritmu popsaného např. v [4]:

Algoritmus:

- 1. krok:** Stanovíme počáteční rozklad množiny n objektů do k shluků. Rozklad zpravidla volíme náhodně.
- 2. krok:** Určíme výběrové centroidy v aktuálních shlucích. (Výběrovým centroidem shluku rozumíme hypotetický objekt, jehož vektor pozorování je roven vektoru výběrových průměrů počítaných pro všechny objekty patřící do tohoto shluku.)
- 3. krok:** Pro všechny objekty spočteme jejich vzdálenosti od všech výběrových centroidů. Objekt zařadíme do toho shluku, k jehož výběrovému centroidu má nejbližší. Pokud nedošlo v tomto kroku k žádnému přesunu, považujeme aktuální shluky za definitivní, jinak se vracíme ke 2. kroku.

V našem případě pro $k=2$ dospěla metoda k -průměrů po dvou iteracích k témuž výsledku jako metoda průměrné vazby.

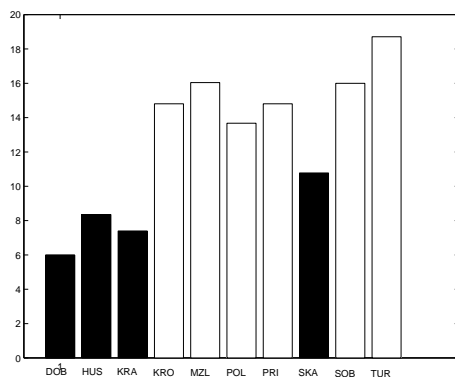
1. shluk: DOB, KRA, HUS, SKA.
2. shluk: MZL, PRI, SOB, KRO, TUR, POL.

Tento rozklad vyčerpává 67 % variability obsažené v datech.

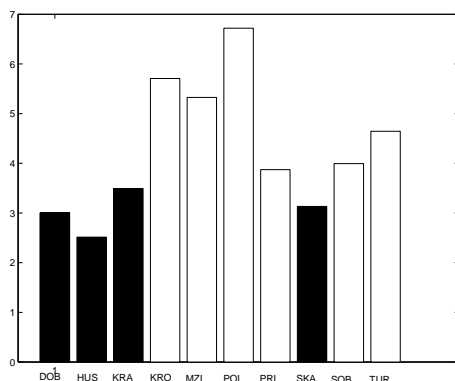
5. CHARAKTERISTIKY NALEZENÝCH SHLUKŮ

První shluk je tvořen stanicemi, které se vyznačují poměrně nízkými průměrnými ročními koncentracemi oxidu siřičitého (od $6 \mu\text{g}/\text{m}^3$ po $11 \mu\text{g}/\text{m}^3$) i malými směrodatnými odchylkami (od $2,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ po $3,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$). S výjimkou stanice KRA jsou umístěny v centrální části města.

Druhý shluk obsahuje stanice s vysokými koncentracemi oxidu siřičitého (od $13 \mu\text{g}/\text{m}^3$ po $19 \mu\text{g}/\text{m}^3$) i poměrně velkými směrodatnými odchylkami (od $3,8 \mu\text{g}/\text{m}^3$ po $6,8 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Tři z nich se nacházejí v okrajových částech Brna (PRI, SOB, TUR), další tři jsou v centru (MZL, KRO, POL).



Obr. 7 - Průměry průměrných ročních koncentrací SO_2 pro 1. a 2. shluk.
(Černě - 1. shluk, bíle - 2. shluk)



Obr. 8 - Směrodatné odchylky průměrů průměrných ročních koncentrací SO_2 pro 1. a 2. shluk. (Černě - 1. shluk, bíle - 2. shluk)

Výsledek shlukovací procedury, k němuž jsme dospěli, se může jevit poněkud paradoxní. Proč tři stanice (DOB, HUS, SKA) umístěné v centru města vykazují nízké koncentrace SO_2 , zatímco jiné tři stanice (MZL, KRO, POL), které se nacházejí rovněž v centru, mají vysoké koncentrace SO_2 ?

Vysvětlení není jednoznačné. Jak bylo uvedeno v části „Vymezení problému“, zkoumané stanice měří koncentrace SO_2 dvěma různými metodami. Přepočtení výsledků kolorimetrické metody je do jisté míry subjektivní záležitostí a velmi závisí na zkušenostech laboranta. Na stanicích DOB, HUS, KRA, POL a SKA se používá kolorimetrická metoda, na ostatních gravimetrická.

Vysvětlení může rovněž spočívat v objektivních podmínkách, v nichž se dané stanice nacházejí - např. umístění v krajině, sklon k tvorbě inverzních situací, převládající směr větru apod.

LITERATURA

- [1] M. S. Aldenderfer, R. K. Blashfield: Cluster Analysis. Sage Publications, Inc. London 1989.
- [2] B. S. Everitt: Cluster Analysis. Edward Arnold, London 1998.
- [3] J. C. Davis: Statistics and Data Analysis in Geology. John Wiley & Sons, Inc., 1973.
- [4] P. Hebák, J. Hustopecký: Vícerozměrné statistické metody s aplikacemi. SNTL/Alfa, Praha 1987.
- [5] J. Macek: Analýza znečištění ovzduší oxidem siřičitým a polétavým prachem ve městě Brně. Katedra geografie PříF MU Brno 1998.

MU PŘF, KAM, JANÁČKOVO 2A, 662 95 BRNO
E-MAIL: budikova@math.muni.cz

A NOTE ON CONVERGENCE OF LOCAL MARTINGALES

PETR DOSTÁL

ABSTRACT. It is investigated the topology of $\mathcal{L}(\mathbb{L})$, the set of all distributions of pairs (X, Y) such that Y is a real continuous local martingale on the canonical filtration of the process X and X is stochastic process on some separable metric space T .

Абстракт. В этой статье мы занимаемся топологией множества всех распределений пар (X, Y) , где Y обозначает реальный непрерывный локальный \mathcal{F}_t^X -мартингал и X стохастический процесс со значениями в сепарабельном метрическом пространстве T .

1. INTRODUCTION

We continue the research on topology of $\mathcal{L}(\mathbb{L})$ that was started in [3] and generalize the following result from [3].

(1) $\mathcal{L}(\mathbb{L})$ is a relatively weakly closed set in $\mathcal{L}(\mathbb{A})$

where $\mathcal{L}(\mathbb{A})$ denotes the set of all probability distributions of pairs (X, Y) such that Y is a real-valued continuous X -adapted process if we consider only continuous processes X . We offer another idea how to prove and generalize the above result. (see Theorem 1, Theorem 5)

2. MOTIVATION

We refer to [3] for inspiration but we only introduce one example which is denoted in [3] as 1.2 Example.

I. The set \mathcal{W} of all probability distributions of processes X such that there exists a weak solution $(\Omega, \mathcal{F}, P, \mathcal{F}_t, W, X)$ of a stochastic differential equation (SDE)

(2)
$$dX_t = b(t, X)dt + \sigma(t, X)dW_t$$

is a Borel convex set in the set of all Borel probability measures on $\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$ for arbitrary progressive coefficients (progressive coefficients will be defined in section 3 b and σ and weakly closed set in $\mathcal{P}(B)$, the set of all Borel probability measures on $\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$ concentrated on

(3)
$$B = \{x \in \mathbb{C}(\mathbb{R}^+), \int_0^t |b(s, x_s)| + \sigma^2(s, x_s)ds < \infty \forall t \geq 0\} \in \mathcal{B}(\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)).$$

Especially, \mathcal{W} is a weakly closed convex set in $\mathcal{P}(B)$ if $b(t, \cdot), \sigma(t, \cdot) : \mathbb{C}(\mathbb{R}^+) \rightarrow \mathbb{R}$ are continuous mappings for every $t \geq 0$ and bounded on compact sets in $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$.

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62B05; Secondary 28C20.

Key words and phrases. Local martingales, convergence, canonical filtration.

The paper was prepared with the support of the Research program MSM 113200008.

Note only or see 1.2 Example in [3] that if there is a weak solution $(\Omega, \mathcal{F}, P, \mathcal{F}_t, W, X)$ of a SDE (2) then

$$(4) \quad X \in B \text{ a.s. and } G_b(X, t), G_{b,\sigma}(X, t) \text{ are local martingales}$$

with respect to completed canonical filtration of the process X where

$$(5) \quad G_b(x, t) = [x_t - x_0 - \int_0^t b(s, x_s) ds] \cdot I_B \text{ and}$$

$$(6) \quad G_{b,\sigma}(x, t) = [x_t^2 - x_0^2 - \int_0^t 2x_s b(s, x_s) - \sigma^2(s, x_s) ds] \cdot I_B.$$

Conversely, if (4) holds, then there exists a weak solution $(\Omega^*, \mathcal{F}^*, P^*, \mathcal{F}_t^*, W^*, X^*)$ of a SDE (2) such that X and X^* have the same distribution.

II. If $G_b, G_{b,\sigma}$ are continuous and SDE (1) is such that there exists its weak solution for any deterministic initial condition, then the equation possesses a weak solution with arbitrary initial condition in $\mathcal{P}(\mathbb{R})$, the set of all Borel probability measures on \mathbb{R} .

3. NOTATION

For $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ continuous function started at 0, $c > 0$ we denote by

$$(7) \quad \alpha_c(f) := f(\cdot \wedge \tau_c^f), \text{ where } \tau_c^f = \inf\{t \geq 0, |f| \geq c\}$$

is the time of the first entry of the function $|f|$ into the set $\{-c, c\}$. This transformation gives us a Borel measurable mapping $\alpha_c^0 : \mathbb{C}(\mathbb{R}^+) \rightarrow \mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$, $\alpha_c^0(g) = \alpha_c(g - g(0))$ where $\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$ denotes the set of all continuous functions on \mathbb{R}^+ endowed with the topology of uniform convergence on compact intervals. Recall that a real-valued continuous process Y is an \mathcal{F}_t^X -local martingale iff for every $c > 0$ $\alpha_c^0(Y)$ is an \mathcal{F}_t^X -martingale i.e. Y is \mathcal{F}_t^X -adapted process and for $s \leq t$

$$(8) \quad E^{\mathcal{F}_s^X} \alpha_c^0(Y)_t = \alpha_c^0(Y)_s \text{ a.s.}$$

where \mathcal{F}_t^X denotes the canonical filtration of the process X defined as follows

$$(9) \quad \mathcal{F}_t^X = \sigma\{[X_u \in B], u \leq t, B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})\}$$

where $\sigma(\mathcal{A})$ denotes the smallest σ -algebra which contains \mathcal{A} as a subset. Recall that $\mathcal{B}(S)$ denotes the Borel σ -algebra on metric space S . We promised in section 2 to define progressive coefficients. Say that $b : \mathbb{C}(\mathbb{R}^+) \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ is a progressive coefficient if there are some $b_t : \mathbb{C}[0, t] \times [0, t] \rightarrow \mathbb{R}, t \geq 0$ Borel measurable functions such that

$$(10) \quad \text{for } x \in \mathbb{C}(\mathbb{R}^+), u \leq t \quad b_t(x_{s,s \leq t}, u) = b(x, u)$$

where $\mathbb{C}[0, t]$ denotes the set of all continuous functions on $[0, t]$ endowed with the topology of uniform convergence.

4. THEOREMS

Recall that X is a real-valued continuous process iff it is a random variable with values in $(\mathbb{C}(\mathbb{R}^+), \mathcal{B}(\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)))$.

Theorem 1. *Let Y_n, Y be real-valued continuous processes such that $Y_n \rightarrow Y$ a.s. in $\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$. Then for $c > 0$ there are sequences $\delta_k \in (0, c)$ and $n_k \in \mathbb{N}$ such that*

$$(11) \quad \alpha_{c-\delta_k}^0(Y_{n_k}) \rightarrow \alpha_c^0(Y), k \rightarrow \infty \text{ a.s. in } \mathbb{C}(\mathbb{R}^+).$$

Proof: see thm. 1 in [2]. A combination of this theorem and Skorochod Theorem yields Theorem 2.

Skorochod Theorem. *Suppose that P_n, P are Borel probability measures on metric space S . If $P_n \rightarrow P$ weakly as $n \rightarrow \infty$ and P has a separable support, then there exist random elements X_n and X , defined on a common probability space (Ω, \mathcal{F}, P) , such that*

$$(12) \quad \mathcal{L}(X_n) = P_n, \mathcal{L}(X) = P \text{ and } X_n(\omega) \rightarrow X(\omega) \text{ for every } \omega \in \Omega \text{ as } n \rightarrow \infty$$

where $\mathcal{L}(Z)$ denotes the probability distribution of a random variable Z . (see thm. 6.7. page 70 in [1])

Theorem 2. *Let X, X_n be real-valued continuous processes such that $X_n \rightarrow X$ in distribution as $n \rightarrow \infty$ in $\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$. If $R: \mathbb{C}(\mathbb{R}^+) \rightarrow \mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$ is a continuous mapping such that for $n \in \mathbb{N}$ $R(X_n)$ is a local $\mathcal{F}_t^{X_n}$ -martingale and $R(X)$ is an \mathcal{F}_t^X -adapted process, then $R(Y)$ is also an \mathcal{F}_t^X -local martingale.*

Proof: See thm. 2 in [2].

The method given by Theorem 1. seems to be sufficient for generalization but a little bit unpleasant. One may ask if there is some better approximation procedure of $\alpha_c(Y)$ by $\alpha_d(Y_k)$ for $Y_k \rightarrow Y$ in $\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$. The answer is given by

Theorem 3. *Let Y_n, Y be real-valued continuous processes such that $Y_n \rightarrow Y$ a.s. as $n \rightarrow \infty$ in $\mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$ and for $n \in \mathbb{N}$ Y_n is a local $\mathcal{F}_t^{Y_n}$ -martingale. Then for $c > 0$ holds*

$$(13) \quad \alpha_c^0(Y_n) \rightarrow \alpha_c^0(Y) \text{ a.s. as } n \rightarrow \infty \text{ in } \mathbb{C}(\mathbb{R}^+).$$

Remark. Recall only that Y is an \mathcal{F}_t^Y local martingale iff Y is an \mathcal{F}_t -martingale for some filtration $(\mathcal{F}_t, t \geq 0)$.

Proof of Theorem 3 is based on Theorem 2 and 4 which says that it is enough to show that Y is a local \mathcal{F}_t^Y -martingale. Now put $R := \text{id}$ and use Theorem 2.

Theorem 4. *If Y is an \mathcal{F}_t^Y -local martingale, $c > 0$, then the mapping α_c^0 is continuous at $Y(\omega)$ for a.s. $\omega \in \Omega$.*

Proof: See thm. 3 in [2]

Our generalization of result (1) reads as follows.

Theorem 5. *Let X_n, X be T -valued stochastic processes for some separable metric space T ; Y_n, Y be \mathbb{R} -valued continuous processes such that for $n \in \mathbb{N}$ Y_n is an $\mathcal{F}_t^{X_n}$ -local martingale and Y is an \mathcal{F}_t^X -adapted process. If moreover finite dimensional distributions of X_n associated with Y_n converge to finite dimensional distribution of X associated with Y i.e. for f continuous bounded function on $T^k \times \mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$, $u \in (\mathbb{R}^+)^k, k \in \mathbb{N}$*

$$(14) \quad Ef(X_n(u_1), \dots, X_n(u_k), Y_n) \rightarrow Ef(X(u_1), \dots, X(u_k), Y) \text{ as } n \rightarrow \infty.$$

Then Y is an \mathcal{F}_t^X -local martingale.

Proof: see Proposition in [2] which is a little bit more general but its formulation is more unpleasant.

One may ask if we could leave out the assumption, Y is an \mathcal{F}_t^X -adapted process. The following example shows that it is impossible even in the situation of Theorem 2 where $Y_n = R(X_n)$ and $Y = R(X)$.

5. EXAMPLE

We will find \mathbb{R} -valued continuous processes such that $X_n \rightarrow X$ as $n \rightarrow \infty$ everywhere and $R : \mathbb{C}(\mathbb{R}^+) \rightarrow \mathbb{C}(\mathbb{R}^+)$ a continuous mapping such that for $n \in \mathbb{N}$ $R(X_n)$ is an $\mathcal{F}_t^{X_n}$ -local martingale but $R(X)$ is not even adapted to the completed canonical filtration of the process X .

Denote by W one-dimensional Brownian motion and for $n \in \mathbb{N}$ put

$$X_n(t) = W(t \wedge 1)/n + W[(t-1)^+ \wedge 1] \rightarrow X(t) = W[(t-1)^+ \wedge 1], n \rightarrow \infty$$

$$\text{and } R : \mathbb{C}(\mathbb{R}^+) \rightarrow \mathbb{C}(\mathbb{R}^+), R(f)(t) = f(t+1) - f(1).$$

Now it is enough to check that $R(X_n) = W(\cdot \wedge 1)$ is an $\mathcal{F}_t^{X_n} = \mathcal{F}_{t \wedge 1}^W$ -local martingale but $R(X) = W(\cdot \wedge 1)$ at time 1 is a nontrivial random variable and it cannot be measurable with respect to the completion of a trivial σ -algebra $\mathcal{F}_t^X = \mathcal{F}_{(t-1)^+ \wedge 1}^W$ at time $t = 1$.

6. REFERENCES

- [1] P. Billingsley (1999): Convergence of Probability Measures, J.Wiley, New York.
- [2] P. Dostál (2001): A Note on Weak Convergence of Martingale Measures (to be published)
- [3] J. Štěpán, P. Ševčík (2000): Local Martingale Measures. Acta Universitatis Carolinae, Mathematica et Physica, vol. 41, No 1, Praha.

CHARLES UNIV. OF PRAGUE, DEPT. PF PROBABILITY AND STATISTICS, SOKOLOVSKÁ 83, CZ-186 75 PRAHA 8 – KARLÍN, CZECH REPUBLIC
E-mail address: dostal@karlin.mff.cuni.cz; petdos@post.cz

MM-ODHADY

ZDENĚK FABIÁN

ABSTRAKT. The recently proposed core functions of continuous probability distributions are briefly introduced and used for a generalization of the classical moment estimation method. The suggested core-moment estimators and, if necessary, the (Huber) moment M-estimators are “tailored” to the assumed distributions similarly as the maximum likelihood estimators, with which they in some cases coincide. However, these generalized moment estimates are robust. They are in multidimensional cases unexpectedly simple and their asymptotic relative efficiencies seem to be reasonably near to one.

Резюме: Коре функции непрерывных распределений использованы для обобщения классической параметрической оценки методом моментов. Оценки методом коре моментов похожи на оценки методом максимального правдоподобия, но они робастны. Они чрезвычайно простой даже в многомерном случае и почти эффективны.

1. ÚVOD

Na Robustu'96 jsem uveřejnil příspěvek, zaznamenaný v [1]. Připomenu jeho obsah.

Budiž F distribuční funkce a f hustota rozdělení P s pravděpodobnostní mírou kladnou právě na otevřeném intervalu S_F (konečném nebo nekonečném). Rozdělení si lze představit jako vzniklé transformací $\varphi : R \rightarrow S_F$ nějakého 'vzoru' G s pravděpodobnostní mírou kladnou na celém $S_G = R$. V [1] jsem se pokusil ukázat, že rozdělení P lze výstižně popsat nejen funkcemi F a f , ale i funkcí q , danou vztahem

$$(1) \quad q(x) = \frac{1}{f(x)} \frac{d}{dx} (-L(x)f(x))$$

kde

$$(2) \quad L(x) = \varphi'(\varphi^{-1}(x))$$

je Jakobián určitého, na S_F závislého zobrazení $\varphi : R \rightarrow S_F$, a dále, že:

a/ Popis rozdělení pomocí q je často jednodušší a přehlednější než oba standardní: tak rozdělení s těžkými konci odpovídá q omezená (O), rozdělení ostře spadajícímu k nule q neomezená (N) a nesymetrickému rozdělení s různým typem chování na obou koncích intervalu S_F odpovídá q typu $O - N$ nebo $N - O$.

b/ Momenty funkce q jsou lepšími numerickými charakteristikami rozdělení než obvyklé momenty už proto, že existují, a zobecněná momentová metoda pro tento typ momentů poskytuje zajímavé odhady parametrů parametrických rozdělení, které sice obecně nejsou vydatné, ale někdy skoro, zato jsou jednoduché a pro rozdělení s q typu O robustní.

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62E10; Secondary 62E20.

Klíčová slova. Core function, maximum likelihood, M-estimators.

Autor děkuje Igoru Vajdovi a Josefu Machkovi za skvělé postřehy a cenné rady. Práce byla podpořena granty GA ČR 201/00/1489 a GA AV IAA1075101.

Funkci (1) nazývám v [1] geometrickou funkcí rozdělení. Že by snad nějaká zásadní funkce rozdělení unikala po celé minulé století pozornosti statistiků se ovšem zdá naprosto nepravděpodobné. Taky se to v [1] takto rezolutně netvrdí: pro G na $S_G = R$ je geometrickou funkcí rozdělení prostě skórová funkce

$$(3) \quad q(y) = s^G(y) = -g'(y)/g(y)$$

(což dostaneme z (1), vezmeme-li v tomto případě $\varphi : R \rightarrow R$ jako identické zobrazení, pak je $L(x) = 1$). Pro rozdělení F na $S_F \neq R$ vznikne podle Věty 1 z [1] funkce (1) následujícím postupem: Buď dána f . Transformací φ^{-1} najdeme hustotu g 'vzoru' G na $S_G = R$, určíme podle (3) skórovou funkci s^G , tu transformujeme zpět na S_F a dostaneme

$$(4) \quad q(x) = s^G(\varphi^{-1}(x)).$$

Neboli: problém, který neumíme vyřešit na S_F 'promítneme' na R , zde jej vyřešíme a řešení 'promítneme' zpět na S_F .

Nabízí se řada otázek: Jak to s q vypadá v novém tisíciletí? Je ještě zajímavá nebo to byla jen duhová bublina? A ovšem (nejčastější výhrada posluchačů mých přednášek a recenzentů nepřijatých článků: jak q může být relevantní funkcí daného rozdělení, když závisí na v podstatě libovolné (spojité rostoucí) φ ?

V tomto článku se pokusím tyto otázky zodpovědět a odpovědi zdůvodnit. Zásadně je možno říci tolik: Uvedeným postupem skutečně kupodivu dostaneme obecně neznámou a smysluplnou funkci. V mnoha konkrétních případech je, pravda, známá a ve statistice hojně používaná, zdaleka ne však ve všech: zcela neznámá je např. pro rozdělení bez parametrů či bez toho parametru, kterému v dalším textu říkám transformovaný parametr polohy (viz tabulky 1-3 příkladu 1 v [1]). Pro různá φ můžeme samozřejmě dostat pro jedno dané rozdělení různá q , ukazuje se však, že pro analyticky zadanou f existuje zpravidla jediné φ , které dává q v matematicky uchopitelném tvaru.

Budu zde mluvit o funkci T_F , které dnes říkám *core* nebo *core funkce*. Je to 'vysvlečená' geometrická funkce rozdělení z článku [1]. Zatímco 'oblečená' q v podstatě nikoho nezajímala, 'vysvlečenou' T_F celkem ochotně přijali v poměrně slušném periodiku [4]. Upozorňuji ještě na další značení odlišné od [1]: místo $p(u)$ píšou $f(x)$ a definiční obor rozdělení F značím S_F místo T .

2. CORE FUNKCE

Uvažujme obecnou parametrickou rodinu $\mathbb{G} = \{G_\theta, \theta \in \Theta\}$ na $S_G = R$, kde

$$\theta = (\mu, \sigma, \xi) \in S_G \times (0, \infty) \times \Delta,$$

kde $\Delta = (0, \infty)^{m-2}$ kde $m \geq 2$ celé a kde μ a σ jsou parametry polohy a měřítka. Pak existuje taková H_ξ , že

$$(5) \quad G_\theta(y) = H_\xi \left(\frac{y - \mu}{\sigma} \right).$$

Hustota rozdělení G_θ je zřejmě

$$(6) \quad g_\theta(y) = \frac{1}{\sigma} h_\xi \left(\frac{y - \mu}{\sigma} \right),$$

kde $h'_\xi = H_\xi$. Definujme *core funkci* rozdělení G_θ jako

$$(7) \quad T_{G_\theta}(y) = -\frac{g'_\theta(y)}{g_\theta(y)}.$$

(7) je totéž jako (3) pro rozdělení bez parametrů nebo s parametrem polohy. Uvažujme však rozdělení (5). Pod pojmem skórová funkce parametrického rozdělení se obvykle chápe věrohodnostní skór pro parametr polohy, $s_\mu^G(y) = (\partial/\partial\mu) \log g_\theta(y)$ (log je přirozený logaritmus). Podle (6) platí

$$s_\mu^G(y) = \frac{\partial}{\partial\mu} \log \left(\frac{1}{\sigma} h_\xi \left(\frac{y - \mu}{\sigma} \right) \right) = -\frac{h'_\xi((y - \mu)/\sigma) \frac{1}{\sigma}}{h_\xi((y - \mu)/\sigma) \sigma} = -\frac{1}{\sigma} \frac{g'_\theta(y)}{g_\theta(y)} = \frac{1}{\sigma} T_{G_\theta}(y).$$

Core funkce (7) je tedy vnitřní součástí věrohodnostního skóru pro parametr polohy, s_μ^G , což se dá hezky říct anglicky jako že 'Core is the core of the (likelihood) score'.

Příklad 1. Normální rozdělení $\mathbb{N}(\mu, \sigma)$ má skórovou funkci (věrohodnostní skór pro parametr polohy) $s_\mu^{\mathbb{N}}(y) = (y - \mu)/\sigma^2$ a core funkci $T_{\mathbb{N}}(y) = (y - \mu)/\sigma$. Core funkce normálního rozdělení chápaná jako náhodná veličina je prostě normovaná náhodná veličina.

Rodinu \mathbb{G} můžeme považovat za *vzor* indukované (transformované) rodiny \mathbb{F} na $S_F = (\varphi(-\infty), \varphi(\infty))$. Pro $F_\theta \in \mathbb{F}$, $F_\theta = G_\theta \varphi^{-1}$ platí

$$F_\theta(x) = G_\theta(\varphi^{-1}(x)) = H_\xi \left(\frac{\varphi^{-1}(x) - \mu}{\sigma} \right),$$

což můžeme přepsat jako

$$F_\theta(x) = H_\xi(w),$$

kde

$$(8) \quad w = \frac{\varphi^{-1}(x) - \varphi^{-1}(\tau)}{\sigma}.$$

Zde jsme položili $\tau = \varphi(\mu)$. τ je transformovaný parametr polohy známý z [1]. Parametr θ teď značí vektor

$$\theta = (\tau, \sigma, \xi) \in S_F \times (0, \infty) \times \Delta.$$

Hustota *indukovaného* (transformovaného) rozdělení F_θ je pak

$$(9) \quad f_\theta(x) = \frac{d}{dx} H_\xi(w) = h_\xi(w) \frac{dw}{dx} = \frac{1}{\sigma L(x)} h_\xi(w)$$

kde $h_\xi = H'_\xi$ a $L(x)$ je dáno vztahem (2).

Teď už je možné podle (4) napsat výraz pro core funkci rozdělení F_θ :

$$(10) \quad T_{F_\theta}(x) = T_{G_\theta}(\varphi^{-1}(x)) = T_{H_\xi}(w) = -\frac{h'_\xi(w)}{h_\xi(w)}.$$

Je o něco jednodušší než původní q , protože vzniká místo ze 'score' z jednoduššího 'core' vzoru. Tím se trochu pozmění i obecný vzorec (1) pro její vyjádření bez znalosti konkrétního vzoru:

Věta 1. Core funkce rozdělení F_θ indukovaná zobrazením $\varphi : R \rightarrow S_F$ je

$$(11) \quad T_{F_\theta}(x) = \frac{1}{f_\theta(x)} \frac{d}{dx} (-\sigma L(x) f_\theta(x)).$$

Důkaz. Podle (10) a (9) je

$$T_{F_\theta}(x) = -\frac{h'_\xi(w)}{h_\xi(w)} = \frac{1}{\sigma L(x)f_\theta(x)} \frac{d}{dx}(-\sigma L(x)f_\theta(x)) \frac{dx}{dw}$$

a $dw/dx = 1/(\sigma L(x))$ podle (8) a (2). \square

Následující věta podává interpretaci core funkce rozdělení na S_F . Poznamenejme, že vše, co platí pro rozdělení F , platí samozřejmě i pro rozdělení G na $S_G = R$ při aplikaci identické transformace φ . Tedy: τ v dalším znamená i μ .

Věta 2. *Věrohodnostní skóry rozdělení F_θ pro transformovaný parametr polohy a pro parametr měřítka lze vyjádřit pomocí core funkce jako*

$$(12) \quad \begin{aligned} s_\tau^F(x) &= \frac{1}{\sigma L(\tau)} T_{F_\theta}(x) \\ s_\sigma^F(x) &= \frac{1}{\sigma} (w T_{F_\theta}(x) - 1). \end{aligned}$$

Důkaz. Přímým derivováním a použitím (9) dostaneme

$$\begin{aligned} s_\tau^F(x) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \log\left(\frac{1}{\sigma L(x)} h_\xi(w)\right) = \frac{h'_\xi(w)}{h_\xi(w)} \frac{\partial w}{\partial \tau} = \frac{1}{\sigma L(\tau)} T_{H_\xi}(w) \\ s_\sigma^F(x) &= \frac{\partial}{\partial \sigma} \log\left(\frac{1}{\sigma L(x)} h_\xi(w)\right) = -\frac{1}{\sigma} + \frac{h'_\xi(w)}{h_\xi(w)} \frac{\partial w}{\partial \sigma} = \frac{1}{\sigma} (w T_{H_\xi}(w) - 1), \end{aligned}$$

kde w je dáno vztahem (8). Tvrzení pak získáme užitím (10). \square

$T_{F_\theta}(x)$ indukovaného modelu je tedy, podobně jako v případě vzoru G_θ , *vnitřní součástí věrohodnostního skóru pro transformovaný parametr polohy.*

Příklad 2. Jedním z možných rozdělení na $S_F = (0, \infty)$ s transformovaným parametrem polohy a parametrem měřítka je Weibullovo rozdělení s hustotou

$$f_{\tau,\beta}(x) = \beta x^{-1} (x/\tau)^\beta e^{-(x/\tau)^\beta}.$$

Zvolme zobrazení $x = \varphi(y) = e^y$. Hustotu rozdělení upravíme na tvar

$$f_{\tau,\beta}(x) = \beta x^{-1} e^w e^{-e^w},$$

kde $w = \log(x/\tau)^\beta = \sigma^{-1}(\log x - \log \tau)$ a $\beta = \sigma^{-1}$. Vzorem pro F je tedy dvojité exponenciální rozdělení, věrohodnostní skór pro τ je

$$s_\tau^F(x) = \beta \tau^{-1} ((x/\tau)^\beta - 1),$$

a core spočteme pomocí (11) jako

$$T_{F_{\tau,\beta}}(x) = \frac{1}{f_{\tau,\beta}(x)} \frac{d}{dx} \left(-\frac{x}{\beta} f_{\tau,\beta}(x) \right) = (x/\tau)^\beta - 1.$$

Core je vnitřní součástí věrohodnostního skóru pro τ .

Příklad 3. V [1] je v příkladu 6 je uvažován speciální případ *Lomaxova* rozdělení na

$S_F = (0, \infty)$ s hustotou $f_\alpha(x) = \alpha/(x+1)^{\alpha+1}$. Zde α není transformovaným parametrem polohy. Věrohodnostní skór pro α je $s_\alpha^F(x) = 1/\alpha - \ln(x+1)$ a core funkce (opět při $\varphi(y) = e^y$) je $T_{F_\alpha}(x) = (\alpha x - 1)/(x+1)$, což je zbrusu nová funkce, která podle mne lépe popisuje Lomaxovo rozdělení než s_α . Nová, ale namíchaná podle starého receptu: je to vnitřní součást věrohodnostního skóru pro 'latentní' parametr polohy $\tau = 1$. Je to jen funkce, která v případech 'nedokonalých' rozdělení bez transformovaného parametru polohy prostě nebyla dosud rozpoznána.

3. ZOBRAZENÍ φ

Explicitní tvar core funkce rozdělení na $S_F \neq R$ získáme po specifikaci zobrazení φ . V [1] bylo zobrazení

$$(13) \quad x = \varphi(y) = \frac{a(b-c) + b(c-a)e^y}{b-c + (c-a)e^y}$$

chybně považováno za jediné 'správné' (dodejme že v [1] je uvedena pouze jeho inverze).

Stojí zato si povšimnout, že v [12] platí $\varphi(-\infty) = a$, $\varphi(+\infty) = b$, $\varphi(0) = c$, a že $\lim_{b \rightarrow \infty} \varphi(y) = a + (c-a)e^y$. Zobrazení (13) poskytuje možnost získat širokou třídu rozdělení a jeho zvláštními případy jsou známé Johnsonovy transformace (viz [9] nebo [10]):

$\varphi : R \rightarrow (0, \infty)$ ve tvaru ($a = 0, b = \infty, c = 1$):

$$x = \varphi(y) = e^y$$

$\varphi : R \rightarrow (0, 1)$ ve tvaru ($a = 0, b = 1, c = 1/2$):

$$x = \varphi(y) = \frac{e^y}{1 + e^y}.$$

Rodinám rozdělení, které vzniknou z rodin 'vzorů' transformací (13) budeme říkat 'johnsonovské'. Jak se ukázalo, drtivá většina modelových rozdělení používaných ve statistice je právě 'johnsonovských'. Explicitní tvary jejich core funkcí na polopřímce $S_F = (0, \infty)$ (kde Jakobiján $L(x) = x$) a intervalu $(0, 1)$ (kde $L(x) = x(1-x)$) jsou podle Věty 1

$$(14) \quad T_F(x) = \sigma[-1 - xf'(x)/f(x)] \quad \text{na } (0, \infty)$$

$$(15) \quad T_F(x) = \sigma[-1 + 2x - x(1-x)f'(x)/f(x)] \quad \text{na } (0, 1).$$

Uvažujme však rozdělení F na $S_F = (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ s hustotou

$$(16) \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cos^2 x} e^{-\frac{1}{2} \operatorname{tg}^2 x}$$

a zvolme $\varphi : R \rightarrow S_F$ ve tvaru $x = \varphi(y) = \operatorname{arctg} y$. Jacobián inverzní transformace $\varphi^{-1} : S_F \rightarrow R$ je $d\varphi^{-1}(x)/dx = 1/\cos^2 x$ a vzor G rozdělení F je zřejmě standardní normální rozdělení, $g(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}y^2}$, s core funkcí $T_G(y) = y$. Podle definice (10) je arctg -indukovaná core funkce rozdělení (16) dána jako $T_F(x) = T_G(\varphi^{-1}(x)) = \operatorname{tg} x$.

Přímým výpočtem se lze přesvědčit, že obdobou vzorců (14) a (15) je v tomto případě

$$T_F(x) = [\sin 2x - \cos^2 x f'(x)/f(x)].$$

Rozdělení (16) má ovšem i svou 'johnsonovskou core funkci', tu však nelze vyjádřit jednoduchým vzorcem. Myslím si, že obecně lze za core funkci rozdělení F považovat ten *nejjednodušší smysluplný popis rozdělení vyjádřený pomocí funkce obsahující člen $-f'/f$* , o který si matematický tvar hustoty 'řekne'. Snad bych dodal, že vím o hustotě, která si o vhodné φ 'neřekla' (lambda rozdělení, viz [7]). V dalším budeme pro jednoduchost uvažovat pouze 'johnsonovské rodiny'.

4. MOMENTY CORE FUNKCE

Stejně jako v [1] definujeme *core momenty* vztahem

$$M_k(\theta) = \int_{S_F} T_{F_\theta}(x)^k dF_\theta(x), \quad k = 1, 2, \dots$$

Podle [1], Věta 1 platí $M_1 = 0$. Dále, $M_2(\theta)$ je v [1] považován za střední (Fisherovu) informaci rozdělení F_θ , což po modifikaci 'geometrické funkce' neplatí: označíme-li $I_{F_{\tau\tau}}(\theta)$ Fisherovu informaci o transformovaném parametru polohy, platí podle Věty 1 tohoto článku

$$(17) \quad M_2(\theta) = \sigma^2 L^2(\tau) I_{F_{\tau\tau}}(\theta).$$

(Poznamenejme, že proměna q v T_F se v [1] projevuje už jen ve vzorcích pro momenty příkladu 5, v nichž vypadne β a jeho mocniny.)

Vztah (17) poskytuje další interpretaci pojmu core funkce. Podle (12) a (17) je

$$T_{F_\theta}^* = \frac{T_{F_\theta}(x)}{\sqrt{M_2(\theta)}} = \frac{s_\tau^F(x)}{\sqrt{I_{F_{\tau\tau}}(\theta)}},$$

čili normovaná core funkce je věrohodnostní skór pro transformovaný parametr polohy normovaný odmocninou z Fisherovy informace pro tento parametr (znovu: pokud rozdělení ten parametr má. Když ho ale nemá, nevádí. I pro rozdělení bez parametrů je T_F dána definicí (11) a M_2 je pak Fisherova informace rozdělení, viz [1]).

Příklad 4. Pro Weibullovo rozdělení (příklad 2) platí $I_{F_{\tau\tau}} = (\sigma\tau)^{-2}$ a pak $M_2 = \sigma^2\tau^2 I_{F_{\tau\tau}} = 1$.

5. ODHADY METODOU CORE MOMENTŮ

Pro parametrické odhady parametru $\theta \in \Theta \subset R^m$ máme k dispozici m věrohodnostních skórů, ale jen jednu core funkci. Podle [1] však existují momenty funkce T_F , které jsou pro snad všechna jednoduchá modelová rozdělení

– vyjádřeny prostou funkcí parametrů bez různých gamma, psi a beta funkcí, kterými se hemží vzorce pro výpočet obyčejných momentů,

– a to funkcí ne všech parametrů. Core momenty (CM) nezávisí na τ a v nové verzi ani na σ (či β), takže $M_k(\theta) = M_k(\xi)$.

Řešení $(\hat{\theta}_n)_{CM}$ soustavy

$$(18) \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T_F(x_i|\theta)^k = M_k(\theta), \quad k = 1, \dots, m$$

je tedy poměrně jednoduché, zřejmě konzistentní a asymptoticky normální a pro T_F typu O (tedy právě pro rozdělení s delšími chvosty a daty obsahujícími odlehle hodnoty) robustní. To vše lze snadno nahlédnout z obecné teorie M-estimátorů (viz [11]). Co nahlédnout nelze a je nutno počítat jsou asymptotické disperze CM odhadů resp. jejich asymptotické relativní vydatnosti (ARV),

$$ARV(\hat{\theta}_{CM}) = \lim_{n \rightarrow \infty} (Var(\hat{\theta}_n)_{ML} / Var(\hat{\theta}_n)_{CM}),$$

kde $(\hat{\theta}_n)_{ML}$ značí maximálně věrohodný (ML) odhad.

Podle [1], Věta 2, platí $M_1(\theta) = 0$. Podle Věty 2 tohoto článku pro $m = 1$ a rozdělení s transformovaným parametrem polohy je rovnice

$$(19) \quad \sum_{i=1}^n T_F(x_i|\tau) = 0$$

totožná s maximálně věrohodnou rovnicí pro τ . Totožná fakticky, ne však koncepčně. Mějme dvě náhodná pozorování $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ z Cauchyho rozdělení s hustotou ve tvaru $g_\mu(x) = 1/\pi(1 + (x - \mu)^2)$ a s neznámým parametrem polohy μ . Potíže s Cauchyho rozdělením jsou notoricky známé: rozdělení nemá žádný 'obyčejný' moment. Věrohodnostní funkce $\sum_{i=1}^2 \log g_\mu(X_i)$ má pro dostatečně vzdálené X_1, X_2 dva vrcholy (viz např. [6], str. 213) a rozumný odhad μ je tedy ne v maximu věrohodnostní funkce, ale v jejím *lokálním minimu*, řekněme $\hat{\mu}_{\min}$. Core funkce Cauchyho rozdělení s jediným parametrem μ je identická s jeho skórovou funkcí a rovnice (19) pro první core moment, která zní $2X_1/(X_1 - \mu)^2 + 2X_2/(X_2 - \mu)^2 = 0$, poskytuje odhad $\hat{\mu}_{\min}$ bez jakýchkoli koncepčních problémů.

Uvažujme rozdělení, které má pouze transformovaný parametr polohy a parametr měřítka, $F_{\tau\sigma}(x) = H_1(w)$ (tohoto typu jsou např. normální, lognormální, Johnsonovo, dvojitě exponenciální s hustotou $f(x) = e^w e^{-e^w}$, extreme value I a II, Weibullovo, logistické, log-logistické, Cauchyho a log-Cauchyho rozdělení). Označme $w_i = (\varphi^{-1}(X_i) - \varphi^{-1}(\tau))/\sigma$. Soustava rovnic pro ML odhady má tvar

$$\begin{aligned} \sum T_F(w_i) &= 0 \\ n^{-1} \sum (w_i T_F(w_i) - 1) &= 0, \end{aligned}$$

kdežto soustava rovnic (18) pro CM odhady zní

$$(20) \quad \begin{aligned} \sum T_F(w_i) &= 0 \\ n^{-1} \sum (T_F(w_i)^2 - 1) &= 0 \end{aligned}$$

kde \sum značí $\sum_{i=1}^n$. V případě normálního rozdělení jsou obě soustavy identické.

Z tvaru rovnic je patrné, že pro rozdělení s omezenou T_F (logistické a log-logistické rozdělení) jsou momentové odhady (na rozdíl od ML odhadů) robustní. Spočtené ARV jsou $ARV(\hat{\mu}_{CM}) = 1$, $ARV(\hat{\sigma}_{CM}) = 0.874$ pro logistické rozdělení a $ARV(\hat{\tau}_{CM}) = 1$, $ARV(\hat{\sigma}_{CM}) = 0.953$ pro log-logistické rozdělení, což myslím jde.

6. MOMENTOVÉ M-ODHADY

Zabývejme se rozdělením *gamma* na $S_F(0, \infty)$ s hustotou

$$f(x|\alpha, \gamma) = \frac{\gamma^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\gamma x}.$$

Core funkce rozdělení je podle (14)

$$T_F(x/\tau|\alpha) = -1 - x f'_{\alpha\gamma}(x) / f_{\alpha\gamma}(x) = \gamma x - \alpha = \alpha(x/\tau - 1)$$

kde $\tau = \alpha/\gamma$ je transformovaný parametr polohy. T_F je lineární, typu $O - N$. Ze soustavy (20) vyplývá, že

$$(21) \quad (\hat{\tau})_{CM} = \bar{X} \quad (\hat{\alpha}_{CM})^{-1} = n^{-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2,$$

což jsou 'náhodou' (díky linearitě T_F) odhady shodné s odhady získané 'obyčejnou' momentovou metodou. Tyto odhady nejsou robustní a podle [10, str. 186] mají dost nízké ARV.

Robustní verzi odhadů (21) lze však najít úplně jednoduše. Definujme m -rozměrný *Huberův momentový estimátor* $\hat{\theta}_{MM}$ jako

$$(22) \quad \hat{\theta}_{MM} : \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [T_b^*(X_i|\theta)^k - M_k(\theta)] = 0, \quad 1 \leq k \leq m,$$

kde

$$T_b^*(x|\theta) = \max[-b, \min(T_F(x|\theta), b)]$$

je zobecněním Huberovy funkce $\psi(x) = \max[-b, \min(x, b)]$ a b je i v m -rozměrném případě jediným 'ladicím' parametrem, který je třeba určit (na základě apriorních znalostí nebo požadavků na ARV hledaného odhadu). Z teorie m -dimenzionálních M-estimátorů [11] opět plyne silná konzistence a asymptotická normalita odhadů (22). Podobně jako CM odhady, jsou i MM-odhady (neboli momentové M-odhady) výpočetně neobyčejně jednoduché.

Podívejme se nejprve na dílčí případ gamma rozdělení, na *exponenciální* rozdělení s hustotou $f_\tau(x) = \tau^{-1}e^{-x/\tau}$. Zobecněná Huberova funkce MM estimátoru je asymetrická,

$$T_b^*(x|\tau) = \begin{cases} x/\tau - 1 & \text{pro } x \leq b\tilde{\tau} \\ b - 1 & \text{pro } x > b\tilde{\tau}. \end{cases}$$

Zde $\tilde{\tau}$ je nějaký počáteční odhad τ (používám medián). MM-odhad parametru τ je tedy $\hat{\tau}_{MM} = \bar{X}^*$, kde $X_i^* = X_i$ pro $X_i \leq b\tilde{\tau}$ a $X_i^* = b - 1$ pro $X_i > b\tilde{\tau}$. Podle Věty 1 v [8, str. 117] je $\hat{\tau}_{MM}$ 'optimal B-robust'. Spočtený asymptotický rozptyl odhadu $\hat{\tau}_{MM}$ je

$$Var(\hat{\tau}_{MM}) = \frac{1 - 2be^{-b}}{(1 - (b+1)e^{-b})^2} \tau^2.$$

Ježto $Var(\hat{\tau}_{ML}) = \tau^2$, dostáváme následující tabulku:

b	2	2.5	3	3.5	4
$ARV(\hat{\tau}_{MM})$	0.769	0.862	0.915	0.947	0.967

Vraťme se ke gamma rozdělení. Dosadíme-li do vzorců (21) hodnoty X_i^* a \bar{X}^* namísto X_i a \bar{X} , dostaneme např. pro $\alpha = 2$ asymptotický rozptyl odhadu $\hat{\tau}_{MM}$ ve tvaru

$$Var(\hat{\tau}_{MM}) = \frac{1 - e^{-2b}(2b^2 + b - 1/2)}{(1 - e^{-2b}(2b^2 + 2b + 1))^2} \tau^2$$

a tabulku

b	2	2.5	3	3.5	4
$ARV(\hat{\tau}_{MM})$	0.703	0.849	0.927	0.969	0.984

takže s rostoucím α mohou klesat hodnoty 'ladicího' parametru.

V další tabulce jsou zachyceny výsledky simulačního experimentu. Data byla generována z kontaminovaného rozdělení $F(x) = (1 - \epsilon)F_1(x) + \epsilon F_\rho(x)$, kde F_τ značí exponenciální rozdělení. Testovány byly čtyři estimátory: maximálně věrohodný estimátor $\hat{\tau}_{ML}$ není robustní, systematické vychýlení odhadů získaných pomocí Huberova H15 estimátoru (nejlepší estimátor ze studie [5]) je způsobeno nesymetrií rozdělení a α -odhady ($\hat{\tau}_\alpha : \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i/\tau - 1) f_\tau^\alpha(X_i) = 0$, viz [14]) příliš závisí na hodnotě α , která opět závisí na 'neznámém' ρ . MM estimátor při volbě $b = 3.25$ a $\tilde{\tau}$ rovném

mediánu dává docela slušné výsledky. V tabulce uvádíme střední hodnoty odhadů $\bar{\tau}$ z 500 experimentů a rozsahem výběru $n = 200$ pro několik hodnot ρ a $\epsilon = 0.05$.

ρ	$\bar{\tau}_{ML}$	$\bar{\tau}_{H15}$	$\bar{\tau}_{MM}$	$\bar{\tau}_{\alpha=0.1}$	$\bar{\tau}_{\alpha=0.2}$
0	1.01	0.89	0.95	0.95	0.89
2	1.11	0.92	0.97	1.04	0.97
5	1.42	0.93	1.10	1.12	1.05
8	1.74	0.95	1.08	1.37	1.04

Zobecněnou a 'robustifikovanou' momentovou metodou lze v případě gamma rozdělení získat minimálně slušné počáteční hodnoty pro jemnější, ale mnohem komplikovanější postup navržený v [13]. Existuje však řada nesymetrických rodin, pro které není robustní verze ML odhadů známa (např. beta rozdělení, obecná rodina transformovaného beta (viz [12]) nebo rodina z příkladu 5 v [1]) a pro které obvyklé symetrické robustní estimátory nefungují (podobně jako H15 pro výběry z exponenciálního rozdělení). V takových případech je navržený MM-odhad možná jedinou metodou, která může poskytnout jakési ne úplně špatné výsledky.

Literatura

- (1) Fabián Z. (1997). Geometrické momenty, *Sborník Robust'96*, JČMF, 49-62.
- (2) Fabián Z. (1997). On the relation between gnostical and probability theories, *Kybernetika*, 33, 259-270.
- (3) Fabián, Z. (1997). Information and entropy of continuous random variables, *IEEE Trans. on Information Theory*, 43, 1080-1083.
- (4) Fabián Z. (2001). Induced cores and their use in robust parametric estimation, *Communications in Statistics, Theory and methods*, 30, 3.
- (5) Andrews D. F., Bickel D.J., Hampel F.R., Huber P.J., Rogers W.H. and Tukey J.W. (1972), *Robust estimates of location*, Princeton Univ. Press, Princeton.
- (6) Barnett V. (1999). *Comparative statistical inference*, Wiley, New York.
- (7) Guiard V. (1984). Systems of One-Dimensional Continuous Distributions and their Application in Simulation Studies. In *Robustness of Statistical Methods and Nonparametric Statistics*, Rash D. and Tiku M.L. (eds.), VEB Deutscher Verlag den Wissenschaften, Berlin.
- (8) Hampel F.R., Rousseeuw P.J., Ronchetti E.M., Stahel W.A. (1987). *Robust Statistic. The Approach Based on Influence Functions*, J. Wiley, New York.
- (9) Johnson N. L. (1949). Systems of Frequency Curves Generated by Methods of Translations, *Biometrika*, 36, 149.
- (10) Johnson N.L., Kotz S. (1970). *Continuous univariate distributions 2*, Houghton Mifflin, Boston.
- (11) Jurečková J., Sen P.K. (1996). *Robust statistical procedures: asymptotics and interrelations*, Wiley, New York.
- (12) Klugmann S.A., Panjer H.H., Willmott G.E. (1998). *Loss models. From data to decisions*, (Wiley, New York).
- (13) Marazzi A., Ruffieux C. (1996). Implementing M-estimators of the Gamma distribution, in *Robust Statistics, Data Analysis and Computer Intensive Methods* (H.Rieder ed.), Springer Lecture Notes in Statistics 109, 277-297.
- (14) Vajda I. (1986). Efficiency and robustness control via distorted maximum likelihood estimation, *Kybernetika*, 22, 47-67.

ODHAD PARAMETRU CHVOSTŮ DISTRIBUČNÍ FUNKCE

ALENA FIALOVÁ

ABSTRAKT. Distribution of maximum of the sequence of independent identically distributed random variables with nondegenerate distribution function converges (after proper normalization) to the one of the three distribution functions, extreme value distribution function. The shape of this distribution is affected by parameter γ . Estimation of this parameter is discussed and new estimator based on sample mean and is proposed.

Функция распределения максимума последовательности независимых одинаково распределённых случайных величин с невырожденной функцией распределения сходится (после подходящей нормализации) к одной из трёх функций распределения, функции распределения экстремального значения. Параметр γ влияет на вид этого распределения. Обсуждаются и предлагаются новые оценки этого параметра основанные на выборке среднего значения.

1. ÚVOD

Předmětem tohoto článku je problematika odhadu parametru chvostů rozdělení s těžkými chvosty. Nejdříve uvedeme základní výsledky v tomto oboru. Budeme se zabývat teorií extrémních hodnot, jejíž výsledky využijeme.

1.1. Teorie extrémních hodnot.

Uvažujme posloupnost nezávislých náhodných veličin X_i , $i = 1, 2, \dots$ s nedege-
nerovanou distribuční funkcí $F(x)$. Označme *výběrové maximum* $M_n = \max(X_1, \dots, X_n)$, $n \geq 1$. Základním problémem teorie extrémních hodnot je otázka, za jakých podmínek existuje asymptotické rozdělení pravděpodobností posloupnosti veličin $\{\frac{M_n - d_n}{c_n}\}$, při vhodné standardizaci posloupnostmi $\{c_n\}_{n=1}^\infty$, $\{d_n\}_{n=1}^\infty$. Odpověď dává následující věta, základní věta klasické teorie extrémních hodnot.

Věta 1.1. (Fisher-Tippett)

*Nechť $\{X_n\}$ je posloupnost nezávislých stejně rozdělených náhodných veličin s nedege-
nerovanou distribuční funkcí $F(x)$. Pak existují posloupnosti $c_n > 0$, d_n tak, že pro $M_n = \max(X_1, \dots, X_n)$, $n \geq 1$, platí*

$$(1.1) \quad c_n^{-1}(M_n - d_n) \xrightarrow{d} H_\gamma,$$

$$(1.2) \quad H_\gamma = \begin{cases} \Phi_{1/\gamma} & \gamma > 0, \\ \Lambda & \gamma = 0, \\ \Psi_{-1/\gamma} & \gamma < 0. \end{cases}$$

H_γ je jedním ze tří typů:

Frèchet: $\Phi_m(x) = \exp\{-x^{-m}\}$, $x > 0$, $m > 0$

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62F10; Secondary 62P05.

Klíčová slova. Rozdělení s těžkými chvosty, Hillův odhad, extrémních hodnoty.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR č. 201/00/0770 a grantu MSM 113200008.

Gumbel: $\Lambda(x) = \exp\{-e^{-x}\}$, $x \in \mathbb{R}$

Weibull: $\Psi_m(x) = \exp\{-(-x^m)\}$, $x \leq 0$, $m > 0$

Důkaz. Důkaz věty je poněkud komplikovaný a technický, ale ve zjednodušené formě lze říci, že jde o řešení funkcionálních rovnic. Volbou $c_n = 1$ pro vš. n se dokáže, že F je typu Λ . Jestliže existuje n_0 , takové, že $c_n < 1$ pro všechna n , pak F je typu Ψ_m pro nějaké $m > 0$. Pokud ex. n_0 , takové, že $c_n > 1$ pro všechna n , pak F je typu Φ_m pro nějaké $m > 0$. Náznak důkazu lze nalézt v Embrechts [4] nebo podrobněji de Haan v [5]. \square

Lze ukázat, že distribuční funkce H_0 je rovna limitě H_γ pro $\gamma \rightarrow 0$, proto ji můžeme psát ve tvaru

$$(1.3) \quad H_\gamma(y) = \exp\{-(1 + \gamma y)^{-1/\gamma}\}, \quad y > -\gamma^{-1}, \quad \gamma \in \mathbb{R}.$$

Funkce $H_\gamma(x)$ se nazývá *distribuční funkce standardního rozdělení extrémních hodnot* a parametr γ se nazývá *parametr rozdělení extrémních hodnot*. Jelikož funkce H_γ je jedinou možnou nedegenerovanou limitní distribuční funkcí rozdělení standardizovaných extrémních hodnot nazývá se také *max-stable*.

Říkáme, že distribuční funkce F náleží do *sféry přitažlivosti* H_γ , a píšeme $F \in D(H_\gamma)$, jakmile platí (1.1) pro nějaké posloupnosti $\{c_n\}$, $\{d_n\}$.

Hodnoty parametru $\gamma = 0$, $\gamma > 0$, $\gamma < 0$ distribuční funkce H_γ odpovídají kvalitativně naprosto odlišným rozdělením pravděpodobností. Proto odhad na základě pozorování je základním problémem nejen z matematického hlediska, ale i z hlediska aplikací. Zejména je důležité rozlišit mezi $\gamma = 0$ (exponenciální pravý chvost) a $\gamma > 0$ (algebraický, těžký pravý chvost).

1.2. Charakteristika tří sfér přitažlivosti.

V tomto odstavci nejprve připomeneme některé základní definice a zaměříme se na charakterizaci tří typů limitního rozdělení maxima.

Definice 1.2. Nechť F je distribuční funkce, pak funkce $U(t)$ daná vztahem

$$(1.4) \quad U(t) := F^\leftarrow(1 - 1/t) = \inf\{y : F(y) \geq 1 - 1/t\}, \quad t > 0,$$

se nazývá *kvantilová funkce chvostu*.

Nyní připomeneme definici pravidelně se měnící funkce a pomalu se měnící funkce. Obě tyto definice jsou důležité pro následnou charakterizaci distribuční funkce rozdělení s těžkými chvosty.

Definice 1.3. Řekneme, že funkce $G(t)$ je *pravidelně se měnící funkce (v nekonečnu)* s indexem m a značíme $G \in R_m$, jestliže

$$(1.5) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{G(xt)}{G(x)} = t^m, \quad t > 0.$$

Funkce $G(t)$, $G \in R_0$ se nazývá *pomalou se měnící funkce (v nekonečnu)*.

V následujícím textu uvedeme stručnou charakteristiku distribučních funkcí, které náležejí příslušným sférám přitažlivosti. V označení budeme užívat $\gamma = \frac{1}{m}$, $\gamma, m \neq 0$.

- 1. Fréchetovo rozdělení: $F \in D(H_\gamma)$, $\gamma > 0$

Nechť F patří do sféry přitažlivosti Fréchetova rozdělení s distribuční funkcí $\Phi_m(x) = \exp\{-x^{-m}\}$, $x > 0$, $m > 0$. Tato sféra přitažlivosti zahrnuje rozdělení s těžkými chvosty s distribuční funkcí F , s odpovídající kvantilovou funkcí chvostu U a zprava neomezeným nosičem, která se dají charakterizovat následujícím způsobem:

1. $1 - F(x) = x^{-m}L(x)$, L je pomalu se měnící funkce ($L(x) \in R_0$)
2. $F \in D(\Phi_m) \Leftrightarrow 1 - F \in R_{-m} \Leftrightarrow U \in R_\gamma$
3. Postačující podmínka pro ověření, zda náhodná veličina s distribuční funkcí F náleží do Frèchetovy sféry přitažlivosti je von Mises podmínka: Nechť $F(x)$ je absolutně spojitá distribuční funkce s hustotou $f(x)$ a

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{xf(x)}{1 - F(x)} = m, \quad \gamma > 0,$$

pak $F \in D(\Phi_m)$.

Příklady:

rozdělení	hustota		parametr γ
Cauchy	$\frac{1}{\pi(1+x^2)}$,	$x \in \mathbb{R}$	1
Pareto	$\frac{m}{x^{m+1}}$,	$x \geq 1$	$1/m$
Loggamma	$\frac{\lambda^m}{\Gamma(m)}(\log x)^{\lambda-1}x^{-m-1}$,	$x > 1, \lambda, m > 0$	$1/m$

- 2. Gumbelovo rozdělení: $F \in D(H_0)$

Tato sféra přitažlivosti zahrnuje širokou škálu rozdělení včetně normálního. Tato rozdělení mohou mít nosič zprava neomezený, může však být i konečný. Její charakterizace je následující:

$$1. F \in D(\Lambda) \Leftrightarrow \exists a(x) > 0 : \lim_{x \rightarrow x_F} \frac{1 - F(x + ta(x))}{1 - F(x)} = e^{-t}, \quad t \in \mathbb{R}$$

$$2. F \in D(\Lambda) \Leftrightarrow \exists c(x), a(x), g(x), \exists z < x_F : 1 - F(x) = c(x) \exp \left\{ - \int_z^x \frac{g(t)}{a(t)} dt \right\},$$

$$c(x) \rightarrow c > 0, g(x) \rightarrow 1, \text{ pro } x \rightarrow x_F, a(x) > 0, \lim_{x \rightarrow x_F} a'(x) = 0.$$

Příklady:

rozdělení	hustota		parametr γ
Exponenciální	$\lambda \exp(-\lambda x)$,	$\lambda > 0$	0
Weibullovo	$\lambda \kappa x^{\kappa-1} \exp(-\lambda x^\kappa)$,	$x > 0, \lambda, \kappa > 0$	0
Gamma	$\frac{\lambda^\kappa}{\Gamma(\kappa)} x^{\kappa-1} \exp(-\lambda x)$,	$x > 0, \lambda, \kappa > 0$	0
Normální	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2)$,	$x \in \mathbb{R}$	0

- 3. Weibullovo rozdělení: $F \in D(H_\gamma), \gamma < 0$

Poslední sféra přitažlivosti obsahuje rozdělení, která mají zprava omezený nosič hustoty. Její charakterizace je obdobná jako u Frèchetovy sféry přitažlivosti. Nechť x_F je pravý koncový bod, pak

$$1. 1 - F(x_F - 1/x) = x^{-m}L(x), \quad L(x) \in R_0$$

$$2. F \in D(\Psi_{-m}) \Leftrightarrow x_F < \infty \text{ a } F(x_F - 1/x) \in D(\Phi_{-m})$$

Příklady:

rozdělení	hustota		parametr γ
Rovnoměrné	1,	$x \in (0, 1)$	-1
Beta	$\frac{\Gamma(\lambda+m)}{\Gamma(\lambda)\Gamma(m)} x^{\lambda-1}(1-x)^{m-1}$,	$x \in (0, 1), \lambda, m > 0$	$-1/m$

2. ODHAD PARAMETRU ROZDĚLENÍ EXTRÉMních HODNOT γ

Tvar rozdělení extrémních hodnot je významně ovlivněn parametrem γ . Kladná hodnota γ indikuje těžké chvosty rozdělení F ; pokud navíc $0 < m < 2$, kde $m = 1/\gamma$, nemá F konečný druhý moment. S takovýmto případem se můžeme často setkávat při analýze dat z oblasti věcného neboli neživotního pojištění, příjmů obyvatel, katastrofických událostí a dalších. Proto je důležité odhadnout γ nebo zkonstruovat interval spolehlivosti pro γ , případně vhodný test o jeho hodnotě. Problémem odhadu parametru γ se zabývala řada autorů, např. Csörgő, Deheuvels a Mason [1],

Dekkers a de Haan [3] a Pickands [9]. Odhady jsou vesměs založeny na pořádkových statistikách příslušných výběru X_1, \dots, X_n , které označíme $X_{1:n} \leq \dots \leq X_{n:n}$.

2.1. Hillův odhad parametru $m = 1/\gamma > 0$.

V této práci uvedeme pouze několik řádek o Hillově odhadu. Byly navrženy i další odhady založené na podobném principu, můžeme uvést např. Pickandsův a momentový odhad. Ale Hillův odhad $H_{k,n}$ je nejužívanější a patrně nejpůvodnější odhad parametru $m = 1/\gamma$. Je založený na $k + 1$ největších pozorováních $X_{n-k:n}, \dots, X_{n:n}$:

$$H_{k,n} := \left(\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \log X_{n-i+1:n} - \log X_{n-k:n} \right)^{-1}, \quad k = 1, \dots, n - 1 .$$

To lze přepsat do tvaru $H_{k,n} := \left(\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \log \frac{X_{n-i+1:n}}{X_{n-k:n}} \right)^{-1}$, což lze lépe interpretovat. Pokud volíme k_n největších pozorováních v závislosti na n při $n \rightarrow \infty$ jako $k_n \rightarrow \infty$, $k_n/n \rightarrow 0$ pak lze dokázat slabou konzistenci $H_{k_n,n}$

$$H_{k_n,n} \xrightarrow{P} m .$$

Byla také dokázána silná konzistence odhadu $H_{k,n}$, tedy $H_{k,n} \rightarrow m$ *a.s.* pro $n \rightarrow \infty$, za podmínky, že $k_n/\log \log n \rightarrow \infty$ pro $n \rightarrow \infty$.

Hodnota k se v praxi určuje pomocí grafu $\{(k, H_{k,n}), k = 1, \dots, n - 1\}$ zvaného *Hill plot*; přesněji řečeno, hodnota parametru m je odvozena ze stabilní části grafu. To se ukazuje jako největší nevýhoda této techniky, protože Hill plot se může chovat značně nestabilně a kolem m stráví jen poměrně krátký úsek. Na druhou stranu je nutno poznamenat, že Hillův odhad je neefektivnější, když dané rozdělení je Pareto nebo blízké tomuto rozdělení.

Věta 2.1. (Asymptotická normalita Hillova odhadu)

Nechť $\{X_n\}$ je posloupnost nezávislých, stejně rozdělených náhodných veličin s distribuční funkcí $1 - F(x) = x^{-m}L(x)$, $m > 0$, kde $L(x)$ je pomalu se měnící funkce. Jestliže $\lim_{n \rightarrow \infty} k_n = \infty$ a jsou-li splněny další podmínky regularity, pak

$$(2.1) \quad \sqrt{k_n}(H_{k_n,n} - m) \xrightarrow{d} N(0, m^2) .$$

Postačující podmínky pro platnost (2.1) výrazně závisí na neznámé distribuční funkci $F(x)$ a dalším parametru, kterým je míra konvergence $(1 - F(tx))/(1 - F(x))$ k t^m . (Viz též Davis a Resnick [2]).

3. NOVÝ ODHAD $m = \frac{1}{\gamma}$ ZALOŽENÝ NA CHVOSTECH VÝBĚROVÉHO PRŮMĚRU

Navrhujeme odhad parametru rozdělení extrémních hodnot založený na novém principu, na chování chvostů rozdělení průměru n náhodných veličin.

Nejprve zavedeme dva typy chvostů. Nechť X_1, \dots, X_n jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny s distribuční funkcí $F(x)$, obecně neznámou. Předpokládejme, že k distribuční funkci $F(x)$ přísluší absolutně spojitá hustota $f(x)$ s nosičem zprava neomezeným. Rozlišujeme tyto dva typy chvostů:

1. *Exponenciálně klesající chvost*

je chvost typu $\exp(-bx^r)$, $b > 0$, $r \geq 1$, tedy

$$(3.1) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F(x))}{bx^r} = 1 .$$

Jestliže $F(x)$ má exponenciálně klesající chvost, pak F patří do sféry přitažlivosti Gumbelova rozdělení, např. volbou $a(x) = \frac{1}{br}x^{1-r}$ a

$$1 - F(x) = \exp \left\{ - \int_0^x brt^{r-1} dt \right\}.$$

2. Chvost Paretova typu (rozdělení s těžkým chvostem)

je chvost typu bx^{-m} , $b, m > 0$, tedy

$$(3.2) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F(x))}{m \log x} = 1.$$

Jestliže $F(x)$ má chvost Paretova typu (a existuje-li hustota $f(x)$), pak $F(x)$ patří do sféry přitažlivosti Frèchetova rozdělení; $F \in D(H_\gamma)$, $\gamma > 0$, $m = 1/\gamma$, jak také můžeme ověřit z von Misesovy podmínky:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{xf(x)}{1 - F(x)} = m = \frac{1}{\gamma}.$$

Příklad. 3.1. 1. Logistické a dvojitě-exponenciální rozdělení mají exponenciálně klesající chvosty s $r = 1$. Standardizované normální rozdělení $N(0, 1)$ má exponenciálně klesající chvosty s $r = 2$ a $b = \frac{1}{2}$.

2. Cauchyho rozdělení má těžké chvosty s parametrem $m = 1$. Studentovo rozdělení má chvosty Paretova typu s parametrem m rovným počtu stupňů volnosti.

Následující věta nám dává představu o tom, kolikrát rychleji klesají chvosty rozdělení \bar{X}_n k nule ve srovnání s chvosty základního rozdělení F .

Věta 3.1. Jestliže X_1, \dots, X_n je náhodný výběr z rozdělení s distribuční funkcí $F(x)$ a hustotou $f(x)$ takový, že

- a) $F(x)$ má chvosty Paretova typu pro nějaké $m > 0$,
 b) $f(x) = 0$ pro $x < 0$ a $0 < f(x) < \infty$ pro $x \geq K_f \geq 0$.

Pak

$$(3.3) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log P(\bar{X}_n > x)}{-\log P(X_1 > x)} = 1,$$

kde $\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_k$ je výběrový průměr.

Důkaz. Jestliže X_1, \dots, X_n jsou nezáporné náhodné veličiny s distribuční funkcí $F(x)$, pak pro výběrový průměr \bar{X}_n platí

$$\begin{aligned} P(\bar{X}_n > x) &= P(\sum_{i=1}^n X_i > nx) \geq P(\max_{1 \leq i \leq n} X_i > nx) = \\ &= 1 - (F(nx))^n \geq 1 - F(nx). \end{aligned}$$

Pak pro rozdělení s těžkými chvosty splňující (3.2) s parametrem $m > 0$ máme

$$\limsup_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log P(\bar{X}_n > x)}{-\log P(X_1 > x)} \leq \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F(nx))}{-\log P(X_1 > x)} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{m \log nx}{m \log x} = 1.$$

Podobně omezíme $P(\bar{X}_n > x)$ shora:

$$P(\bar{X}_n > x) \leq P(\max_{1 \leq i \leq n} X_i > x) = 1 - F(x)^n \leq n(1 - F(x)),$$

a pak dostáváme

$$\begin{aligned} \liminf_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log P(\bar{X}_n > x)}{-\log P(X_1 > x)} &\geq \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log n(1 - F(x))}{-\log P(X_1 > x)} = \\ &= \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log n + m \log x}{m \log x} = 1 . \end{aligned}$$

Tím je limita (3.3) dokázána. \square

Poznámka 3.2. Jurečková v [6] dokázala podobný výsledek, kde je uvažován pravý i levý chvost a symetrická hustota náhodné veličiny. Pokud uvažujeme exponenciálně klesající chvosty, pak chvosty výběrového průměru klesají k nule n krát rychleji než chvosty daného rozdělení, přesněji

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log P(|\bar{X}_n| > x)}{-\log P(|X_1| > x)} = n .$$

Věta (3.1) umožňuje zkonstruovat nový odhad parametru m , založeného na výběrových průměrech. Nechť X_1, \dots, X_n je náhodný výběr z rozdělení s těžkými chvosty, vyhovujícími (3.1). Pak podle (3.3) platí

$$(3.4) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log P(\bar{X}_n > x)}{m \log x} = 1$$

a tedy

$$(3.5) \quad m = \lim_{x \rightarrow \infty} m_n(x) ,$$

kde

$$(3.6) \quad m_n(x) = \frac{-\log P(\bar{X}_n > x)}{\log x} = \frac{-\log(1 - F_{\bar{X}_n}(x))}{\log x} .$$

To znamená, parametr m je funkcí chvostů rozdělení pravděpodobností výběrového průměru \bar{X}_n , tj. funkcí $-\log(1 - F_{\bar{X}_n}(x))$. Neznámou distribuční funkci $F_{\bar{X}_n}$ aproximujeme empirickou distribuční funkcí, stanovenou z k realizací výběrového průměru \bar{X}_n . Protože nás vzhledem k (3.5) zajímá průběh $1 - F_{\bar{X}_n}(x)$ pro velká x , musíme jako x volit vhodnou hodnotu x_k , dostatečně velkou, ale menší než $\max_{1 \leq i \leq n} X_i$.

Uvažujme situaci, že na základě předběžné informace víme, že rozdělení náhodné veličiny X je Paretova typu s indexem $m \leq m_0$, $0 < m \leq m_0 < \infty$. Tento závěr můžeme učinit na základě minulých zkušeností nebo z povahy experimentu (např. jedná se o rozdělení pravděpodobností důchodů, příjmů apod.) případně na základě předběžného testu hypotézy $H : m \leq m_0$ proti alternativě $K : m > m_0$. Takový test navrhli Jurečková a Pícek v [7]. V prvním přiblížení může být m_0 dost hrubé. Uvažujme k náhodných výběrů o rozsahu n , které označíme $(X_1^1, \dots, X_n^1), \dots, (X_1^k, \dots, X_n^k)$. Pak $\bar{X}_n^1, \dots, \bar{X}_n^k$ jsou příslušné výběrové průměry; vektor $(\bar{X}_n^1, \dots, \bar{X}_n^k)$ je nezávislý náhodný výběr z rozdělení, jehož distribuční funkci $F_{\bar{X}_n}(x) = P_m(\bar{X}_n \leq x)$ neznáme. Nechť $\hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k I[\bar{X}_n^i \leq x]$ je empirická distribuční funkce založená na $(\bar{X}_n^1, \dots, \bar{X}_n^k)$.

Zvolme posloupnost $\{x_k\}_{k=1}^\infty$ takovou, že $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \infty$ a $x_k = k^{\frac{1-\delta}{m_0}} L_1(k)$, kde $0 < \delta < \frac{1}{m_0}$ a $L_1(k)$ je pomalu se měnící funkce (v nekonečnu). Uvažujme odhad parametru m ve tvaru:

$$(3.7) \quad \hat{m}_n(x) = \bar{m}_n(x)I[\hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x) < 1] + m_0I[\hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x) = 1] ,$$

kde

$$(3.8) \quad \bar{m}_n(x) = \frac{-\log(1 - \hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x))}{\log x} , \quad x > 0 .$$

Následující věta ukazuje, že $\hat{m}_n(x_k)$ je (slabě) konzistentním odhadem m při $k \rightarrow \infty$.

Věta 3.3. *Za výše uvedených předpokladů a za podmínek a) a b) Věty 3.1 platí*

$$(3.9) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} P_m(|\hat{m}_n(x_k) - m| > \varepsilon) = 0 \quad \text{pro lib. } \varepsilon > 0 .$$

Důkaz. Nejprve dokážeme, že pro posloupnost x_k platí

$$P_m(\hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x_k) < 1) \longrightarrow 1 \quad \text{pro } k \rightarrow \infty, x_k \rightarrow \infty ,$$

tedy, že čítenel (3.8) má smysl s pravděpodobnostmi blížíící se k 1 a $\bar{m}_n(x_k)$ je definován. Pro rozdělení s těžkými chvosty s distribuční funkcí $F(x)$ a distribuční funkcí výběrového průměru $F_{\bar{X}_n}(x)$, víme

$$(3.10) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F(x))}{m \log x} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F_{\bar{X}_n}(x))}{m \log x} = 1 .$$

Pokud existují příslušné hustoty $f(x)$ a $f_{\bar{X}_n}(x)$, pak $F \in D(H_{1/m})$ a také $F_{\bar{X}_n} \in D(H_{1/m})$. Označme $\bar{X}_n^{(k)} = \max(\bar{X}_n^1, \dots, \bar{X}_n^k)$. Pak z (3.10) a s použitím von Misesovy podmínky rozdělení maxima náleží do $D(\Phi_m)$, sféry přitažlivosti Frèchetova rozdělení s distribuční funkcí $\Phi_m(x) = \exp\{-x^{-m}\}$, $x > 0$. Tedy můžeme psát

$$P_m\left(\frac{\bar{X}_n^{(k)}}{c_k} \leq x\right) \longrightarrow \Phi_m(x) , \quad k \rightarrow \infty ,$$

kde $c_k = k^{\frac{1}{m}} L_2(k)$ a $L_2(k)$ je pomalu se měnící funkce (v nekonečnu). Z předpokladů pro posloupnost $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ dostáváme

$$(3.11) \quad P_m(\bar{X}_n^{(k)} \leq x_k) = P_m\left(\frac{\bar{X}_n^{(k)}}{c_k} \leq \frac{x_k}{c_k}\right) \longrightarrow 0 , \quad k \rightarrow \infty ,$$

protože

$$0 \leq \frac{x_k}{c_k} = \frac{k^{\frac{1-\delta}{m_0}} L_1(k)}{k^{\frac{1}{m}} L_2(k)} \leq k^{-\frac{\delta}{m_0}} \frac{L_1(k)}{L_2(k)} \rightarrow 0 \quad \text{pro } k \rightarrow \infty$$

a $\Phi_m(0) = 0$.

Konečně spolu s (3.11), dostáváme $\lim_{k \rightarrow \infty} P_m(\hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x_k) < 1) = 1$.

Předpokládáme, že $\{\bar{X}_n^i\}_{i=1}^k$ jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny s distribuční funkcí $F_{\bar{X}_n}$, pak z Glivenko-Cantelliho věty plyne

$$(3.12) \quad \sup_{x \in \mathbb{R}} |\hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x) - F_{\bar{X}_n}(x)| \longrightarrow 0 \quad \text{a.s. pro } k \rightarrow \infty .$$

Dle (3.8) můžeme psát

$$\begin{aligned} \bar{m}_n(x_k) &= \frac{-\log(1 - \hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x_k))}{\log x_k} = \\ &= \frac{-\log \frac{1 - \hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x_k)}{1 - F_{\bar{X}_n}(x_k)}}{\log x_k} + \frac{-\log(1 - F_{\bar{X}_n}(x_k))}{m \log x_k} m . \end{aligned}$$

Pro každé $\varepsilon > 0$ existuje k_0 takové, že $\forall k \geq k_0$ je x_k dostatečně velké a oba členy mohou být omezeny

$$\left| \frac{-\log \frac{1 - \hat{F}_{\bar{X}_n}^k(x_k)}{1 - F_{\bar{X}_n}(x_k)}}{\log x_k} \right| \leq \varepsilon \quad \text{a} \quad \left| 1 - \frac{-\log(1 - F_{\bar{X}_n}(x_k))}{m \log x_k} \right| \leq \varepsilon .$$

Nyní uijeme obě meze pro $\bar{m}_n(x_k)$, dostáváme

$$-\varepsilon + (1 - \varepsilon)m \leq \bar{m}_n(x_k) \leq \varepsilon + (1 + \varepsilon)m$$

a odtud

$$|\bar{m}_n(x_k) - m| \leq \varepsilon + \varepsilon m \longrightarrow 0 \quad \text{pro } x_k \rightarrow \infty .$$

Tedy odhad $\hat{m}_k(x_k)$ je dobře definován a je slabě konzistentním odhadem parametru m . \square

LITERATURA

- [1] CSÖRGŐ, S., DEHEUELS, P. and MASON, D. (1985). Kernel estimates of the tail index of a distributions. *Ann. Statist.*, **13**, 1050–1077
- [2] DAVIS, R.A. and RESNICK, S.T. (1984). Tail estimates motivated by extreme value theory. *Ann. Statist.*, **12**, 1467–1487
- [3] DEKKERS, A.L.M., EINMAHL, J.H.J. and DE HAAN, L. (1989). A moment estimator for the index of an extreme value distribution. *Ann. Statist.*, **17**, 1833–1855
- [4] EMBRECHTS, P., KLÜPPELBELG, C. and MIKOSCH, T. (1997). *Modelling Extremal Events*. Springer-Verlag.
- [5] DE HAAN, L. (1975). On regular variation and its application to the weak convergence of sample extremes. *Math Centre Tracts* **32**. Centre for Mathematics and Computer Science, Amsterdam.
- [6] JUREČKOVÁ, J. (1981). Tail-behavior of location estimators. *Ann. Statist.*, **9**, 578–585
- [7] JUREČKOVÁ, J. (2000). Test of tails based on extreme regression quantiles. *Statist & Probab. Letters*, **49**, 53–61
- [8] MASON, D.M. (1982). Laws of large numbers for sums of extreme value. *Ann. Probab.*, **10**, 756–764
- [9] PICKANDS, J. III (1975). Statistical inference using extreme order statistics. *Ann. Statist.*, **3**, 119–131

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSKÁ 83, 186 75 PRAHA
E-MAIL: fialova@karlin.mff.cuni.cz

NEPARAMETRICKÁ DISKRIMINAČNÍ ANALÝZA

MARIE FORBELSKÁ

ABSTRAKT. In the paper the attention is focused to the application of kernel density estimators to statistical discrimination. After a brief description of the discriminant analysis problem the nonparametric approach to discriminant analysis is described. The multivariate product polynomial kernels with data-driven choices of the bandwidth are used for density estimators and this nonparametric approach are compared with classical one by some simulated data.

Резюме: Цель этой статьи касается приложения оценки плотности вероятности при помощи ядер в дискриминантном анализе. В статье сначала рассматриваются элементарные сведения по дискриминантному анализу и потом исследуется непараметрический подход при помощи многомерных полиномиальных ядер, построенных как произведение одномерных ядер, вместе с автоматическим выбором оптимального сглаживающего параметра. Параметрический и непараметрический подходы сравниваются при помощи имитирующих данных.

1. PODSTATA DISKRIMINAČNÍ ANALÝZY

Uvažujme danou množinu n objektů, označme ji \mathcal{S} a předpokládejme, že \mathcal{S} je tvořená objekty k různých typů. Budeme říkat, že objekt patří do třídy \mathcal{S}_j , je-li typu j ($j = 1, \dots, k$). O třídách \mathcal{S}_j budeme předpokládat, že jsou po dvou disjunktní a $\mathcal{S} = \bigcup_{j=1}^k \mathcal{S}_j$. Na každém objektu zjišťujeme dva statistické znaky X a \mathbf{Y} . X určuje příslušnost objektu do dané třídy, je to diskrétní náhodná veličina a $X = j$ právě když daný objekt patří do třídy \mathcal{S}_j , $j = 1, \dots, k$. $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_m)'$ je m -rozměrný náhodný vektor, který nějak charakterizuje příslušnou třídu objektů. Označme dále $(X_i, \mathbf{Y}'_i)'$ hodnoty znaků X a \mathbf{Y} na i -tém objektu a předpokládejme, že $(X_i, \mathbf{Y}'_i)'$ jsou nezávislé náhodné vektory, které tvoří náhodný výběr z rozdělení náhodného vektoru $(X, \mathbf{Y})'$.

Cílem diskriminační analýzy je stanovit na základě daného náhodného výběru optimální klasifikační pravidlo, které by při pozorování vektoru \mathbf{Y} na nějakém daném objektu, který již nepatří do třídy \mathcal{S} , umožnilo jeho zařazení do příslušné třídy s minimální ztrátou.

Při konstrukci takového klasifikačního pravidla vyjdeme z úplného rozkladu $\mathbb{S} = \{\mathbb{S}_1, \dots, \mathbb{S}_k\}$ prostoru \mathbb{R}^m možných hodnot vektoru \mathbf{Y} do k disjunktních tříd $\mathbb{S}_1, \dots, \mathbb{S}_k$. Když na uvažovaném objektu zjistíme hodnotu znaku \mathbf{Y} , která patří do třídy \mathbb{S}_j , rozhodneme, že tento objekt patří do třídy \mathcal{S}_j . S užitím tohoto klasifikačního pravidla spojíme ztrátu, která bude způsobena chybnou klasifikací objektu. Je-li daný objekt charakterizován vektorem $(X, \mathbf{Y})'$ a máme-li klasifikační pravidlo dané rozkladem \mathbb{S} , pak příslušnou ztrátu definujeme jako transformovanou diskrétní

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62H30; Secondary 30C40.

Klíčová slova. Lineární a kvadratická diskriminační analýza, neparametrická diskriminační analýza, jádrové odhady hustot, součinná jádra.

Příspěvek vznikl s podporou výzkumného záměru MŠMT, CEZ: J07/98:143100001.

náhodnou veličinu $Z_{\mathcal{S}}$ danou předpisem

$$Z_{\mathcal{S}} = Z_{\mathcal{S}}(X, \mathbf{Y}) = z_{jl} \quad \text{pokud } X = j \text{ a } \mathbf{Y} \in \mathcal{S}_l \quad l, j = 1, \dots, k,$$

kde z_{jl} jsou daná reálná čísla, charakterizující reálnou ztrátu při zařazení objektu ze třídy \mathcal{S}_j do třídy \mathcal{S}_l . V diskriminační analýze se často volí $z_{ll} = 0$ a $z_{jl} = 1$, $l, j = 1, \dots, k$; $l \neq j$. Klasifikační pravidlo, které minimalizuje střední hodnotu ztráty, pak nazýváme **optimálním**.

Abychom odvodili optimální klasifikační pravidlo, vyjdeme z následujících předpokladů a značení.

Nechť náhodný vektor $(X, \mathbf{Y})'$ definovaný na nějakém pravděpodobnostním prostoru (Ω, \mathcal{A}, P) má hustotu $f_{X\mathbf{Y}}(j, \mathbf{y})$ vzhledem k součinové míře $\mu = \nu_X \times \mu_{\mathbf{Y}}$, kde ν_X je čítačí míra a $\mu_{\mathbf{Y}}$ je Lebesquova míra, přičemž tato hustota je tvaru $f_{X\mathbf{Y}}(j, \mathbf{y}) = p_j f_j(\mathbf{y})$, $j = 1, \dots, k$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, $p_1 + \dots + p_k = 1$, $p_j > 0$ a $f_j(\mathbf{y})$ pro každé $j = 1, \dots, k$ je hustota rozdělení pravděpodobností vzhledem k Lebesquově míře. Zřejmě $f_j(\mathbf{y})$ je podmíněná hustota \mathbf{Y} , když $X = j$. Pak náhodná veličina X má marginální pravděpodobnostní funkci $P(X = j) = p_j$ ($j = 1, \dots, k$) a marginální rozdělení pravděpodobností u náhodného vektoru \mathbf{Y} je dáno hustotou $f_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^k p_j f_j(\mathbf{y})$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$. Tedy v uvedeném značení má ztráta $Z_{\mathcal{S}}$ pravděpodobnostní funkci tvaru $p_{Z_{\mathcal{S}}}(j, l) = P(X = j, \mathbf{Y} \in \mathcal{S}_l) = \int_{\mathcal{S}_l} p_j f_j(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y})$, $l, j = 1, \dots, k$. Snadno nahlédneme, že

$$\begin{aligned} E(Z_{\mathcal{S}}) &= L_{\mathcal{S}} = \sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^k z_{jl} P(Z_{\mathcal{S}} = z_{jl}) = \sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^k z_{jl} P(X = j, Y \in \mathcal{S}_l) = \\ &= \sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^k z_{jl} p_{Z_{\mathcal{S}}}(j, l) = \sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^k z_{jl} \int_{\mathcal{S}_l} p_j f_j(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = \\ &= \sum_{l=1}^k \sum_{j=1}^k z_{jl} \int_{\mathcal{S}_l} p_j f_j(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = \sum_{l=1}^k \int_{\mathcal{S}_l} \sum_{j=1}^k z_{jl} p_j f_j(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) \end{aligned}$$

Funkci $q_l(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^k z_{jl} p_j f_j(\mathbf{y})$ nazveme **l -tý skór vektoru \mathbf{Y}** a při konstrukci klasifikačního pravidla hraje centrální roli.

Cílem nyní je určit optimální úplný rozklad $\mathcal{S}^* = \{\mathcal{S}_1^*, \dots, \mathcal{S}_k^*\}$ m -rozměrného euklidovského prostoru \mathbb{R}^m tak, aby střední hodnota ztráty $E(Z_{\mathcal{S}^*})$ byla minimální. Důležitou roli hraje následující lemma (viz. [1]).

Lemma 1.1. *Nechť $\mathcal{S}^* = \{\mathcal{S}_1^*, \dots, \mathcal{S}_k^*\}$ je takový rozklad \mathbb{R}^m , že pro $\forall t \in \{1, \dots, k\}$ platí*

$$(1.1) \quad \mathbf{y} \in \mathcal{S}_t^* \quad \Rightarrow \quad q_t(\mathbf{y}) \leq q_j(\mathbf{y}), \quad j = 1, \dots, k.$$

Pak tento rozklad minimalizuje $E(Z_{\mathcal{S}})$, tj.

$$\text{označíme-li} \quad L^* = E(Z_{\mathcal{S}^*}) = \sum_{i=1}^k \int_{\mathcal{S}_i^*} q_i(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}),$$

pak platí $L_{\mathcal{S}} = E(Z_{\mathcal{S}}) \geq L^ = E(Z_{\mathcal{S}^*})$ pro každý rozklad \mathcal{S} .*

$$\begin{aligned} \text{Důkaz. } L &= E(Z_{\mathcal{S}}) = \sum_{l=1}^k \int_{\mathcal{S}_l} q_l(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = \sum_{l=1}^k \sum_{t=1}^k \int_{\mathcal{S}_l \cap \mathcal{S}_t^*} q_l(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) \geq \\ &\geq \sum_{l=1}^k \sum_{t=1}^k \int_{\mathcal{S}_l \cap \mathcal{S}_t^*} q_t(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = \sum_{t=1}^k \int_{\mathcal{S}_t^*} q_t(\mathbf{y}) d\mu_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = E(Z_{\mathcal{S}^*}) = L^* \quad \square \end{aligned}$$

Je zřejmé, že hodnota L^* je stejná pro všechny rozklady splňující podmínku předchozího lemmatu.

Z lemmatu 1.1 plyne, že **klasifikační pravidlo dané rozkladem (1.1) je optimální**. Pokud tedy při daném $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ pro všechna $j \neq t$ platí $q_t(\mathbf{y}) < q_j(\mathbf{y})$, pak optimálním rozhodnutím je zařadit daný objekt do t -té třídy. V případě, že v předchozím vzorci platí rovnost i pro další ($j \neq t$), je lhostejné, podle kterého pravidla budeme z těchto minimalizujících indexů vybírat.

Při volbě $\mathbf{z}_{1l} = \mathbf{0}$ a $\mathbf{z}_{jl} = \mathbf{1}$, $l, j = 1, \dots, k$, $l \neq j$, kdy

$$q_l(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^k p_j f_j(\mathbf{y}) - p_l f_l(\mathbf{y}) = f_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) - p_l f_l(\mathbf{y}),$$

snadno dostaneme další ekvivalentní **optimální klasifikační pravidlo** založené na nerovnosti

$$(1.2) \quad p_t f_t(\mathbf{y}) \geq p_j f_j(\mathbf{y}) \quad \text{pro } j = 1, \dots, k.$$

2. ROZHODOVACÍ PRAVIDLA V PŘÍPADĚ NORMÁLNÍCH ROZDĚLENÍ

V tomto odstavci budeme předpokládat, že podmíněné rozdělení náhodného vektoru \mathbf{Y} za podmínky, že $X=j$, je m -rozměrné normální rozdělení $N_m(\boldsymbol{\mu}_j, \mathbf{V}_j)$ se známým vektorem středních hodnot $E(\mathbf{Y}|X=j) = \boldsymbol{\mu}_j$ a známou varianční maticí $\text{var}(\mathbf{Y}|X=j) = \mathbf{V}_j$ ($j = 1, \dots, k$). Pak hustota tohoto podmíněného rozdělení je dána vzorcem

$$f_j(\mathbf{y}) = (2\pi)^{-\frac{m}{2}} |\mathbf{V}_j|^{-\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_j)' \mathbf{V}_j^{-1} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_j) \right].$$

Klasifikační pravidlo (1.2) lze v tomto případě vyjádřit jako

$$\log p_t + \log f_t(\mathbf{y}) > \log p_j + \log f_j(\mathbf{y}), \quad j = 1, \dots, k, j \neq t.$$

Označme $D_j = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}_j| - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_j)' \mathbf{V}_j^{-1} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_j) + \log p_j$.

Pak klasifikační pravidlo (1.2) odpovídá

$$(2.1) \quad D_t > D_j, \quad j = 1, \dots, k, j \neq t.$$

Diskriminační metoda založená na nerovnosti (2.1) se nazývá **kvadratická diskriminační analýza**.

Pokud jsou si **všechny varianční matice rovny**, tj. $\mathbf{V}_1 = \dots = \mathbf{V}_k = \mathbf{V}$, potom

$$\begin{aligned} D_j &= -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}| - \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_j)' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}_j) + \log p_j = \\ &= -\frac{1}{2} \log |\mathbf{V}| + \log p_j - \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{y}' \mathbf{V}^{-1} \boldsymbol{\mu}_j - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_j' \mathbf{V}^{-1} \boldsymbol{\mu}_j \end{aligned}$$

Označme $d_j = \mathbf{y}' \mathbf{V}^{-1} \boldsymbol{\mu}_j - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_j' \mathbf{V}^{-1} \boldsymbol{\mu}_j + \log p_j$.

Pak $D_j = d_j - \frac{1}{2} \log |\mathbf{V}| - \frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{y}$

a klasifikační pravidlo (2.1) je v tomto speciálním případě ekvivalentní s nerovností

$$(2.2) \quad d_t > d_j, \quad j = 1, \dots, k, j \neq t.$$

Diskriminační metoda založená na nerovnosti (2.2) se nazývá **lineární diskriminační analýza**.

3. DISKRIMINACE Z EXPERIMENTÁLNÍCH DAT

Při praktickém provádění diskriminační analýzy máme k dispozici k souborů objektů, přičemž víme, který objekt do které třídy patří. Těmto souborům se někdy říká **trénovací**. Počet objektů v j -tém souboru označme n_j a realizace vektoru \mathbf{Y} v j -tém souboru označme $\mathbf{y}_{j1}, \dots, \mathbf{y}_{jn_j}$. Mějme dále realizaci $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ náhodného vektoru \mathbf{Y} , o které nevíme, odkud pochází.

Protože obvykle neznáme rozdělení náhodného vektoru $(X, \mathbf{Y})'$, pak se při klasifikaci neznámého objektu nabízí dva možné přístupy :

Parametrický přístup: Předpokládáme, že podmíněné rozdělení náhodného vektoru \mathbf{Y} za podmínky, že $X = j$, je normální. V konkrétních situacích obvykle neznáme vektory středních hodnot $\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_k$ a varianční matice V_1, \dots, V_k . K dispozici však máme trénovací soubory a pomocí nich určíme $\bar{\mathbf{y}}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} \mathbf{y}_{ji}$, $\mathbf{C}_j = \sum_{i=1}^{n_j} (\mathbf{y}_{ji} - \bar{\mathbf{y}}_j)(\mathbf{y}_{ji} - \bar{\mathbf{y}}_j)'$, $\hat{p}_j = \frac{n_j}{n_1 + \dots + n_k}$. Jestliže vektor $\boldsymbol{\mu}_j$ odhadneme vektorem $\bar{\mathbf{y}}_j$, matici \mathbf{V}_j maticí $\hat{\mathbf{V}}_j = \frac{1}{n_j - 1} \mathbf{C}_j$ a apriorní pravděpodobnost p_j relativní četností \hat{p}_j , můžeme pro zařazení objektu, jehož příslušnost nepoznáme, použít postupy předchozího odstavce tak, že neznámé parametry nahradíme jejich odhady.

Neparametrický přístup: Nebudeme předpokládat určitý typ podmíněného rozdělení vektoru \mathbf{Y} za podmínky, že $X = j$, ale pomocí trénovacích dat odhadneme neznámé podmíněné hustoty $f_j(\mathbf{y})$. Přirozeně se nabízí použít neparametrické metody odhadu hustot, např. jádrové odhady hustoty, odhady hustoty pomocí k nejbližších sousedů a další (viz. [7]).

Pro zařazení objektu, jehož příslušnost nepoznáme, potom použijeme **rozhodovací pravidlo** (1.2) s tím, že neznámé podmíněné hustoty $f_j(\mathbf{y})$ nahradíme neparametrickým odhadem $\hat{f}_j(\mathbf{y})$ a apriorní pravděpodobnost p_j relativní četností $\hat{p}_j = \frac{n_j}{n_1 + \dots + n_k}$. Dostaneme tak **rozhodovací pravidlo**: realizaci \mathbf{y} zařadíme do t -té skupiny, pokud pro všechna $j \neq t$ bude platit $\hat{p}_t \hat{f}_t(\mathbf{y}) \geq \hat{p}_j \hat{f}_j(\mathbf{y})$.

Obvykle, před zařazováním nových objektů, ověříme klasifikační proceduru na samotných objektech z trénovacích souborů a registrujeme procento nesprávných zařazení. Jestliže soubor trénovacích dat neumožňuje vytvořit spolehlivou klasifikační proceduru ani pro trénovací data samotná, nelze samozřejmě klasifikaci realizovat.

4. JÁDROVÉ ODHADY POUŽITÉ V NEPARAMETRICKÉ DISKRIMINAČNÍ ANALÝZE

V tomto odstavci zavedeme jednorozměrná (resp. vícerozměrná) jádra pro odhad hustoty pravděpodobnosti náhodných veličin (resp. náhodných vektorů) a popíšeme speciální typy jader, která budou použita pro neparametrickou diskriminaci.

Nechť y_1, \dots, y_n jsou nezávislá pozorování náhodné veličiny Y s hustotou $f(y)$. **Jádrem** rozumíme libovolnou funkci $K : (R, \mathcal{B}) \rightarrow (0, +\infty)$, jež je symetrická, ohraničená a pro niž

$$(4.1) \quad \int_{-\infty}^{\infty} K(y) dy = 1, \quad a \quad \lim_{y \rightarrow \pm\infty} |y|K(y) = 0,$$

Nechť $\{h_n\}_{n=1}^{\infty}$ je posloupnost kladných čísel taková, že $\lim_{n \rightarrow \infty} h_n = 0$, $\lim_{n \rightarrow \infty} nh_n = \infty$ a $K(y)$ je některé jádro.

Jádrový odhad hustoty je definován vztahem (viz. [2] a [5]).

$$(4.2) \quad \hat{f}_n(y) = \frac{1}{nh_n} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{y - y_i}{h_n}\right) \quad y \in \mathbb{R}.$$

Velká pozornost musí být věnována **volbě nejvhodnější konstanty** h_n , tzv. *šířce okna*, neboť podstatným způsobem ovlivňuje kvalitu odhadu. Pro optimální volbu parametru h_n je třeba provést také odhad derivace funkce f (viz. [7] a [8]).

Symbolem \mathcal{C}^{k_0} označme množinu všech k_0 -krát spojitě diferencovatelných reálných funkcí, kde $k_0 > 0$ je celé číslo. Jsou-li navíc tyto funkce nulové vně intervalu $[-1, 1]$, označme množinu těchto funkcí symbolem $\mathcal{C}^{k_0}[-1, 1]$.

Nechť y_1, \dots, y_n jsou nezávislá pozorování náhodné veličiny Y s hustotou $f(y) \in \mathcal{C}^{k_0}$. Jádrový odhad **derivace** $f^{(\nu)}$ pro pevné $0 \leq \nu < k_0$ je definován

vztahem

$$(4.3) \quad \hat{f}_{h,K}^{(\nu)}(y) = \frac{1}{nh^{\nu+1}} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{y-y_i}{h}\right).$$

Označme $Lip[a, b]$ třídu spojitých funkcí splňujících Lipschitzovu podmínku na $[a, b]$:

$$|f(x) - f(y)| \leq L|x - y| \quad \forall x, y \in [a, b], \quad L > 0.$$

Nechť ν, k jsou nezáporná celá čísla, $0 \leq \nu < k < k_0$ a jádro $K \in Lip[-1, 1]$, přičemž nosič jádra $support(K) \subseteq [-1, 1]$. Nechť K splňuje následující momentové podmínky

$$(4.4) \quad \int_{-1}^1 x^j K(x) dx = \begin{cases} 0 & 0 \leq j < k, j \neq \nu \\ (-1)^\nu \nu! & j = \nu \\ \beta_k \neq 0 & j = k \end{cases}$$

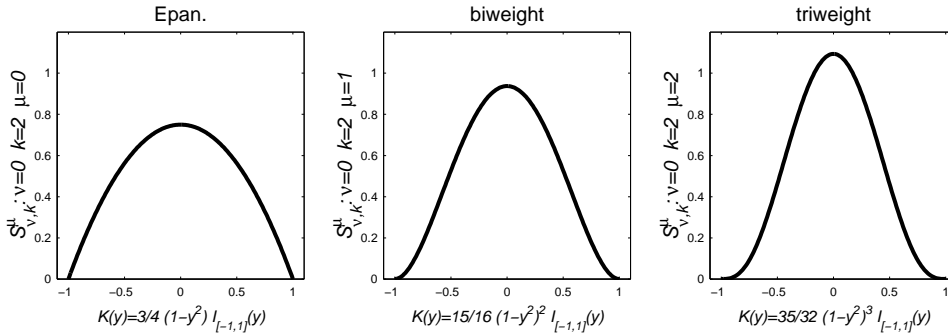
pak říkáme, že **jádro K je řádu (ν, k)** a píšeme $K \in \mathcal{S}_{\nu,k}^0$.

Pro $\mu \geq 1$ nechtě $K \in C^\mu[-1, 1]$, $K \in \mathcal{S}_{\nu,k}^0$. Navíc nechtě platí $K^{(j)}(1) = K^{(j)}(-1) = 0$, $j = 0, 1, \dots, \mu - 1$, $0 \leq \nu \leq k - 2$ a $\nu + k$ je sudé. Pak takové jádro se nazývá **jádro hladkosti μ** a píšeme $K \in \mathcal{S}_{\nu,k}^\mu$. Příkladem jádra $\mathcal{S}_{0,2}^0$ je Epanečnikovo jádro, $\mathcal{S}_{0,2}^1$ kvartické (biweight) jádro a $\mathcal{S}_{0,2}^2$ triweight jádro (viz. [3]).

V práci použijeme jádra :

Epanečnikovo	$K(y) = \frac{3}{4} (1 - y^2) I_{[-1,1]}(y)$
kvartické(biweight)	$K(y) = \frac{15}{16} (1 - y^2)^2 I_{[-1,1]}(y)$
triweight	$K(y) = \frac{35}{32} (1 - y^2)^3 I_{[-1,1]}(y)$

kde $I_{[a,b]}(y) = \begin{cases} 1 & y \in [a, b] \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$ (viz. obrázek 1.)



Obrázek 1: Ukázka jader typu $K \in \mathcal{S}_{\nu,k}^\mu$

Pro optimální volbu šířky okna tohoto typu jader použijeme algoritmus, který je popsán v práci [4].

Pro odhad hustoty pravděpodobnosti náhodných vektorů jsou definovány **vícerozměrné jádrové odhady** vztahem

$$(4.5) \quad \hat{f}_n(\mathbf{y}) = \frac{1}{nh_1 \dots h_m} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{y_1 - y_{i1}}{h_1}, \dots, \frac{y_m - y_{im}}{h_m}\right),$$

kde $\mathbf{y}_1 = (y_{11}, \dots, y_{1m}), \dots, \mathbf{y}_n = (y_{n1}, \dots, y_{nm})$ je náhodný výběr z m -rozměrného spojitého rozdělení o hustotě $f(\mathbf{y})$, $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^m$.

V dalším budeme používat jako jádro m -proměnných tzv. *součinnové jádro*, které je součinem m jader jedné proměnné, tj.

$$(4.6) \quad \hat{f}_n(\mathbf{y}) = \frac{1}{nh_1 \dots h_m} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^m K\left(\frac{y_j - y_{ij}}{h_j}\right),$$

kde $K \in \mathcal{S}_{\nu,k}^\mu$, přičemž opět využijeme algoritmus automatického vyhledávání optimální šířky oken pro tento typ jader (viz. [4]).

5. SROVNÁNÍ PARAMETRICKÉ A NEPARAMETRICKÉ DISKRIMINACE

Srovnání parametrické a neparametrické diskriminace je provedeno na simulovaných datech ze směsi **normálních rozdělání**:

$$(5.1) \quad f_a(y_1, y_2) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k f_{aj}(y_1, y_2) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \frac{1}{2\pi\sigma_{j1}\sigma_{j2}\sqrt{1-\rho_j^2}} \exp\left(-\frac{1}{2}q_j(y_1, y_2)\right)$$

kde

$$q_j(y_1, y_2) = \frac{1}{1-\rho_j^2} \left[\left(\frac{y_1 - \mu_{j1}}{\sigma_{j1}}\right)^2 - 2\rho_j \left(\frac{y_1 - \mu_{j1}}{\sigma_{j1}}\right) \left(\frac{y_2 - \mu_{j2}}{\sigma_{j2}}\right) + \left(\frac{y_2 - \mu_{j2}}{\sigma_{j2}}\right)^2 \right]$$

a ze směsi **hustot**:

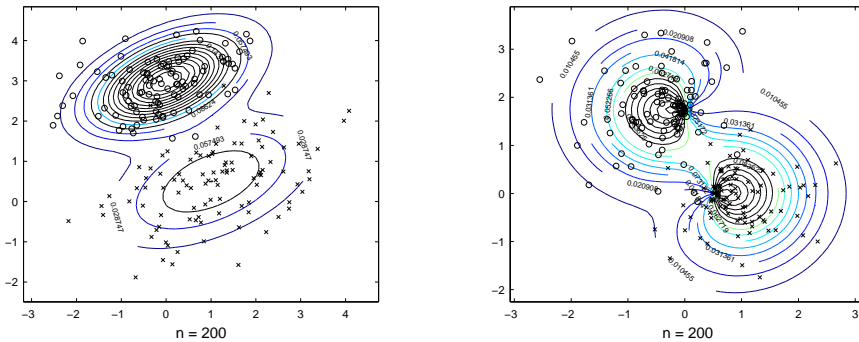
$$(5.2) \quad f_b(y_1, y_2) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k f_{bj}(y_1, y_2)$$

kde

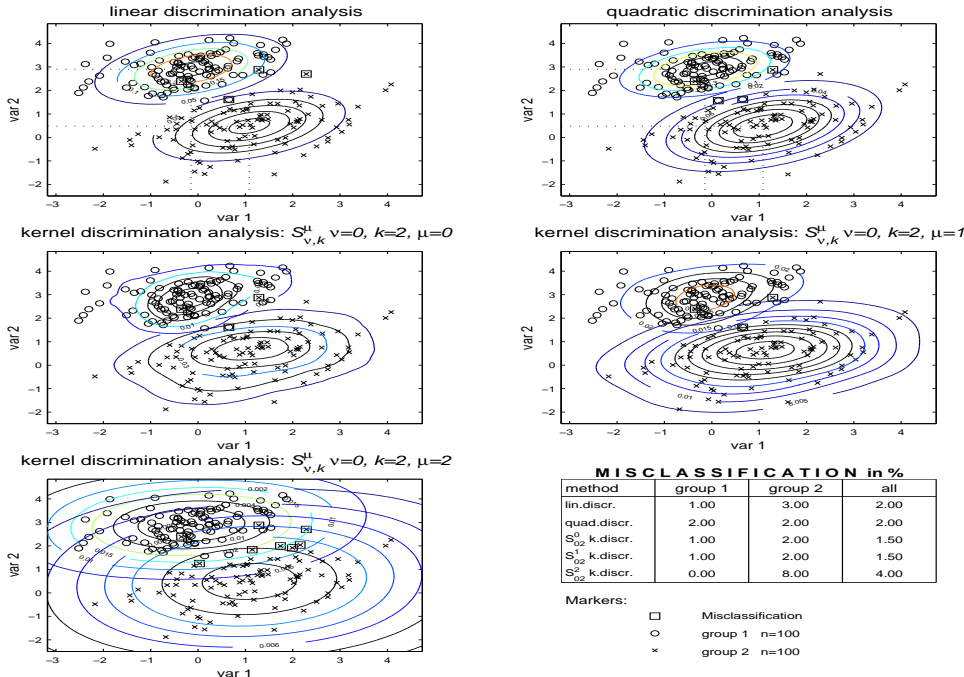
$$f_{bj}(y_1, y_2) = \frac{1}{2\pi} \left(1 + \frac{2\rho_j(y_1 - \mu_{j1})}{\sqrt{(y_1 - \mu_{j1})^2 + (y_2 - \mu_{j2})^2}} \right) \exp\left(-\frac{(y_1 - \mu_{j1})^2 + (y_2 - \mu_{j2})^2}{2}\right).$$

Příklady směsí typu (5.1) a (5.2) pro $k = 2$ jsou uvedeny na obrázku 2 a výsledky diskriminace těchto směsí jsou demonstrovány na obrázcích 3 a 4. Pro generování pseudonáhodných čísel z rozdělání typu (5.2) byl použit algoritmus doporučený v [6].

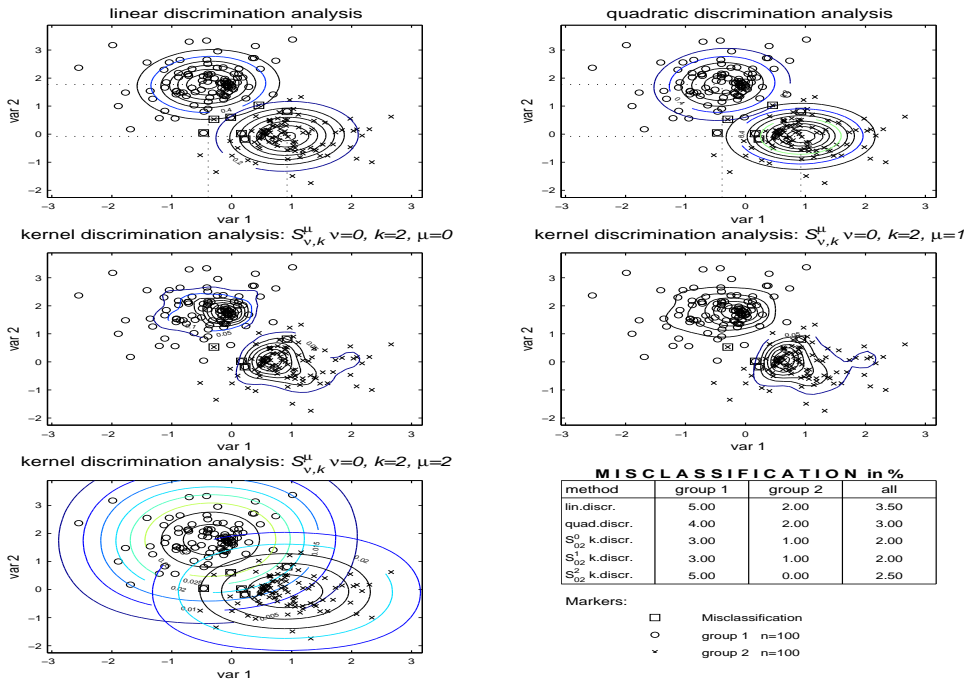
Normal Mixture: $f_a(y_1, y_2) = 0.5 f_{a1}(y_1, y_2) + 0.5 f_{a2}(y_1, y_2)$ Nonnormal mixture: $f_b(y_1, y_2) = 0.5 f_{b1}(y_1, y_2) + 0.5 f_{b2}(y_1, y_2)$



Obrázek 2: Simulovaná data spolu s vrstevnicovými grafy funkcí $f_a(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ a $f_b(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ s parametry: $\mu_{11}^a=0; \mu_{12}^a=3; \sigma_{11}^2=1; \sigma_{12}^2=0.5; \rho_1^a=0.5; \mu_{21}^a=1; \mu_{22}^a=0.5; \sigma_{21}^2=2; \sigma_{22}^2=1; \rho_2^a=0.5$ a $\mu_{11}^b=0; \mu_{12}^b=1.75; \rho_1^b=-0.5; \mu_{21}^b=0.5; \mu_{22}^b=0; \rho_2^b=0.5$.



Obrázek 3: Srovnání parametrické a neparametrické diskriminace s užitím jader typu $K \in S_{\nu,k}^{\mu}$ ($\nu=0, k=2, \mu=0, 1, 2$) pro simulovaná data ze směsi $f_a(x, y)$ normálních rozdělení.



Obrázek 4: Srovnání parametrické a neparametrické diskriminace s užitím jader typu $K \in S_{\nu,k}^{\mu}$ ($\nu=0, k=2, \mu=0, 1, 2$) pro simulovaná data ze směsi $f_b(x, y)$.

Pomocí simulací se ukázalo, že neparametrická diskriminace založená na jádrech $\mathcal{S}_{0,2}^0$ dává nejlepší výsledky, o něco horší neparametrická diskriminace založená na jádrech $\mathcal{S}_{0,2}^1$ a výrazně horší výsledky dosahuje neparametrická diskriminace založená na jádrech $\mathcal{S}_{0,2}^2$ (v důsledku příliš širokých vyhlazovacích oken poskytnutých algoritmem popsáným v práci [4]).

Pro tyto prvotní simulace se tedy ukazuje, že neparametrická diskriminace, tak jak je popsána v předchozím odstavci, může být srovnatelnou náhradou klasické diskriminace dokonce i v případě normálních směsí a může být užitečná v situacích, kdy není dostatečná informace o typu rozdělení ve směsi.

Normal Mixtures						
method	lin.discr.			quad.discr.		
	+	=	-	+	=	-
$\mathcal{S}_{0,2}^0$ k.discr.	75.00	12.50	12.50	37.50	41.67	20.83
$\mathcal{S}_{0,2}^1$ k.discr.	75.00	16.67	8.33	29.17	33.33	37.50
$\mathcal{S}_{0,2}^2$ k.discr.	62.50	4.17	33.33	12.50	20.83	66.67

Nonnormal Mixtures						
method	lin.discr.			quad.discr.		
	+	=	-	+	=	-
$\mathcal{S}_{0,2}^0$ k.discr.	72.22	16.67	11.11	77.78	22.22	0.00
$\mathcal{S}_{0,2}^1$ k.discr.	27.78	27.78	44.44	38.89	33.33	27.78
$\mathcal{S}_{0,2}^2$ k.discr.	27.78	27.78	44.44	33.33	33.33	33.33

Obrázek 6: **Tabulky srovnání parametrické a neparametrické diskriminace** (hodnoty jsou uvedeny v %).

LITERATURA

- [1] Anděl, J.: *Matematická statistika*. SNTL/ALFA. Praha 1978
- [2] Antoch, J., Vorlíčková, D.: *Vybrané metody statistické analýzy dat*. Academia, Praha 1992
- [3] Horová, I.: *Optimization Problems Connected with Kernel Smoothing, Signal Processing, Communications and Computer Science World*. Scientific and Engineering Press 2000, str. 339-445.
- [4] Horová, I., Vieu, P., Zelinka, J.: *Optimal Choice of Nonparametric Estimates of a Density and of its Derivates*, zasláno k tisku
- [5] Michálek, J.: *Kernel estimators - basic properties and optimal choice of parameters for estimation*. Proceedings ROBUST 94. Prague, 1994.
- [6] Nachtsheim, Ch., Johnson, M., E.: *A New Family of Multivariate Distributions With Applications to Monte Carlo Studies*. Journal of the American Statistical Association, Volume 83, Issue 404 (Dec., 1988), 984-989
- [7] Silverman, B. W.: *Density Estimation for Statistics and Data Analysis*. Chapman and Hall, New York, 1993.
- [8] Wand, I.P. and Jones, I.C.: *Kernel Smoothing*. Chapman & Hall, London 1995

MU PŘF, KAM, JANÁČKOVO NÁM. 2A, 662 95 BRNO
E-MAIL: forbel@math.muni.cz

ADAPTIVNÍ PŘÍSTUP V KALMANOVĚ FILTRU

PETR FRANĚK

ABSTRAKT. V práci je navržena adaptivní modifikace Kalmanova filtru pro gaussovský stavový model invariantní v čase s jednorozměrnou posloupností pozorování obsahující odlehlá pozorování. Modifikovaný filtr je využit k detekci a zpracování odlehlých pozorování.

An adaptive modification of the Kalman filter is proposed for gaussian time-invariant state-space model with univariate observations and additive outliers. This modified filter is used for detection and processing of additive outliers.

Резюме. В этой работе предложена адаптивная модификация фильтра Калмана для модели с одномерным наблюдением. Модифицированный фильтр использован для детекции и обработки отдалённых наблюдений.

1. ÚVOD

Kalmanův filtr (KF) byl navržen Kalmanem (viz [4]) jako rekurentní odhad neznámého stavového vektoru \mathbf{x}_t ve *stavovém modelu*. Poté byl poměrně úspěšně využíván při řešení úloh z oblasti navigace a zpracování signálu. Pro jeho příznivé vlastnosti (jednoduchost, rychlost, flexibilita) byl později používán také v ekonometrických úlohách. Z této doby se také datují první články, jejichž autoři poukazují na nedostatečnou robustnost Kalmanova filtru vůči vlivu odlehlých pozorování.

V souvislosti se stavovými modely se rozlišují dva typy odlehlých pozorování: aditivní odlehlá pozorování (AO), která jsou generována při transformaci stavu do pozorování a ovlivňují tedy pouze jediné pozorování, a inovační odlehlá pozorování (IO), která jsou generována ve stavové rovnici a ovlivňují všechna následující pozorování. Detekce a zpracování druhého typu odlehlých pozorování je poměrně nesnadná a v literatuře není téměř zastoupena.

V této práci je studována možnost konstrukce adaptivní modifikace KF tak, aby výsledný filtr umožnil on-line identifikaci a zpracování aditivních odlehlých pozorování. Tato práce vznikla v rámci přípravy disertační práce. Nepodává prozatím úplné řešení problému robustnosti KF, ale otevírá, doufejme, slibný směr pro další výzkum.

2. KALMANŮV FILTR A JEHO VLASTNOSTI

2.1. **Definice stavového modelu.** V této práci je uvažován stavový model v následujícím tvaru:

$$(1) \quad \begin{aligned} y_t &= \mathbf{h}x_t + v_t \\ \mathbf{x}_t &= \mathbf{F}\mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{w}_t. \end{aligned}$$

Zde \mathbf{x}_t je n -rozměrný stavový vektor a y_t je jednorozměrné pozorování, \mathbf{F} je známá matice typu $(n \times n)$, \mathbf{h} je známý vektor typu $(1 \times n)$ a v_t a \mathbf{w}_t jsou nezávislé centrované

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62M10; Secondary 62F35.

Klíčová slova. Kalmanův filtr, ARMA procesy.

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 201/00/0770 a MSM 113200008.

náhodné složky s neznámým rozptylem $\text{var } v_t = \sigma_t^2$ a známou kovarianční maticí $\text{var } \mathbf{w}_t = \mathbf{R}_t$. O počátečním stavu \mathbf{x}_0 se předpokládá $E \mathbf{x}_0 = \tilde{\mathbf{x}}_0$ a $\text{var } \mathbf{x}_0 = \mathbf{P}_0$.

Stavový systém v tomto tvaru zahrnuje celou řadu jednorozměrných modelů časových řad, například strukturální časové řady nebo modely ARMA a umožňuje jejich unifikaci a rozšíření (viz např. [3]).

2.2. Kalmanův filtr. Označíme-li $Y_t = \{y_1, \dots, y_t\}$ historii pozorování do času t , je nejlepší nestranný lineární odhad $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ neznámého stavu \mathbf{x}_t založený na historii Y_t a jeho kovarianční matice $\mathbf{P}_{t|t} = E(\mathbf{x}_t - \hat{\mathbf{x}}_{t|t})(\mathbf{x}_t - \hat{\mathbf{x}}_{t|t})'$ dán rekurentními vztahy Kalmanova filtru jako

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}_{t|t} &= \hat{\mathbf{x}}_{t|t-1} + \mathbf{P}_{t|t-1} \mathbf{h}' d_t^{-2} (y_t - \mathbf{h} \hat{\mathbf{x}}_{t|t-1}) \\ \hat{\mathbf{x}}_{t|t-1} &= \mathbf{F} \hat{\mathbf{x}}_{t-1|t-1} \\ \mathbf{P}_{t|t} &= \mathbf{P}_{t|t-1} - \mathbf{P}_{t|t-1} \mathbf{h}' d_t^{-2} \mathbf{h} \mathbf{P}_{t|t-1}' \\ \mathbf{P}_{t|t-1} &= \mathbf{F} \mathbf{P}_{t-1|t-1} \mathbf{F}' + \mathbf{R}_t \\ (2) \quad d_t^2 &= \mathbf{h} \mathbf{P}_{t|t-1} \mathbf{h}' + \sigma_t^2. \end{aligned}$$

Hodnoty $I_t = (y_t - \mathbf{h} \hat{\mathbf{x}}_{t|t-1})$ se nazývají *inovace*. Z vlastností Kalmanova filtru (viz [1]) vyplývá, že inovace jsou centrované, vzájemně nekorelované a proměnné d_t^2 jsou jejich rozptyly.

Mezi stavovými modely se rozeznávají dva speciální případy. Pokud jsou náhodné složky v_t a \mathbf{w}_t gaussovské, nazývá se model (1) *gaussovský*, pokud se rozdělení náhodných chyb nemění v čase (v případě modelu (1) tedy $\sigma_t^2 = \sigma^2$ a $\mathbf{R}_t = \mathbf{R} \forall t$), nazývá se model *invariantní v čase*. V gaussovském modelu je Kalmanův filtr dokonce nejlepším odhadem x_t získaným pomocí historie Y_t a výstupy filtru ($\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ a $\mathbf{P}_{t|t}$) jsou střední hodnotou a rozptylem normálního rozdělení $\mathcal{L}(\mathbf{x}_t | Y_t)$. Inovace I_t mají v tomto případě také normální rozdělení. V modelu invariantním v čase, který vyhovuje podmínce stability $|\lambda_i(\mathbf{F})| < 1$, kde $\lambda_i(\mathbf{F})$ jsou vlastní čísla matice \mathbf{F} (viz [1], str. 77), konverguje filtr exponenciálně rychle do tzv. *vyrovnaného stavu* (steady-state), v němž jsou rozptyly inovací d_t^2 a kovarianční matice $\mathbf{P}_{t|t}$ také invariantní v čase.

Dále v této práci bude předpokládáno, že model (1) je stabilní, gaussovský a invariantní v čase.

2.3. Odhad $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ v případě odlehlého pozorování. I v případech, kdy připustíme znalost systémových matic \mathbf{F} a \mathbf{h} , většinou nelze předpokládat znalost rozptylu σ_t^2 . V případě, že při výpočtu je použita nesprávná hodnota tohoto rozptylu, je výsledný odhad $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ odchýlen oproti odhadu získanému se správnou hodnotou rozptylu směrem k pozorování y_t a podobně diagonální prvky matice $\mathbf{P}_{t|t}$ podhodnocují skutečný rozptyl jednotlivých složek vektoru $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$. Například v případě, že y_t je aditivní odlehlé pozorování, je skutečná hodnota rozptylu σ_t^2 mnohem větší než použitá hodnota a filtrovaný stav $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ je výrazně odchýlen směrem k odlehlému pozorování (viz obrázek 2).

3. ADAPTIVNÍ KALMANŮV FILTR

3.1. Odhad rozptylu σ^2 . Je zřejmé, že klíčovým faktorem, který v uvažovaném modelu určuje kvalitu odhadu, je rozdíl mezi skutečným a použitým rozptylem náhodných složek v_t . V první řadě je proto třeba hledat adaptivní (a konzistentní) odhad tohoto rozptylu. Vzhledem k tomu, že dále v této práci se pracuje s inovacemi, je

zřejmě účelné odhadovat d^2 místo σ^2 . Při hledání vhodného on-line odhadu lze využít předpokladu, že model (1) je gaussovský a invariantní v čase a inovace jsou tedy nezávislé a stejně rozdělené s rozdělením $N(0, d^2)$. Tato vlastnost ovšem platí až po časovém okamžiku t_0 , kdy se filtr dostane do rovnovážného stavu. Prvních t_0 pozorování je proto použito ke spuštění adaptivního filtru: nejprve se (pro rozumný počáteční odhad σ^2) určí časový okamžik t_0 jako první doba, kdy pro nějakou míru vzdálenosti mezi maticemi platí $\|\mathbf{P}_{t+1|t} - \mathbf{P}_{t|t-1}\|^2 < \varepsilon$. Z prvních t_0 pozorování se poté pomocí EM-algoritmu odhadne počáteční odhad $\hat{\sigma}_{t_0}^2$ (EM-algoritmus je podrobně popsán například v [3].) Počáteční odhad rozptylu inovací d^2 v čase t_0 je pak dán jako $\hat{d}_{t_0}^2 = \mathbf{h}\mathbf{P}_{t_0|t_0-1}\mathbf{h}' + \hat{\sigma}_{t_0}^2$. Po čase t_0 lze odhad \hat{d}_t^2 rekurentně inovovat pomocí vztahu:

$$(3) \quad \hat{d}_{t+1}^2 = \frac{1}{t-t_0} I_{t+1}^2 + \frac{t-t_0-1}{t-t_0} \hat{d}_t^2, \quad t \geq t_0 + 1.$$

Díky vlastnostem Kalmanova filtru v uvažovaném modelu platí pro $t \geq t_0 + 1$ vztah $(t-t_0-1)\hat{d}_t^2/d^2 \sim \chi_{t-t_0-1}^2$.

3.2. Model odlehlých pozorování. Vznik odlehlých pozorování typu AO lze modelovat nahrazením náhodné složky v_t následujícím členem:

$$(4) \quad (1 - Z_t^\gamma)v_t + Z_t^\gamma q_t.$$

Zde $v_t \sim N(0, \sigma^2)$ odpovídá náhodnému členu z modelu (1), $q_t \sim H$ (H je centrované symetrické rozdělení) je náhodná složka generující odlehlá pozorování a $Z_t^\gamma \sim \text{Alt}(\gamma)$ jsou nezávislé náhodné indikátory odlehlých pozorování. V modelu (4) se tedy předpokládá, že v případě γ 100% pozorování je běžná náhodná složka v_t nahrazena náhodnou složkou pocházející z rozdělení s těžkými konci a zbytek pozorování pochází z běžného modelu.

Tento model vede k následující úvaze: klasický KF představuje pro většinu pozorování stále nejlepší odhad (zejména z hlediska rychlosti výpočtu), předpokládaný stavový model neplatí pouze pro zlomek pozorování. Pouze tato pozorování je tedy třeba zpracovat pomocí jiné metody, případně vhodné modifikace Kalmanova filtru.

Hledání modifikace KF se věnovala již řada autorů. V převážné většině navrhuje odlehlá pozorování oříznout pomocí Huberovy funkce (např. [9], [11]) nebo zpracovávat pomocí bayesovského přechodu ([5], [7], [10]). V prvním případě je zachována jednoduchost rekurentní aktualizace odhadů, odstranění nebo seřiznutí pozorování, které překročí určitou hranici, však znamená ztrátu informace. Ve druhém případě se pracuje s negaussovskými rozděleními a neexistuje obdoba Kalmanových rovnic (viz [7]). Používají se proto metody numerické integrace nebo metody Monte-Carlo, přičemž složitost takových řešení roste pro delší časové řady nad rozumné meze.

3.3. Detekce a zpracování odlehlých pozorování. Vzhledem k vlastnostem odhadu rozptylu inovací uvedeným výše lze psát $I_t/\sqrt{\sum_{j=t_0}^{t-1} I_j^2} \sim t_{t-t_0-2}$. Pozorování y_t , $t > t_0 + 2$, tedy bude detekováno jako odlehlé, pokud

$$(5) \quad \frac{|I_t|}{\sqrt{\sum_{j=t_0}^{t-1} I_j^2}} \geq t_{t-t_0-2}^{-1}(1 - \alpha/2),$$

kde α je úroveň nastavená před spuštěním filtru. Tato hodnota odráží přístup analytika k odlehlým pozorováním.

V případě, že je pozorování y_t identifikováno jako odlehlé, měl by být odhad $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ zkonstruován pomocí rozdělení generujícího odlehlá pozorování. Samozřejmě by bylo možné zvolit rozdělení H s dostatečně těžkými konci tak, aby jím bylo možné

modelovat i velmi odlehlá pozorování. Elegantnějším řešením je určení systému různé těžkých rozdělání, z něhož bude adaptivní filtr vybírat vhodné rozdělání s dostatečně (nikoli však zbytečně) těžkými konci.

Nejjednodušší takový systém lze definovat jako

$$(6) \quad \mathcal{L}_1 = \left\{ h(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{q^2}{\rho^2} \right], \rho \in (0, \infty) \right\}.$$

Jedná se o systém normálních rozdělání, v němž je směrodatná odchylka ρ použita k rozlišení jednotlivých rozdělání v systému. Práce s tímto systémem bude zřejmě velmi snadná, výsledný adaptivní filtr ale nebude zbaven nechtěných vlastností způsobených právě předpokladem normality náhodné složky v_t .

Následující systém byl navržen v knize [2]:

$$(7) \quad \mathcal{L}_2 = \left\{ h(q) = \frac{k}{\varphi} \exp \left[-\frac{1}{2} \left| \frac{q}{\varphi} \right|^{\frac{2}{1+\rho}} \right], \varphi > 0, \rho \in [0, 1] \right\},$$

kde $1/k = \Gamma((3+\rho)/2) 2^{(3+\rho)/2}$. Rozptyl náhodné veličiny X s rozděláním s hustotou $h(q)$ z tohoto systému je $\text{var } X = 2^{1+\rho} \varphi^2 \Gamma(\frac{3}{2}(1+\rho)) / \Gamma(\frac{1}{2}(1+\rho))$. Jak je patrné, hodnota $\rho = 0$ odpovídá normálnímu rozdělání, hodnota $\rho = 1$ dvojitě exponenciálnímu rozdělání, které představuje nejtěžší alternativu daného systému. Při zpracování časové řady by měl být parametr φ^2 nastaven na hodnotu $\hat{\sigma}_{t_0}^2$, tedy tak, aby rozdělání s $\rho = 0$ odpovídalo rozdělání složky v_t .

Volba parametru ρ by v konkrétním případě měla souviset se vzdáleností pozorované hodnoty y_t od očekávané hodnoty $\hat{y}_{t|t-1}$. K tomuto účelu se přímo nabízí dosažená hladina testu (5), tedy $p_t = 2(1 - F_{t-t_0-2}(|I_t|))$, kde F_{t-t_0-2} je distribuční funkce t -rozdělání s $t-t_0-2$ stupni volnosti. Je tedy $\hat{\rho} = R(p_t)$, kde funkci R lze volit libovolně tak, aby v systému \mathcal{L}_1 platilo: $R(p_t) \rightarrow \hat{\sigma}_{t_0}$ pro $p_t \rightarrow \alpha^-$ a $R(p_t) \rightarrow \infty$ pro $p_t \rightarrow 0+$; a v systému \mathcal{L}_2 platilo: $R(p_t) \rightarrow 0$ pro $p_t \rightarrow \alpha^-$ a $R(p_t) \rightarrow 1$ pro $p_t \rightarrow 0+$. Volba funkce R opět odráží požadavek analytika na stupeň zajištění modelu proti vlivu odlehlých pozorování.

Návrh adaptivního filtru má dvě úskalí: je třeba určit, jak má být proveden rekurentní výpočet odhadu $\hat{x}_{t|t}$ a $\mathbf{P}_{t|t}$ v případě, že pozorování y_t je identifikováno jako odlehlé a bylo vybráno vhodné rozdělání H , a dále je třeba určit, jakým způsobem se má v čase $t+1$ filtr vrátit zpět do gaussovského režimu.

Druhý ze sporných bodů lze vyřešit následujícím způsobem: odhad $\hat{x}_{t|t}$ a jeho kovarianční matice $\mathbf{P}_{t|t}$ získané nějakou metodou negaussovské filtrace lze chápat jako apriorní rozdělání pro spuštění Kalmanových rekurzí v čase $t+1$. Rozdělání $\mathcal{L}(x_t|Y_t)$, které v tomto případě není gaussovské, je tedy nahrazeno normálním rozděláním se stejnou střední hodnotou a rozptylem. Tento přístup lze obhájit díky skutečnosti, že vliv počátečního rozdělání mizí v časově invariantním filtru exponenciálně rychle. Chyba způsobená nahrazením skutečného rozdělání normálním je tedy systémem vstřebána exponenciálně rychle. Podrobnější diskuzi této vlastnosti je možné vyhledat v práci [7].

První problém je složitější. Za předpokladu, že pozorování y_t je identifikováno jako odlehlé a na jeho základě je vybráno rozdělání $H_t(\hat{\rho})$, je třeba provést rekurentní přechod. V obecném stavovém modelu lze tento přechod popsat pomocí bayesovského kalkulu. Zajímáme-li se pouze o střední hodnotu a rozptyl rozdělání $\mathcal{L}(x_t|Y_t)$, je možné využít následující větu vyslovenou v práci [8]:

Platí-li $\mathcal{L}(\mathbf{x}_t|Y_{t-1}) \sim N(\hat{\mathbf{x}}_{t|t-1}, \mathbf{P}_{t|t-1})$ a je-li podmíněné rozdělení $p(y_t|Y_{t-1})$ dvakrát diferencovatelné, pak

$$(8) \quad \begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}_{t|t} &= \hat{\mathbf{x}}_{t|t-1} + \mathbf{P}_{t|t-1} \mathbf{h}' g_t(y_t) \\ \mathbf{P}_{t|t} &= \mathbf{P}_{t|t-1} - \mathbf{P}_{t|t-1} \mathbf{h}' G_t(y_t) \mathbf{h} \mathbf{P}_{t|t-1} \end{aligned}$$

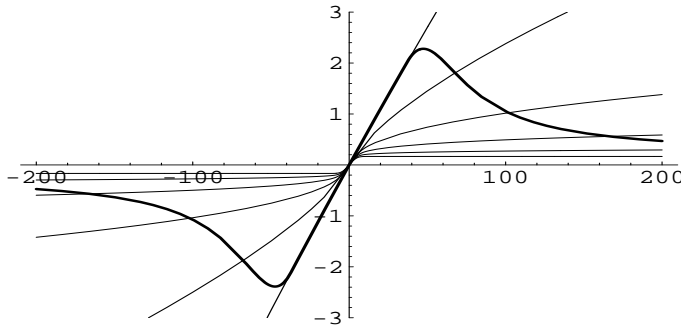
kde $g_t(y_t) = -\frac{1}{p(y_t|Y_{t-1})} \frac{\partial p(y_t|Y_{t-1})}{\partial y_t}$ je inovační funkce určující vliv nového pozorování na odhad $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ a $G_t(y_t) = \frac{\partial g_t(y_t)}{\partial y_t}$ je inovační funkce určující vliv nového pozorování na kovarianční matici $\mathbf{P}_{t|t}$.

Pro provedení filtrace je třeba hustota $p(y_t | Y_{t-1})$ a její první a druhá derivace v bodě y_t . V podstatě jde o nalezení konvoluce $N(\mathbf{h}\hat{\mathbf{x}}_{t|t-1}, \mathbf{h}\mathbf{P}_{t|t-1}\mathbf{h}') * H$. V systému \mathcal{L}_1 je její nalezení snadné a Masrelieův filtr přejde na Kalmanův filtr. V obecném případě většinou nelze konvoluci explicitně vyjádřit.

Tak je tomu i v případě systému \mathcal{L}_2 . Označíme-li $\hat{y}_{t|t-1} = \mathbf{h}\hat{\mathbf{x}}_{t|t-1}$ a $\hat{\tau}^2 = \mathbf{h}\mathbf{P}_{t|t-1}\mathbf{h}'$ je třeba vypočítat integrál

$$(9) \quad p(y_t | Y_{t-1}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hat{\tau}^2}} \frac{k}{\varphi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2} \frac{(x - \hat{y}_{t|t-1})^2}{\hat{\tau}^2}} e^{-\frac{1}{2} \left| \frac{x - y_t}{\varphi} \right|^{\frac{2}{1+\rho}}} dx.$$

Numerická aproximace funkce g_t pro různé hodnoty ρ je zobrazena na obrázku 1. Tučně je zobrazena celková inovační funkce použitá při zpracování odlehlých pozorování. Z jejího tvaru lze dospět k následujícímu závěru: vliv odlehlých pozorování na $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ je omezen podobně jako v případě Huberovy funkce. Na rozdíl od ní je však v adaptivním filtru dána větší váha mírně odlehlým pozorování - to odpovídá určité míře nejistoty, od které hodnoty je třeba pokládat pozorování za odlehlá. Matice $\mathbf{P}_{t|t}$ závisí na derivaci inovační funkce. V případě Huberovy funkce je tato derivace pro všechna oříznutá pozorování nulová, vliv odlehlého pozorování se na hodnotách matice neprojeví. Oproti tomu v případě adaptivního filtru má pro mírně odlehlá pozorování inovační funkce g_t zápornou derivaci, tzn. matice $\mathbf{P}_{t|t}$ se oproti matici $\mathbf{P}_{t|t-1}$ zvětší o pozitivně semidefinitní matici, což opět odpovídá zvýšené nejistotě v případě mírně odlehlých pozorování. Pro velmi odlehlá pozorování je derivace blízká nule, velmi odlehlá pozorování tedy nemají na odhad $\hat{\mathbf{x}}_{t|t}$ téměř žádný vliv.

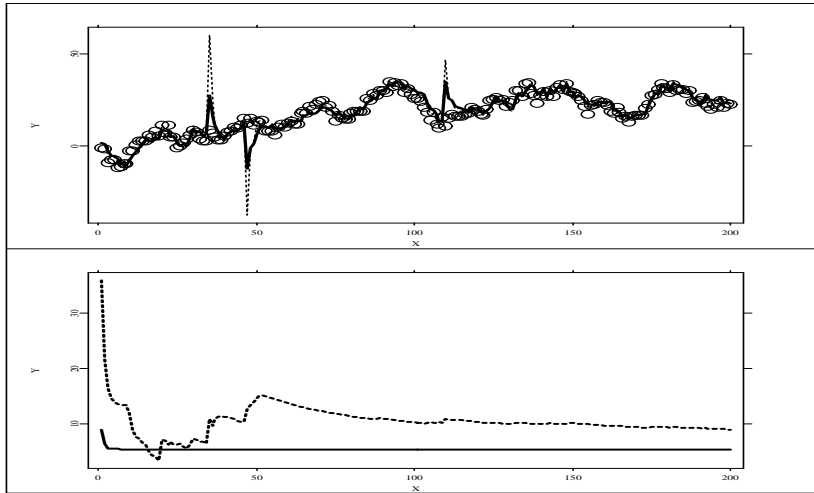


OBRÁZEK 1. Inovační funkce pro systém \mathcal{L}_2

3.4. **Příklad.** Ze systému

$$(10) \quad \begin{aligned} y_t &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}_t + v_t \\ \mathbf{x}_t &= \begin{bmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}_{t-1} + \mathbf{w}_t. \end{aligned}$$

bylo generováno 200 pozorování, přičemž náhodné složky v_t byly nahrazeny modelem (4) s $\sigma^2 = 4$, $\gamma = 0.01$ a $H \sim N(0, 10000)$. Adaptivní filtr identifikoval 3 odlehlá pozorování a zpracoval je pomocí systému \mathcal{L}_1 . Výsledky jsou zobrazeny na obrázku 2.



OBRÁZEK 2. Skutečná (kolečka), filtrovaná klasickým KF (přerušovaně) a adaptivním KF (plně) první složka stavového vektoru (horní panel) a odhadnutý rozptyl $P_{t|t,1}$ získaný klasickým KF se skutečnou hodnotou σ^2 (plně) a adaptivním KF (přerušovaně) (dolní panel)

LITERATURA

- [1] Anderson, B.D.O., Moore, J.B.: *Optimal Filtering*, Englewood Cliffs, Prentice-Hall 1979.
- [2] Box, G.E.P., Tiao, G.C.: *Bayesian Inference In Statistical Analysis*, Addison-Wesley, London 1973.
- [3] Franěk, P.: *Kalmanův filtr*, seminární práce KPMS MFF UK, Praha 1999.
- [4] Kalman, R.E.: *A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems*, Trans. Amer. Soc. Mech. Eng., J Basic Eng., no. 82, 35-45, 1960.
- [5] Kitagawa, G.: *Non-Gaussian State-Space Modelling of Nonstationary Time Series*, Journal of the American Statistical Association, vol. 82, no. 400, 1987.
- [6] Kitagawa, G.: *A Self-organising State-space Model*, J. Amer. Statist. Assoc., 93, 1203-1215, 1998.
- [7] Künsch, H.R.: *State Space and Hidden Markov Models*, In: *Complex Stochastic Systems*, vyjde.
- [8] Masreliez, C.J.: *Approximate Non-Gaussian Filtering with Linear State and Observation Relations*. IEEE Trans. on Automatic Control, vol. AC-20, 1975.
- [9] Masreliez, C.J., Martin, R.D.: *Robust Bayesian Estimation for the Linear Model and Robustifying the Kalman Filter*. IEEE Trans. on Automatic Control, vol. AC-22, 1977.
- [10] Meinhold, R.J., Singpurwalla, N.Z.: *Robustification of Kalman Filter*. Journal of the American Statistical Association, vol. 84, no. 406, 1989.
- [11] Ruckdeschel, P.: *Robust Kalman Filter*, In: *XploRe: Applications Guide*, Springer-Verlag, Berlin 2000.

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSKÁ 83, 186 75 PRAHA
E-MAIL: franek@karlin.mff.cuni.cz

BAYESOVSKÉ ODHADY V EXPONENCIÁLNÍM MODELU KONKURUJÍCÍCH SI RIZIK

MICHAL FRIESL

ABSTRACT. The paper deals with the competing risks model with independent exponential distributions of risks, conjugate priors are considered for parameters of the model.

Bayes estimators under quadratic loss are explored, the stress is put on Bayes risks (or their asymptotic expansions). The latter are used to measure sensitivity of the estimators to changes in the prior distribution.

РЕЗЮМЕ. Автор занимается моделью конкурирующих рисков с независимыми показательными распределениями, для параметров модели предполагает сопряженные априорные функции плотности.

Изучаются байесовские оценщики параметров при квадратичной функции потерь, прежде всего байесовские риски (или их асимптотические разложения). Показано их применение на анализ чувствительности оценщиков на изменения априорной плотности.

1. ÚVOD

Model konkurujících si rizik předpokládá, že sledování může být ukončeno z k příčin, které nastávají v časech

$$X_1, \dots, X_k,$$

což jsou nezávislé nezáporné náhodné veličiny pozorovatelné pouze hypoteticky. Ve skutečnosti známe jen dobu sledování a příčinu ukončení

$$(1.2) \quad W = \min X_j, \quad (I_1, \dots, I_k) = (I_{[W=X_1]}, \dots, I_{[W=X_k]}).$$

S takovým modelem se setkáme v řadě aplikací (zjišťování spolehlivosti součástí v zařízení, zkoumání doby života a příčin smrti, při $k = 2$ dostáváme model pro náhodné cenzorování, např. [2], [3] nebo [11]). Předpoklad nezávislosti dob X_1, \dots, X_k nelze vzhledem k neidentifikovatelnosti sdružené funkce $P[X_1 > x_1, \dots, X_k > x_k]$ z pozorování (1.2) testovat.

Jsou-li rozdělení veličin X_j spojitá, můžeme je, kromě distribučních funkcí F_j a hustot f_j , charakterizovat také intenzitami

$$\lambda_j(x) = \lim_{h \rightarrow 0} P[X_j \in (x, x+h) \mid X_j > x]/h, \quad x > 0,$$

tedy $\lambda_j(x) = f_j(x)/(1 - F_j(x))$, $F_j(x) = 1 - \exp(-\int_0^x \lambda_j(t) dt)$. Můžeme potom psát $P[I_j = 1 \mid W] = \lambda_j(W)/\sum_i \lambda_i(W)$, nezávislost W a (I_1, \dots, I_k) odpovídá modelu proporcionálních rizik.

V tomto příspěvku se budeme zabývat modelem s nezávislými exponenciálně rozdělenými dobami X_1, \dots, X_k . Vycházíme z autorovy dizertační práce [4], kde lze nalézt podrobnější důkazy, zobecnění pro doby s intenzitami $\lambda_j(x) = \theta_j \mu_j(x)$, $\mu_j(x)$

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary ; Secondary 61F15.

Klíčová slova. Náhodné cenzorování, Bayesovské odhady, Bayesovské riziko, exponenciální rozdělení.

známé, a aplikaci ve vícestavovém modelu. Modelem náhodného cenzorování se zabývá [7], odhadům v exponenciálním rozdělení se věnují [1] a [9].

2. MODEL

Předpokládáme náhodný výběr (X_1^i, \dots, X_k^i) , $i = 1, \dots, n$, k -tic nezávislých exponenciálně rozdělených náhodných veličin, $X_j^i \sim \text{Exp}(\lambda_j)$. Z každé k -tice je pozorováno jen její minimum, včetně jeho identifikace,

$$W^i = \min_{j=1, \dots, k} X_j^i, \quad (I_1^i, \dots, I_k^i) = (I_{[W^i=X_1^i]}^i, \dots, I_{[W^i=X_k^i]}^i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Označíme-li dále

$$W = \sum_{i=1}^n W^i \quad \text{a} \quad I_j = \sum_{i=1}^n I_j^i, \quad j = 1, \dots, k,$$

celkovou dobu pozorování a počet pozorování ukončený z příčiny j (veličina W má gama rozdělení a je nezávislá s multinomicky rozděleným vektorem (I_1, \dots, I_k)), věrohodnostní funkce pro $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ má tvar

$$(2.3) \quad L = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^k \left(\lambda_j e^{-\lambda_j W^i} \prod_{\ell \neq j} e^{-\lambda_\ell W^i} \right)^{I_j^i} = e^{-\sum \lambda_j W} \prod_{j=1}^k \lambda_j^{I_j}.$$

Při i -tém pozorování, ukončeném v čase W^i , právě jedna z příčin nastala jako první (ta pro níž je $I_j^i \neq 0$). O té tedy víme, že nastala v čase W^i , zatímco o ostatních máme jen informaci, že nastaly někdy později.

Kromě intenzit λ_j , $j = 1, \dots, k$, se budeme zajímat také o další parametry modelu: střední hodnoty a funkce spolehlivosti zkoumaných dob, parametr exponenciálního rozdělení W^1 (tj. celkovou intenzitu) a pravděpodobnosti výskytu jednotlivých příčin,

$$(2.4) \quad \theta_j = 1/\lambda_j, \quad R_j(t) = e^{-\lambda_j t}, \quad \lambda = \sum \lambda_j, \quad p_j = \lambda_j/\lambda,$$

případně o poměr $\gamma_j = (\lambda - \lambda_j)/\lambda_j = 1/p_j - 1$.

Pro parametry modelu budeme předpokládat konjugovaná apriorní rozdělení a budeme studovat jejich bayesovské odhady.

3. APRIORNÍ HUSTOTY A ODHADY

Začneme s přirozeným konjugovaným systémem $\{\pi_{a, q_1, \dots, q_k}; a > 0, q_j > 0\}$ pro věrohodnostní funkci (2.3) tvořeným hustotami

$$(3.1) \quad \pi_{a, q_1, \dots, q_k}(\lambda_1, \dots, \lambda_k) \propto \prod \lambda_j^{q_j-1} \exp(-a \sum \lambda_j), \quad \lambda_j > 0,$$

tedy nezávislými gama rozděleními $\lambda_j \sim G(a, q_j)$, $j = 1, \dots, k$. Ekvivalentně jsou nezávislé $\lambda \sim G(a, q)$ a (p_1, \dots, p_k) s Dirichletovým rozdělením $D(q_1, \dots, q_k)$, kde značíme (a to v celém příspěvku) $q = \sum q_j$. Rozdělení veličin z (2.4) jsou postupně inverzní a logaritmické gama, gama a beta, konkrétně $\theta_j \sim \text{IG}(a, q_j)$, $R_j(t) \sim \text{LG}(a, q_j)$, $\lambda \sim G(a, q)$ a $p_j \sim B(q_j, q - q_j)$. Parametr γ_j má beta rozdělení druhého řádu.

Aposteriorní rozdělení má hustotu (3.1) s parametry $a + W, q_1 + I_1, \dots, q_k + I_k$, ihned také dostáváme bayesovské odhady při kvadratické ztrátové funkci.

Tvrzení 3.1. Předpokládáme-li apriorní hustotu (3.1), bayesovské odhady při kvadratické ztrátové funkci jsou

$$\widehat{\lambda}_j = \frac{I_j + q_j}{W + a}, \quad \widehat{\theta}_j = \frac{W + a}{I_j + q_j - 1}, \quad \widehat{R}_j(t) = \left(1 + \frac{t}{W + a}\right)^{-(I_j + q_j)},$$

$$\widehat{\lambda} = \frac{n + q}{W + a}, \quad \widehat{p}_j = \frac{I_j + q_j}{n + q}, \quad \widehat{\gamma}_j = \frac{n + q - q_j - I_j}{I_j + q_j - 1},$$

pro $\widehat{\theta}_j$ a $\widehat{\gamma}_j$ požadujeme $I_j + q_j > 1$.

Důkaz. Bayesovské odhady při kvadratické ztrátové funkce jsou střední hodnoty aposteriorních rozdělení parametrů. \square

V dalším se uplatní, že při apriorní hustotě (3.1) jsou veličiny (I_1, \dots, I_k) a W nezávislé i nepodmíněně a že veličina $1/(W + a)$ má až na násobek beta rozdělení, $1/(W + a) \sim (1/a)B(q, n)$.

V hustotách (3.1) z přirozeného konjugovaného systému je parametr q apriorního gama rozdělení pro λ součtem parametrů Dirichletova rozdělení pro pravděpodobnosti (p_1, \dots, p_k) . Uvažme jako apriorní rozdělení pro λ obecněji $\lambda \sim G(a, q + r)$ nezávislé s $(p_1, \dots, p_k) \sim D(q_1, \dots, q_k)$, přičemž stále značíme $q = \sum_j q_j$, což znamená

$$(3.2) \quad \pi_{a, q_1, \dots, q_k, r}(\lambda_1, \dots, \lambda_k) \propto \prod \lambda_j^{q_j - 1} (\sum \lambda_j)^r \exp(-a \sum \lambda_j), \quad \lambda_j > 0.$$

Zde máme závislost mezi $\lambda_1, \dots, \lambda_k$. Systém $\{\pi_{a, q_1, \dots, q_k, r}; a > 0, q_j > 0, r + q > 0\}$ je konjugovaný s (2.3), aposteriorní rozdělení rozdělení má parametry $a + W, q_1 + I_1, \dots, q_k + I_k, r$.

Tvrzení 3.2. Předpokládáme-li apriorní hustotu (3.2), bayesovské odhady jsou

$$\widehat{\lambda} = \frac{n + q + r}{W + a}, \quad \widehat{p}_j = \frac{I_j + q_j}{n + q}, \quad \widehat{\gamma}_j = \frac{n + q - q_j - I_j}{I_j + q_j - 1},$$

$$\widehat{\lambda}_j = \frac{n + q + r}{n + q} \frac{I_j + q_j}{W + a}, \quad \widehat{\theta}_j = \frac{n + q - 1}{n + q + r - 1} \frac{W + a}{I_j + q_j - 1},$$

pro $\widehat{\gamma}_j$ za předpokladu $I_j + q_j > 1$ a pro $\widehat{\theta}_j$ v případě $n + q + r > 1$.

Důkaz. Při výpočtu aposteriorních středních hodnot využijeme $\widehat{\lambda} = \sum_j \widehat{\lambda}_j$, díky nezávislosti v apriorním (aposteriorním) rozdělení také $\widehat{\lambda}_j = \widehat{\lambda} \widehat{p}_j$ a $\widehat{\theta}_j = \widehat{(1/\lambda)} \widehat{(1/p_j)}$. \square

I v tomto případě známe rozdělení $1/(W + a) \sim (1/a)B(q + r, n)$.

Hodnoty $a = 0, q_j = 1/2, r = -k/2$ v (3.2) odpovídají Jeffreysově (nevlastní) apriorní hustotě.

Jiné zobecnění (3.1) počítá s různými hodnotami parametru a pro jednotlivá gama rozdělení veličin $\lambda_j, j = 1, \dots, k$. Vezmeme-li apriorní hustotu

$$(3.3) \quad \pi_{a_1, \dots, a_k, q_1, \dots, q_k}(\lambda_1, \dots, \lambda_k) \propto \prod \lambda_j^{q_j - 1} \exp(-\sum a_j \lambda_j), \quad \lambda_j > 0,$$

ze systému $\{\pi_{a_1, \dots, a_k, q_1, \dots, q_k}; a_j > 0, q_j > 0\}$, který je konjugovaný s (2.3), máme nezávislá $\lambda_j \sim G(a_j, q_j), j = 1, \dots, k$. Veličiny λ a (p_1, \dots, p_k) jsou závislé, $(\lambda | p_1, \dots, p_k) \sim G(\sum a_j p_j, q)$, navíc (p_1, \dots, p_k) nyní nemají Dirichletovo rozdělení, ale hustotu $\pi(p_1, \dots, p_k) \propto (\prod p_j^{q_j - 1}) / (\sum a_j p_j)^q$ na $\sum p_j = 1$.

Tvrzení 3.3. Předpokládáme-li apriorní hustotu (3.3), bayesovské odhady jsou

$$\begin{aligned}\widehat{\lambda}_j &= \frac{I_j + q_j}{W + a_j}, \quad \widehat{\theta}_j = \frac{W + a_j}{I_j + q_j - 1}, \quad \widehat{R}_j(t) = \left(1 + \frac{t}{W + a_j}\right)^{-(I_j + q_j)}, \\ \widehat{\lambda} &= \sum \frac{I_j + q_j}{W + a_j}, \quad \widehat{\gamma}_j = \frac{W + a_j}{I_j + q_j - 1} \sum_{\ell \neq j} \frac{I_\ell + q_\ell}{W + a_\ell},\end{aligned}$$

pro $\widehat{\theta}_j$ a $\widehat{\gamma}_j$ předpokládáme $I_j + q_j > 1$.

Důkaz. Tvrzení uvádí aposteriorní střední hodnoty parametrů, využíváme $\widehat{\lambda} = \sum \widehat{\lambda}_j$ a $\widehat{\gamma}_j = \widehat{\theta}_j \sum_{\ell \neq j} \widehat{\lambda}_\ell$. \square

Chybí nám odhad pro \widehat{p}_j , což je dáno složitým tvarem hustot v tomto případě. Pokud bychom se omezili na $k = 2$ (2 příčiny smrti), bylo by možno jej vyjádřit pomocí hypergeometrické funkce jako

$$\widehat{p}_1 = \frac{n + q}{I_1 + q_1} {}_2F_1(1, I_2 + q_2, n + q + 1, 1 - (W + a_1)/(W + a_2)),$$

kde

$${}_2F_1(a, b, c, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k (b)_k}{(c)_k} \frac{z^k}{k!}, \quad (x)_k = x(x+1)\dots(x+k-1).$$

Všechny tři uvedené apriorní hustoty spadají pod společné zobecnění představované hustotou

$$\pi_{a_1, \dots, a_k, q_1, \dots, q_k, r} \propto \prod \lambda_j^{q_j - 1} (\sum \lambda_j)^r \exp(-\sum a_j \lambda_j).$$

Při hledání odhadů odpovídajících této hustotě však docházíme k integrálům

$$I_{q_1, \dots, q_k, m} = \int \dots \int_{\substack{p_1, \dots, p_k \geq 0 \\ \sum p_j = 1}} \frac{\prod p_j^{q_j - 1}}{(\sum a_j p_j)^{q+m}},$$

jejichž vyjádření pro $m \neq 0$ představuje problém. S ním se lze vyrovnat v případě $m \in \mathbf{N}$, kdy je můžeme explicitně vyjádřit, v jiném speciálním případě, $k = 2$, opět docházíme k ${}_2F_1$.

4. KONVERGENCE

Zákon velkých čísel a centrální limitní věta pro posloupnosti nezávislých a stejně rozdělených veličin W^1, W^2, \dots a $(I_1^1, \dots, I_k^1), (I_1^2, \dots, I_k^2), \dots$ poskytují při rostoucím počtu pozorování $n \rightarrow \infty$ konvergenci skoro jistě a v distribuci také pro naše odhady.

Tvrzení 4.1. Pro odhady z tvrzení 3.1, 3.2, 3.3 platí

$$\begin{aligned}\sqrt{n}(\widehat{\lambda}_j - \lambda_j) &\xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathbf{N}(0, \lambda_j^2/p_j), \quad \sqrt{n}(\widehat{\theta}_j - \theta_j) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathbf{N}(0, \theta_j^2/p_j), \\ \sqrt{n}(\widehat{R}_j(t) - R_j(t)) &\xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathbf{N}(0, t^2 e^{-2\lambda_j t} \lambda_j^2/p_j), \quad \sqrt{n}(\widehat{\lambda} - \lambda) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathbf{N}(0, \lambda^2), \\ \sqrt{n}(\widehat{\gamma}_j - \gamma_j) &\xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathbf{N}(0, \gamma_j(1 + \gamma_j^2)), \quad \sqrt{n}(\widehat{p}_j - p_j) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} \mathbf{N}(0, p_j(1 - p_j)).\end{aligned}$$

Důkaz. Např. pro $\widehat{\lambda}_j$ z Tvzení 3.1 je asymptoticky pro $n \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \sqrt{n}(\widehat{\lambda}_j - \lambda_j) &= \sqrt{n}\left(\frac{I_j + q_j}{W + a} - \lambda_j\right) \\ &\sim \frac{1}{W/n} \left[\sqrt{n}\left(\frac{I_j}{n} - p_j\right) - \lambda_j \sqrt{n}\left(\frac{W}{n} - \frac{1}{\lambda}\right) \right] \sim \lambda N(0, p_j). \end{aligned}$$

Podobně naložíme s ostatními odhady, přičemž tvar $\widehat{R}_j(t)$ vyžaduje jemnější zacházení. \square

Uvažujeme-li o odhadu funkce spolehlivosti $\widehat{R}_j(t) = \left(\frac{W+a_j}{W+a_j+t}\right)^{I_j+q_j}$ jako o náhodném procesu v $C([0, \infty])$, můžeme ukázat následující slabou konvergenci.

Tvrzení 4.2. Pro odhad $\widehat{R}_j(t) = \left(\frac{W+a_j}{W+a_j+t}\right)^{I_j+q_j}$ funkce spolehlivosti $R_j(t) = e^{-\lambda_j t}$, $t > 0$, platí

$$\sqrt{n}(\widehat{R}_j - R_j) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} Z \quad \text{na } C([0, \infty]),$$

kde Z je Gaussovský proces s $EZ(t) = 0$ a $\text{cov}(Z(s), Z(t)) = ste^{-\lambda_j(s+t)}\lambda_j^2/p_j$.

Důkaz. Uplatníme stejné argumenty jako [6]. Nejdříve se Taylorovými rozvoji dopracujeme k procesu $e^{-\lambda_j t} \sqrt{n}\left(\frac{I_j+q_j}{W+a_j}t - \lambda_j t\right)$. Ten se od $\sqrt{n}(\widehat{R}_j - R_j)$ liší o člen, který podle pravděpodobnosti konverguje k 0, a jeho konečněrozměrná rozdělení konvergují k odpovídajícím rozdělením Z . Že Z je jeho limitou na $C([0, \infty])$, plyne po ověření podmínek těsnosti. \square

5. BAYESOVSKÁ RIZIKA

Při kvadratické ztrátové funkci je bayesovským rizikem bayesovského odhadu střední hodnota aposteriorního rozptylu odhadované veličiny. Aposteriorní rozptyl v našem případě známe, zbývá tedy spočítat střední hodnotu. Pro konkrétnost počítáme s přirozenou konjugovanou apriorní hustotou (3.1) (podobným způsobem bychom postupovali při (3.2), (3.3), či v případě dalších odhadů, viz [4]).

Pro některé z odhadů z Tvzení 3.1 umíme bayesovské riziko explicitně spočítat, jako příklad zvolme $\widehat{\lambda}_j$.

Tvrzení 5.1. Při apriorní hustotě (3.1) je bayesovské riziko bayesovského odhadu

$$(5.1) \quad \text{BR} \widehat{\lambda}_j = \frac{1}{n+q+1} \frac{q_j(q+1)}{a^2} = \frac{q_j(q+1)}{a^2} \frac{1}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

při $n \rightarrow \infty$.

Důkaz. Využijeme (nepodmíněné) nezávislosti I_j a W , znalosti rozdělení $1/(W+a) \sim (1/a)B(q, n)$ a podmíněného $(I_j | p_j) \sim \text{Bi}(n, p_j)$,

$$\text{BR} \widehat{\lambda}_j = E(I_j + q_j)(W + a)^{-2} = \left(n \frac{q_j}{q} + q_j\right) \frac{q(q+1)}{a^2(n+q)(n+q+1)}.$$

\square

Pro jiné odhady však nejsme schopni bayesovské riziko explicitně vyjádřit, a proto se uchýlíme k jeho asymptotickému rozvoji pro $n \rightarrow \infty$. Máme vyjádřit rozvoje středních hodnot funkcí veličin W/n a I_j/n , když W a I_j jsou součtem podmíněně nezávislých a stejně rozdělených veličin. Právě kvůli podmíněné nezávislosti je třeba postupovat opatrně. Naše rozvoje využívají tvrzení z [5], založená na rozvoji z [10], viz Dodatek.

Jako příklad uveďme riziko odhadu $\widehat{\theta}_j$.

Tvrzení 5.2. Při apriorní hustotě (3.1) je bayesovské riziko bayesovského odhadu

$$\text{BR} \widehat{\theta}_j = \frac{a^2(q-3)}{(q_j-1)(q_j-2)(q_j-3)} \frac{1}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right),$$

za předpokladu $q_j > 7$.

Důkaz. Pro θ_j s aposteriorním inverzním gama rozdělením máme

$$\text{var}(\theta_j | W, I) = \frac{(W+a)^2}{(I_j+q_j-1)^2(I_j+q_j-2)},$$

když $I_j + q_j > 2$. Využijeme opět nezávislosti W a I_j a píšeme

$$\text{BR} \widehat{\theta}_j = \frac{1}{n^3} \text{E}(W+a)^2 \text{E} g_n(I_j/n),$$

kde funkce g_n je dána vztahem

$$g_n(x) = (x + (q_j - 1)/n)^{-2} (x + (q_j - 2)/n)^{-1}, \quad i \in [0, 1].$$

První ze středních hodnot nepůsobí vzhledem k příhodnému rozdělení $W + a$ problémy, ve druhé rozvíjíme při daném p_j kolem $\text{E}(I_j/n | p_j) = p_j$. V Tvrzení 7.1 počítáme s $q = 1$, $k = 3$, máme $g_n(i) \leq \text{const} \cdot (q_j - 2)^{-3} n^3$. Vidíme, že $g_n(p_j)$, $g'_n(p_j)$ a g''_n na $(p_j/2, 3p_j/2)$ jsou pro všechna n omezené násobkem p_j^{-3} , resp. p_j^{-4} a p_j^{-5} . Při $q_j > 7$ jsou střední hodnoty $\text{E} p_j^i$ pro $i = -7, \dots, 8$, $\text{E} p_j^{-3} p_j^i$ pro $i = -1, 0$, $\text{E} p_j^{-4} p_j^i$ pro $i = 0, 1$ a $\text{E} p_j^{-5} p_j^i$ pro $i = 1, 2$ konečné a můžeme psát $\text{E} g_n(I_j/n) = \text{E} g_n(p_j) + O(1/n)$, což vede k výsledku

$$\begin{aligned} \text{BR} \widehat{\theta}_j &= \frac{1}{n} \text{E} \lambda^{-2} \text{E} p_j^{-3} + O(1/n^2) \\ &= \frac{1}{n} \frac{a^2}{(q-1)(q-2)} \frac{(q-1)(q-2)(q-3)}{(q_j-1)(q_j-2)(q_j-3)} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \end{aligned}$$

□

Ještě komplikovanější je případ rizika odhadu $\widehat{R}_j(t)$, kde je třeba použít dalších Taylorových rozvoů. Výsledkem je, že pro $q > 6$ je možno psát

$$\begin{aligned} \text{BR} \widehat{R}_j(t) &= \text{E} \left[\left(1 + \frac{2t}{W+a}\right)^{-(I_j+q_j)} - \left(1 + \frac{t}{W+a}\right)^{-2(I_j+q_j)} \right] \\ &= \text{E} \left(t^2 e^{-2t(I_j+q_j)/(W+a)} \frac{I_j+q_j}{(W+a)^2} \right) + O(1/n^2) \\ &= \frac{1}{n} t^2 \text{E} e^{-2t\lambda_j} p_j \lambda^2 + O(1/n^2), \end{aligned}$$

podrobnosti a rizika dalších odhadů v [4].

6. CITLIVOST

Nakonec se podíváme, jak je bayesovské riziko citlivé na nepřesnost předpokladu o apriorní hustotě, jako příklad poslouží odhad parametru λ_j . Použijeme-li místo bayesovského odhadu $\widehat{\lambda}_j$ jiný odhad $\widetilde{\lambda}_j$, je

$$\text{BR} \widetilde{\lambda}_j = \text{E}(\lambda_j - \widetilde{\lambda}_j)^2 = \text{BR} \widehat{\lambda}_j + \text{E}(\widehat{\lambda}_j - \widetilde{\lambda}_j)^2.$$

Mají-li rizika těchto odhadů rozvoje pro $n \rightarrow \infty$

$$(6.2) \quad \text{BR} \widehat{\lambda}_j = \frac{c}{n} + \frac{a}{n^2} + o\left(\frac{1}{n^2}\right), \quad \text{BR} \widetilde{\lambda}_j = \frac{c}{n} + \frac{b}{n^2} + o\left(\frac{1}{n^2}\right),$$

definujeme (dle [8]) asymptotickou deficienci $\tilde{\lambda}_j$ vzhledem k $\hat{\lambda}_j$ jako $(b - a)/c$.

Příkladem jiného odhadu může být takové $\tilde{\lambda}_j$, které bychom dostali jako bayesovský odhad při (nesprávném) předpokladu, že apriorní hustotou je (3.1) s parametry $\tilde{a}, \tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_k$.

Tvrzení 6.1. Deficience odhadu $\tilde{\lambda}_j = (I_j + \tilde{q}_j)/(W + \tilde{a})$ vzhledem k $\hat{\lambda}_j$ je při apriorní hustotě (3.1)

$$\frac{q}{q_j}(q_j - \tilde{q}_j)^2 - 2\frac{q+2}{a}(q_j - \tilde{q}_j)(a - \tilde{a}) + \frac{1}{a^2}\frac{q_j}{q+1}(q+2)(q+3)(a - \tilde{a})^2.$$

Důkaz. Rozdíl koeficientů $b - a$ v (6.2) získáme z rozvoje

$$\begin{aligned} \text{BR } \tilde{\lambda}_j - \text{BR } \hat{\lambda}_j &= \text{E}(\hat{\lambda}_j - \tilde{\lambda}_j)^2 = \text{E}\left(\frac{W(q_j - \tilde{q}_j) - I_j(a - \tilde{a}) + q_j\tilde{a} - \tilde{q}_j a}{(W + a)(W + \tilde{a})}\right)^2 \\ &= \text{E}\left(\frac{(W + a)(q_j - \tilde{q}_j) - I_j(a - \tilde{a})}{(W + a)^2}\right)^2 + O(1/n^3) \\ &= \frac{1}{n^2} \text{E}[(q_j - \tilde{q}_j)^2 \lambda^2 - 2(q_j - \tilde{q}_j)(a - \tilde{a})p_j \lambda^3 + (a - \tilde{a})^2 p_j^2 \lambda^4] + O(1/n^3), \end{aligned}$$

kde jsme nakonec postupovali podobně jako v důkazu Tvrzení 5.1. Koeficient c čteme v (5.1). \square

7. DODATEK

V důkazu Tvrzení 5.2 (i dále) bylo pro asymptotické rozvoje středních hodnot použito tvrzení z [5], které se hodí pro náhodné veličiny s momenty omezenými mocninami střední hodnoty.

Tvrzení 7.1. Necht' náhodné veličiny Y_1, Y_2, \dots jsou při daném θ nezávislé a stejně rozdělené, veličiny $X_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i$, $n = 1, 2, \dots$, mají hodnoty v intervalu $A \subset \mathbf{R}$ a $\mu_\theta = \text{E}[Y_1 | \theta] \in A$ je kladné. Necht' funkce $g_n: A \rightarrow \mathbf{R}$, $n \in \mathbf{N}$, mají spojité derivace řádu $(q+1)$ na $M_\theta = (\mu_\theta/2, 3\mu_\theta/2) \cap A$. Necht' $k \geq 0$ je celé a pro momenty Y_1 platí $\text{E}[|Y_1^j| | \theta] \leq \sum_{i=1}^j c_i \mu_\theta^i$ s nějakými konstantami $c_1, \dots, c_j > 0$, $j = 1, \dots, q + \delta + 1 + 2k$ (kde $\delta = 0$ pro q liché a $\delta = 1$ pro q sudé). Jestliže existuje $0 \leq u \leq k$ a dále pro každé θ konstanty $a(\theta), a_0(\theta), a_1(\theta), \dots, a_{q+1}(\theta) \geq 0$ tak, že pro všechna $n \in \mathbf{N}$

$$|g_n^{(j)}(\mu_\theta)| \leq a_j(\theta), \quad j = 0, \dots, q,$$

$$|g_n^{(q+1)}(x)| \leq a_{q+1}(\theta) \quad \text{na } M_\theta, \quad |g_n(x)| \leq a(\theta)|x|^u n^k \quad \text{na } M_\theta^c = A \setminus M_\theta,$$

a jsou-li střední hodnoty $\text{E} a_\theta \mu_\theta^i$ pro $i = -(q + \delta + 2k), \dots, q + \delta + 1 + 2k$ a $\text{E} a_{j\theta} \mu_\theta^i$ pro $i = j - q - \delta, \dots, j + \delta$ ($j = 0, \dots, q + 1$) konečné, pak

$$\text{E} g_n(X_n) = \text{E} \sum_{j=0}^q \frac{g_n^{(j)}(\mu_\theta)}{j!} \text{E}[(X_n - \mu_\theta)^j | \theta] + O(1/n^{(q+1)/2}) \quad \text{při } n \rightarrow \infty.$$

Důkaz. Viz [5], Proposition 2.3. \square

LITERATURA

1. J. ANTOCH, M. BRZEZINA A A. LINKA, *Asymptotic approximation of Bayes risk of estimators of reliability for exponentially distributed data*, Statist. Decisions **15** (1997), no. 3, 241–253.
2. M. J. CROWDER, A. C. KIMBER, R. L. SMITH, AND T. J. SWEETING, *Statistical analysis of reliability data*, Chapman & Hall, London, 1991.
3. H. A. DAVID AND M. L. MOESCHBERGER, *The theory of competing risks*, Griffin, London, 1978.
4. M. FRIESL, *Bayesian estimation in exponential competing risks and related models, with applications to insurance*, Dizertační práce, MFF UK, Praha, 2000.

5. M. FRIESL, *An asymptotic expansion for expectations of functions of sums via conditional moments*, to appear in Proceedings. University of West Bohemia, vol. 1, ZČU, Plzeň, 2000.
6. M. FRIESL, *Weak asymptotics of Bayes estimator of the reliability function in the Koziol-Green model*, to appear in Statist. Decisions **19** (2001).
7. M. FRIESL AND J. HURT, *On Bayesian estimation in an exponential distribution under random censorship*, submitted.
8. J. L. HODGES, JR. AND E. L. LEHMAN, *Deficiency*, Ann. Math. Statist. **41** (1970), 783–801.
9. J. HURT, *On estimation of reliability in the exponential case*, Apl. Mat. **21** (1976), no. 4, 263–272.
10. J. HURT, *Asymptotic expansions for moments of functions of stochastic processes and their applications*, Statist. Decisions **4** (1986), no. 2–3, 251–271.
11. H. F. MARTZ AND R. A. WALLER, *Bayesian Reliability Analysis*, Wiley, New York, 1982.

ZČU, FAV, KMA, POŠTOVNÍ PŘÍHRÁDKA 314, 306 14 PLZEŇ
E-MAIL: friesl@kma.zcu.cz

IMPLICITNÍ DEFINICE PODMÍNĚNÉ PRAVDĚPODOBNOСТИ EXISTENCE A NĚKTERÉ SPECIÁLNÍ PŘÍPADY

DANIEL HLUBINKA

ABSTRAKT. In the paper we consider implicit definitions of probability measures. The definitions depend on an initial condition and hence can be understood as definitions of conditional probability measures given the initial value. The natural question is whether it is possible to construct two dimensional distribution such that its first marginal is some distribution on initial conditions and conditional distributions are solutions of given implicit problem for the respective initial value. The sufficient conditions for the existence of solution are given. As a special case we study problem with convex set of admissible solutions and extremal solutions.

Резюме: В статье изучается неявное определение вероятностных мер. эти определения зависят от начального условия и для того возможно рассматривать их как определения условных вероятностных мер при данном начальном значении. Натуральной является проблема существования двухмерного распределения вероятностей такого, что его первая маргинала является распределением начальных значений и условные распределения являются решением данных неявных определений для соответствующих начальных значений. Достаточное условие для существования решения показано. Мы изучаем специальную проблему выпуклых множеств допускаемых решений и их крайние точки.

ÚVOD

Tato práce vychází ze zkoumání existence a konstrukce sdruženého rozdělení náhodného vektoru, mají-li jeho podmíněná rozdělení splňovat předem dané podmínky. Hledáme-li odpověď na tuto otázku s požadavkem, aby podmíněná rozdělení hledaného vektoru měla dané barycentrum, dostáváme se k implicitně zadané úloze. Implicitně zadané úlohy pak lze zobecnit a získat tak velmi širokou třídu problémů. V článku se budeme zabývat případy existence a konstrukce implicitně definované podmíněné struktury náhodného vektoru, zejména ve speciálním případě afinní prováděcí funkce. Dále věnujeme pozornost vlastnostem množiny řešení a existenci extrémálního řešení předloženého problému.

Připomeňme, že implicitně zadaná množina měř

$$(1) \quad \mathcal{P} = \{\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}) : b(\mu) = f\}$$

pro nějaký polský prostor \mathbb{Y} , borelovské zobrazení b mezi polskými prostory $\mathcal{M}_1(\mathbb{Y})$ a \mathbb{Z} a $f \in \mathbb{Z}$ tvoří borelovskou podmnožinu pravděpodobnostních měř.

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 28A35; Secondary 28B20, 46A55, 60A10, 60B05.

Klíčová slova. Markovská jádra, podmíněná struktura náhodného vektoru, momentový problém, konvexní množiny, extrémální body, nosič míry.

Tato práce vznikla s podporou výzkumného záměru MŠMT ČR MSM 113200008 a postdoktorandského grantu GAČR 201/99/D059 (pod projektem KONTAKT ME335) .

Rozšíříme implicitní definici množiny měr přidáním závislosti na počáteční podmínce do tvaru

$$(2) \quad \mathcal{P}_x := \{\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}) : b(x, \mu) = f(x)\},$$

$$(3) \quad \mathcal{P} := \{(x, \mu) : \exists \mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}), b(x, \mu) = f(x)\},$$

kde $x \in \mathbb{X}$, nějaký polský prostor, b a f zobrazení do polského prostoru \mathbb{Z} . Je zřejmé, že pro b borelovské zobrazení v μ je pro libovolnou deterministickou počáteční podmínku x množina řešení \mathcal{P}_x borelovská. Tyto množiny lze nahlížet jako množiny přípustných podmíněných rozdělání za podmínky x . Poznamenejme, že měřitelnost množiny \mathcal{P} není vůbec zřejmá, ale jak uvidíme je velmi podstatná.

V teorii pravděpodobnosti je obvyklé v takových případech hledat možnost přechodu od deterministické počáteční podmínky ke stochastické. Tedy k míře $\lambda \in \mathcal{M}_1(\mathbb{X})$. Potom zkoumáme existenci pravděpodobnostní míry $P^\lambda \in \mathcal{M}_1(\mathbb{X} \times \mathbb{Y})$ takové, že její marginální rozdělání na \mathbb{X} je λ a podmíněná rozdělání na \mathbb{Y} při daném x jsou v množině přípustných řešení \mathcal{P}_x skoro jistě $[\lambda]$.

Tím navazujeme na studie [10] a [11], ve kterých byla množina \mathcal{P} zadána explicitně pomocí řezů \mathcal{P}_x . Tak byla zkoumána existence náhodného \mathcal{P} vektoru a jeho vlastností. Nyní máme množiny \mathcal{P}_x zadány implicitně pomocí *prováděcího zobrazení* b , které pro pevné x převádí pravděpodobnostní míry na hodnoty v prostoru \mathbb{Z} , a *řídícího zobrazení* f .

V první části si ukážeme, jak takové řešení konstruovat, jaké podmínky jsou postačující k existenci řešení a nastíníme základní matematické techniky použité v této souvislosti, zejména teorii multifunkcí a selekcí. V další části zobecníme poněkud zadání, abychom mohli pokrýt více úloh. V poslední části rozvedeme diskusi o existenci řešení v případě afinity zobrazení $b(\cdot, \mu)$. Všimneme si také extrémálních řešení, které v takovém případě mohou existovat, někdy i nutně, a umožní dále rozvíjet předložený problém například pomocí Choquetovy teorie.

1. ŘEŠENÍ (b, f) ÚLOHY A JEHO EXISTENCE

V celé práci budeme uvažovat trojici lokálně konvexních polských (separabilních metrizabletných úplných) prostorů $\mathbb{X}, \mathbb{Y}, \mathbb{Z}$. Označme standardně $\mathcal{G}, \mathcal{F}, \mathcal{K}, \mathcal{B}$ a \mathcal{U} systémy otevřených, uzavřených, kompaktních, borelovských a universálně měřitelných množin. Připomeňme, že prostor \mathcal{M}_1 pravděpodobnostních měr na polském prostoru je opět lokálně konvexní polský prostor, a že každá borelovská pravděpodobnostní míra na separabilním metrickém prostoru je regulární ve smyslu $\mu(B) = \inf\{\mu(G), B \subset G \in \mathcal{G}\}, B \in \mathcal{B}$.

Jak jsme již uvedli, hledáme pravděpodobnostní míru P^λ na součinném prostoru $\mathbb{X} \times \mathbb{Y}$. Tato míra by měla být rozdělání náhodného vektoru (ξ, η) tak, aby $\mathcal{L}(\xi) = \lambda$ a $\mathcal{L}(\eta)|_{\xi = x} \in \mathcal{P}_x$ s.j. $[\lambda]$, kde \mathcal{P}_x je množina přípustných řešení dané (b, f) úlohy, která je zadaná implicitně podmínkami (2). Jinými slovy marginální rozdělání ξ je předepsané a podmíněná rozdělání η při $\xi = x$ řeší zadaný problém s počáteční podmínkou x . Nazvěme takovou dvojici (b, f) vektorem.

Řešením uvedené úlohy je pravděpodobnostní míra ve tvaru

$$(4) \quad P^\lambda(B \times C) = \int_B P^x(C) \lambda(dx), B \in \mathcal{B}(\mathbb{X}), C \in \mathcal{B}(\mathbb{Y}), P^x \in \mathcal{P}_x.$$

Aby tato míra byla dobře definována, musíme mít zaručenu universální měřitelnost zobrazení $K : x \mapsto P^x$. Tím ovšem říkáme, že hledáme *universálně měřitelné markovské jádro* (UMK) řešící (b, f) úlohu. Takovéto jádro tvoří jakákoliv *měřitelná selekce* z mnohoznačného zobrazení $x \mapsto \mathcal{P}_x$. Jest tedy možné hovořit o markovském

jádru řešícím (b, f) úlohu, (b, f) selekci či náhodným (b, f) vektorem a přitom mít na mysli stále jediné—pravděpodobnostní míru P^λ . V dalším textu proto nebudeme zvláště rozlišovat mezi těmito pojmy.

1.1. Mnohoznačná zobrazení a selekce. Připomeňme si nyní základní pojmy z teorie mnohoznačných zobrazení. Zobrazení $\Psi : \mathbb{X} \rightarrow 2^{\mathbb{Y}}$ se nazývá *mnohoznačné zobrazení*. Je-li navíc $\Psi(x) \neq \emptyset$ pro každé x , nazýváme toto zobrazení *multifunkcí*. Multifunkce s uzavřenými obrazy se nazývá *korespondence*.

Jelikož budeme pracovat pouze s měřitelností mnohoznačného zobrazení, nemusíme dále rozlišovat mezi multifunkcí a mnohoznačným rozdělením. Omezíme-li se u mnohoznačného zobrazení na množinu $D_\Psi = \{x : \Psi(x) \neq \emptyset\}$, dostáváme multifunkci. Měřitelnost takové multifunkce posuzujeme vzhledem k D_Ψ , nikoliv vzhledem k celému prostoru \mathbb{X} .

Selekci multifunkce rozumíme takové zobrazení $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{Y}$, že $f(x) \in \Psi(x)$ pro všechna x . Poznamenejme zde, že jde o stejný problém jako vybrat pro množinu $A \in \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$ zobrazení $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{Y}$ takové, že graf f leží v A . Zde pochopitelně ztotožňujeme A s grafem Ψ . Uveďme si postačující podmínku pro existenci měřitelné selekce, tedy i postačující podmínku pro existenci řešení (b, f) úlohy.

Připomeňme, že multifunkce je

- (1) *B-měřitelná*, když $\{x : \Psi(x) \cap G \neq \emptyset\} \in \mathcal{B}(\mathbb{X})$ pro $G \in \mathcal{G}(\mathbb{Y})$ a
- (2) *U-měřitelná*, když $\{x : \Psi(x) \cap G \neq \emptyset\} \in \mathcal{U}(\mathbb{X})$ pro $G \in \mathcal{G}(\mathbb{Y})$.

Z teorie multifunkcí vyplývá, že pro B- i U-měřitelnou korespondenci existuje univerzálně měřitelná selekce. Tato problematika je popsána v monografiích [1], [9], důležitým nástrojem jsou zde věty typu „*Cross-sections*“, například v [2] 8.5.

1.2. Existence implicitního řešení. V této části se budeme zabývat podmínkami kladenými na zobrazení b a f , které se ukáží jako postačující k existenci řešení (b, f) úlohy. Ukážeme si, že místo ověřování měřitelnosti multifunkce, případně jejího grafu, postačí ověřit měřitelnost prováděcího a řídicího zobrazení. Následující věta je dokázána v [5].

Věta 1. *Mějme zadanou (b, f) úlohu. Obě následující podmínky jsou postačující pro existenci měřitelné (b, f) selekce.*

- (1) *Zobrazení $b(x, \mu)$ je borelovské a v proměnné μ navíc spojitě, zobrazení f je universálně měřitelné.*
- (2) *Zobrazení b i f jsou borelovská.*

Poznámka 2. *Předchozí věta netvrdí nic o neprázdnosti množiny \mathcal{P}_x . Musíme ji číst s tímto na paměti. Přesněji říká, že pro libovolnou míru $\lambda \in \mathcal{M}_1(\mathbb{X})$ takovou, že $\lambda^*(\mathbb{C}D) = 0$, kde*

$$D := \{x \in \mathbb{X} : \exists \mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}), b(x, \mu) = f(x)\},$$

existuje P^λ míra řešící danou (b, f) úlohu zkonstruovaná předpisem (4).

V této chvíli nám nezbyvá nic jiného než existenci neprázdné množiny D předpokládat. Míru $\lambda \in \mathcal{M}_1(\mathbb{X})$, $\lambda^*(\mathbb{C}D) = 0$ nazveme *přípustnou počáteční podmínkou*.

1.3. První příklad. Základní příklad je zároveň jedním z nejuniversálnějších nástrojů teorie pravděpodobnosti. Jde o *momentovou úlohu*. Připomeňme, že obyčejná momentová úloha je definována pomocí zobrazení $g_i(y)$ a hodnot $f_i, i \in I$ předpisem

$$(5) \quad \int_{\mathbb{Y}} g_i(y) \mu(dy) = f_i, \text{ tedy } \mathcal{P} = \{\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}) : E_\mu[g_i(\eta)] = f_i\}.$$

Věta 1 nyní snadno vede k možnosti tento předpis zobecnit na

$$(6) \quad \int_{\mathbb{Y}} g_i(x, y) \mu(dy) = f_i(x), \text{ tedy } \mathcal{P}_x = \{\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}) : E_\mu[g_i(x, \eta) | \xi = x] = f_i(x)\}$$

a získat dvourozměrný vektor (ξ, η) , jehož první složka má předepsané marginální rozdělení a druhá složka podmíněně řeší libovolný počet momentových úloh. Postačující podmínkou je spočetnost I a borelovská měřitelnost zobrazení g_i a f_i . Pokud bychom chtěli slevit z požadavků na f_i směrem k universální měřitelnosti, požadavky na g_i se zpřísní. Kromě borelovské měřitelnosti bychom museli přidat omezenost a spojitost zobrazení $g_i(\cdot, y)$ v proměnné y .

Speciálním případem je zde základní momentový problém, kdy g_i, f_i jsou reálné funkce, $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$ a úloha zní

$$g_i(x, y) = y^i, \text{ tedy } E_\mu[\eta^i | \xi = x] = f_i(x).$$

2. ZOBECNĚNÍ (b, f) ÚLOHY

Zadání (b, f) úlohy ve tvaru (2) může někdy být příliš svazující kvůli požadavku, že jediná přípustná hodnota výsledku prováděcího zobrazení $b(\cdot, \mu)$ je dána řídicím zobrazením $f(\cdot)$. Zde však můžeme poněkud slevit a požadovat splnění obecnější (b, F) podmínky, která definuje množiny přípustných řešení

$$(7) \quad \mathcal{P}_x := \{\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}) : b(x, \mu) \in F(x)\},$$

kde F je nějaká multifunkce.

Základním existenčním výsledkem je nyní

Věta 3. *Mějme dánu (b, F) úlohu. Pak měřitelná (b, F) selekce existuje, jestliže je splněna jedna z těchto podmínek.*

- (1) *Zobrazení b je borelovské a v proměnné μ navíc spojitě, korespondence F je U -měřitelná.*
- (2) *Zobrazení b je borelovské a F je B -měřitelná korespondence.*

Všimněme si, že poznámka uvedená za větou 1 zůstává v platnosti i nyní.

Příkladem takto rozšířené úlohy je zobecněný momentový problém, kdy například pro reálné prostory a funkce g_i, f_i definujeme $F_i(x) = (-\infty, f_i(x)]$ a hledáme řešení úlohy pro

$$g_i(x, y) = y^i, \text{ tedy } E_\mu[\eta^i | \xi = x] \leq f_i(x).$$

3. AFINITA PROVÁDĚCÍHO ZOBRAZENÍ

V následující části budeme pracovat s jednodušší (b, f) úlohou. Většina uvedených výsledků se snadno rozšiřuje i pro (b, F) úlohy a proto ponecháme tyto případy na čtenáři.

Na příkladu momentové úlohy si povšimněme, že v mnoha významných úlohách je zobrazení $b(x, \mu)$ afinní v μ . Připomeňme, že afinní je zobrazení tehdy, je-li zároveň konvexní i konkávní, neboli

$$b(x, a\mu + (1-a)\nu) = ab(x, \mu) + (1-a)b(x, \nu), \forall a \in (0, 1).$$

V takovém případě není obtížné si uvědomit, že množiny \mathcal{P}_x přípustných řešení (b, f) úlohy při počáteční podmínce x jsou konvexní.

3.1. Konvexní množiny. Konvexní množiny mají v matematice významné místo. Připomeňme, že množina A je konvexní, jestliže

$$(8) \quad x, y \in A \Rightarrow ax + (1 - a)y \in A, \forall a \in (0, 1).$$

Extremálním (též krajním) bodem konvexní množiny A rozumíme takový bod x , že množina $A \setminus \{x\}$ je opět konvexní. Jinými slovy je to též takový bod $x \in A$, že neexistují dva různé body v A , jejichž konvexní kombinace je rovna x . Množina extrémálních bodů se obvykle značí $\text{ex}(A)$. Je zřejmé, že některé konvexní množiny nemusí mít žádné extrémální body, jako je tomu například u otevřené jednotkové koule v \mathbb{R}^3 .

Označme si $\text{co}A$ *konvexní obal* množiny A , tedy nejmenší konvexní množinu obsahující A . Je zřejmé, že

$$(9) \quad \text{co ex}A \subset \text{co}A = A$$

pro každou konvexní množinu A . Nejmenší uzavřenou konvexní množinu obsahující A nazveme *konvexním uzávěrem* A a budeme ji značit $\overline{\text{co}A}$. Pro uzavřené konvexní množiny zřejmě platí

$$(10) \quad \overline{\text{co ex}A} \subset \overline{\text{co}A} = \overline{\text{co}A} = A,$$

kde rovnost nastává pro konvexní kompaktní množiny v metrickém prostoru. Rovnost $\overline{\text{co}A} = \overline{\text{co}A}$ je obecně vlastností konvexního uzávěru.

Hezkým příkladem konvexního uzávěru je prostor pravděpodobnostních měr na (zde stačí úplně regulárním) prostoru \mathbb{X} , kde platí

$$(11) \quad \mathcal{M}_1(\mathbb{X}) = \overline{\text{co}}\{\delta_x, x \in \mathbb{X}\}, \delta_x(B) = I_B(x) \text{ (Diracova míra)}.$$

Obecně jsou Diracovy míry extrémálními body prostoru pravděpodobnostních měr na jakémkoliv prostoru, tedy speciálně pro polské prostory platí

$$(12) \quad \mathcal{M}_1(\mathbb{X}) = \overline{\text{co ex}}\mathcal{M}_1(\mathbb{X}).$$

O konvexních množinách a topologických vlastnostech pravděpodobnostních měr se lze dozvědět více například v [7] a [12].

3.2. Obor hodnot prováděcí funkce. Předchozí úvahy nás mohou dovést k vytvoření postačujících podmínek pro existenci neprázdné množiny \mathcal{P}_x zdefinované v (2).

Nejprve si všimněme, že množina

$$(13) \quad B(x) = \{b(x, \mu), \mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y})\}$$

je konvexní, což okamžitě plyne z konvexity $\mathcal{M}_1(\mathbb{Y})$ a afinity $b(x, \mu)$ v μ . Aby množina přípustných řešení byla neprázdná, musí platit $f(x) \in B(x)$. K tomu však jistě postačí

$$(14) \quad f(x) \in \text{co}\{b(x, \delta_y), y \in \mathbb{Y}\} = \{b(x, \mu), \mu \in \text{co}\{\delta_y, y \in \mathbb{Y}\}\} \subset B(x).$$

Ověřme rovnost v předchozím výrazu. Zřejmě platí inkluze \subset , neboť obě zkoumané množiny jsou konvexní. Je-li $\mu \in \text{co}\{\delta_y\}$, pak

$$(15) \quad \exists \alpha_i, y_i : \alpha_i > 0, \sum_{i=1}^n \alpha_i = 1, \mu = \sum_{i=1}^n \alpha_i \delta_{y_i}.$$

Díky afinitě zobrazení b je tedy $b(x, \mu) = \sum_{i=1}^n \alpha_i b(x, \delta_{y_i})$ a tím jsme ověřili i obrácenou inkluzi.

Postačí tedy „pouze“ prozkoumat množinu obrazů Diracových měr a zaměřit se na její konvexní obal, který však, jak ukazují rovnosti (11) a (14), je dostatečně

reprezentativní. Ještě lepší situace nastává pro b spojitou a afinní v μ , kdy můžeme uvažovat slabší podmínku

$$(16) \quad f(x) \in \overline{\text{co}}\{b(x, \delta_y), y \in \mathbb{Y}\} = \{b(x, \mu), \mu \in \overline{\text{co}}\{\delta_y, y \in \mathbb{Y}\}\} = B(x).$$

3.3. Momentová úloha podruhé. Podívejme se podruhé na určité momentové úlohy, na kterých si ukážeme působení právě odvozených výsledků. Nejprve uvažujme první dva momenty reálné náhodné veličiny, tedy úlohu s prováděcí funkcí nezávislou na počáteční podmínce x

$$(17) \quad b(\mu) = (E_\mu \eta, E_\mu \eta^2).$$

Dosadíme-li za μ Diracovu míru δ_y , dostáváme jako výsledek prováděcí funkce dvojici (y, y^2) . Množina všech výsledků pro Diracovy míry tedy tvoří parabolu $y = x^2$ v rovině \mathbb{R}^2 , jejíž konvexní obal je zřejmě její „vnitřek“ $\{(x, y) : y \geq x^2, x \in \mathbb{R}\}$.

Postačující podmínkou existence neprázdného řešení pro uvedenou prováděcí funkci b proto je následující podmínka na řídicí funkci f

$$(18) \quad f(x) = (z_1, z_2)(x) \text{ tak, že } z_2(x) \geq z_1^2(x), z_1(x) \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{X}.$$

Všimněme si, že nyní jde zároveň o podmínku nutnou, neboť neexistuje pravděpodobnostní míra na reálných číslech taková, že $E\eta^2 < (E\eta)^2$. Dále poznamenejme, že body $b(\delta_y)$ jsou právě všechny extrémální body množiny $\{b(\mu) : \mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{R})\}$.

Jako druhý příklad uvažujme první a třetí moment reálné náhodné veličiny, tedy $b(\mu) = (E_\mu \eta, E_\mu \eta^3)$. Diracovy míry se zde zobrazují na kubickou křivku $y = x^3$ v \mathbb{R}^2 a jak si snadno představíme, konvexním obalem této křivky je celá rovina \mathbb{R}^2 . Z toho plynou dva závěry. Za prvé pro libovolnou reálnou řídicí funkci $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}^2$ splňující předpoklady věty 1 existuje řešení předložené (b, f) úlohy. Druhý závěr je ten, že obrazy extrémálních bodů, tedy Diracových měr, nejsou extrémální body konvexní množiny všech obrazů.

3.4. Existence řešení. Nyní můžeme předchozí úvahy shrnout do závěrečného tvrzení, které podstatně zjednodušuje ověření existence neprázdného řešení ve speciálních případech. Označme nyní

$$(19) \quad B_{ext}(x) := \{b(x, \delta_y), y \in \mathbb{Y}\}.$$

Věta 4. *Nechť pro zadanou (b, f) úlohu platí jedna z následujících podmínek*

- (1) *Zobrazení $b(x, \mu)$ i $f(x)$ jsou borelovská, b je afinní v μ a $f(x) \in \text{co}B_{ext}(x)$ pro všechna $x \in \mathbb{X}$.*
- (2) *Zobrazení $b(x, \mu)$ i $f(x)$ jsou borelovská, b je afinní a spojitě v μ a $f(x) \in \overline{\text{co}}B_{ext}(x)$ pro všechna $x \in \mathbb{X}$.*
- (3) *Zobrazení $b(x, \mu)$ je borelovské a navíc afinní a spojitě v μ , $f(x)$ je univerzálně měřitelné a $f(x) \in \overline{\text{co}}B_{ext}(x)$ pro všechna $x \in \mathbb{X}$.*

Pak pro libovolnou počáteční podmínku $\lambda \in \mathcal{M}_1(\mathbb{X})$ existuje řešení zadané (b, f) úlohy.

4. EXTREMÁLNÍ ŘEŠENÍ

Konvexita množiny \mathcal{P}_x při afinním prováděcím zobrazení podsouvá myšlenku zabývat se extrémálními body této množiny. Více bychom však chtěli vědět o možném řešení se stochastickou počáteční podmínkou procházejícím pouze extrémální body množiny řešení s deterministickou počáteční podmínkou. Uvažujme v této části pouze (b, f) úlohy splňující podmínky věty 4, abychom nemuseli dbát na množinu přípustných počátečních podmínek. Zobecnění není těžké, pouze vyžaduje další značení a znepřehledňuje výsledky.

4.1. Charakteristika extrémního řešení. Chceme nyní studovat extrémální markovská jádra řešící zadaný (b, f) problém. Označme si proto

$$(20) \quad \mathcal{J} := \{K : (\mathbb{X}, \mathcal{U}(\mathbb{X}) \rightarrow (\mathcal{M}_1(\mathbb{Y}), \mathcal{B}(\mathcal{M}_1(\mathbb{Y}))) : K \text{ je řešení } (b, f) \text{ úlohy}\}.$$

Všimněme si, že pro afinní prováděcí zobrazení je \mathcal{J} konvexní množina universálně měřitelných markovských jader. Existuje nějaká souvislost mezi extrémálními body \mathcal{J} a \mathcal{P}_x ?

Je-li markovské jádro J extrémální bod všech řešení \mathcal{J} , pak

$$(21) \quad J = aK + (1 - a)L, a \in (0, 1), K, L \in \mathcal{J} \Rightarrow K = L = J.$$

Pokud by existovalo $z \in \mathbb{X}$ takové, že $J(z)$ není extrémální bod \mathcal{P}_z , najdeme dvě různá řešení K_z a L_z a $0 < a < 1$ taková, že

$$(22) \quad \begin{aligned} J(z) &= aK_z + (1 - a)L_z \\ J &= aK + (1 - a)L, K(x) = L(x) = J(x), x \neq z, K(z) = K_z, L(z) = L_z. \end{aligned}$$

Zobrazení K a L jsou zřejmě měřitelná řešení (b, f) úlohy a J není extrémální bod \mathcal{J} , což je spor.

Je-li naopak pro každé $x \in \mathbb{X}$ bod $J(x)$ extrémálním bodem \mathcal{P}_x , pak

$$(23) \quad \begin{aligned} J &= aK + (1 - a)L \Rightarrow J(x) = aK(x) + (1 - a)L(x) \\ &\Rightarrow L(x) = K(x) = J(x) \forall x \in \mathbb{X} \Rightarrow J = K = L. \end{aligned}$$

Tím jsme dokázali následující tvrzení.

Tvrzení 5. *Nechť pro (b, f) úlohu splňující podmínky věty 4 existuje řešení $J : \mathbb{X} \rightarrow \mathcal{M}_1(\mathbb{Y})$. Pak J je extrémální bod \mathcal{J} právě když $J(x)$ je extrémální bod \mathcal{P}_x pro všechna $x \in \mathbb{X}$.*

Pokusme se najít nějakou další charakterizační vlastnost extrémního řešení. Již jsme si všimli, že extrémální pravděpodobnostní míry jsou Diracovy míry. Tedy míry, které mají nejmenší možný nosič, jediný bod. *Nosičem míry μ* , značeným $\text{supp}(\mu)$ rozumíme nejmenší uzavřenou množinu takovou, že $\mu(\text{supp}(\mu)) = 1$. Jak vypadá nosič extrémálního bodu množiny \mathcal{P}_x ?

Podívejme se na řešení $\mu \in \mathcal{P}_x$, jehož nosič je nejmenší. Přesněji tak, že pro libovolnou míru $\nu \in \mathcal{P}_x$ platí, že $\text{supp}(\nu) \not\subset \text{supp}(\mu)$. Pak míra μ musí být extrémální. Pokud by totiž nebyla extrémální, pak

$$(24) \quad \mu = a\nu_1 + (1 - a)\nu_2 \Rightarrow \text{supp}(\mu) = \text{supp}(\nu_1) \cup \text{supp}(\nu_2) \Rightarrow \text{supp}(\nu_i) \subset \text{supp}(\mu).$$

Platí tedy následující tvrzení.

Tvrzení 6. *Jestliže pro $\mu \in \mathcal{P}_x$ platí $\text{supp}(\nu) \not\subset \text{supp}(\mu)$ pro všechny míry $\nu \in \mathcal{P}_x$, pak míra $\mu \in \text{ex}\mathcal{P}_x$.*

Opačná implikace je v tuto chvíli otevřená. Všimněme si ještě, že pro toto tvrzení nepotřebujeme afinitu zobrazení b . V každém případě jiné ze speciálních řešení, řešení s největším možným nosičem, zjevně stojí na opačném pólu množiny řešení.

4.2. Extrémální body momentových množin. Podívejme se opět, jak vypadá extrémální řešení v konkrétním případě momentové úlohy. V článku [16] jsou extrémální body momentových množin o nejvýše konečném počtu momentových podmínek přímo charakterizovány. Věta 2.1 uvedeného článku říká

Tvrzení 7. *Mějme dané měřitelné funkce g_1, \dots, g_n definované na prostoru \mathbb{Y} a reálná čísla f_1, \dots, f_n . Uvažujme množinu*

$$\mathcal{Q} := \left\{ \mu \in \mathcal{M}_1(\mathbb{Y}) : g_i \text{ je } \mu\text{-integrovatelná a } \int g_i d\mu = f_i \right\}.$$

Pak je \mathcal{Q} konvexní a

$$(25) \quad \text{ex}\mathcal{Q} = \left\{ \mu \in \mathcal{Q} : \mu = \sum_{i=1}^m \alpha_i \delta_{y_i}, \alpha_i > 0, \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1, y_i \in \mathbb{Y}, 1 \leq m \leq n+1 \right. \\ \left. \text{vektory } (g_1(y_i), \dots, g_n(y_i), 1), 1 \leq i \leq m, \text{ jsou lin. nezávislé} \right\}.$$

Prozkoumejme nyní extrémální body pro momentovou úlohu zadanou prvními dvěma momenty, tedy $b(\mu) = (E_\mu \eta, E_\mu \eta^2)$. Podle předchozího tvrzení jsou extrémální body právě ty pravděpodobnostní míry, které řeší zadanou (b, f) úlohu a mají nejvýše tři body nosiče. Všimněme si, že pro libovolné tři různé body y_1, y_2, y_3 platí

$$(26) \quad \text{hodnost } \begin{pmatrix} y_1 & y_1^2 & 1 \\ y_2 & y_2^2 & 1 \\ y_3 & y_3^2 & 1 \end{pmatrix} \text{ je rovna 3,}$$

neboli jakékoliv řešení (b, f) úlohy s právě třemi různými body nosiče je extrémální. Dále si uvědomme, že každá dobře zadaná úloha tohoto typu (tedy taková, kde $f_1^2 < f_2$) má řešení s dvěma body nosiče a to $\{-\sqrt{f_2}, \sqrt{f_2}\}$. V takovém případě ovšem platí, že pro libovolné řešení μ se třemi body nosiče platí $-\sqrt{f_2} \notin \text{supp}(\mu)$ nebo $\sqrt{f_2} \notin \text{supp}(\mu)$. Jediným řešením v případě $f_1^2 = f_2$ je δ_{f_1} a úloha nemá řešení pro $f_1^2 > f_2$.

V tomto případě tedy můžeme dojít k závěru, že extrémální řešení je právě takové řešení μ , že

$$(27) \quad \forall \nu \in \mathcal{Q} : \text{supp}(\nu) \not\subset \text{supp}(\mu),$$

tedy v tvrzení 6 platí ekvivalence. Důvod je ten, že trojice bodů (y_i, y_i^2) splňujících (26) tvoří simplex a tedy existuje jediná konvexní kombinace těchto bodů jejímž výsledkem je bod (f_1, f_2) .

Extrémální řešení momentové úlohy zadané prováděcí funkcí $b(\mu) = (E_\mu \eta, E_\mu \eta^3)$ jsou všechna řešení s nejvýše třemi různými body nosiče kromě případu míry s nosičem $\{y_1, y_2, y_3\}$ takovým, že

$$(28) \quad (y_1, y_1^3), (y_2, y_2^3), (y_3, y_3^3) \text{ leží v jedné přímce.}$$

5. ZÁVĚREČNÉ POZNÁMKY

Momentové úlohy, na nichž jsme vesměs ilustrovali předkládanou teorii jsou zdánlivě jen úzkou třídou úloh. Ve skutečnosti však jde o mnohem universálnější nástroj, než je na první pohled patrné. Momentové množiny, tedy množiny řešení momentových úloh, zahrnují například i množiny pravděpodobnostních měr omezených shora v Choquetově uspořádání danou mírou, množiny řešení martingalových problémů a mnoho dalších. Zájemce odkazujeme na literaturu [13]–[15], kde se lze také seznámit s problematikou integrální reprezentace na momentových množinách.

Kromě extrémálních řešení, která mají uplatnění při hledání integrálních reprezentací, maximalizaci mírově afinních funkcionalů a dalších úlohách spjatých se Choquetovou teorií, lze se zabývat též hledáním řešení s největším možným nosičem. Existence takového řešení je zajištěna splněním CS-podmínky (viz [10])

$$(29) \quad \forall (x \in \mathbb{X}, (\mu_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{P}(x)) \exists \left(\alpha_n > 0, \sum_1^\infty \alpha_n = 1 \right) : \sum_1^\infty \alpha_n \mu_n \in \mathcal{P}(x).$$

V [5] je dokázáno, že afinita prováděcího zobrazení $b(x, \mu)$ v proměnné μ je postačující podmínkou ke splnění CS-podmínky a tedy existuje řešení (b, f) úlohy s největším možným nosičem. Vztahu nosiče sdruženého rozdělení a nosičů marginálního a podmíněných rozdělení je věnována práce [4].

Poznamenejme ještě, že zde předváděné výsledky obvykle platí i pro obecnější (b, F) úlohy za dodatečného předpokladu konvexity obrazů $F(x)$.

LITERATURA

- (1) Aubin, J.-P., Frankowska, H., *Set-Valued Analysis*, Birkhäuser, 1990
- (2) Cohn, D.L., *Measure Theory*, Birkhäuser, 1993
- (3) Dunford, N., Schwartz, J.T., *Linejnyje operatory: Obščaja teorija*, Izdatel'stvo inostrannoj literatury, 1962
- (4) Hlubinka, D., The support of $\mathcal{L}(\xi, \eta)$ when the support of $\mathcal{L}(\eta|\xi = x)$ and $\mathcal{L}(\xi)$ are given, *Acta Universitatis Carolinae, Math. et Phys.*, 39, 1998, str. 41–48
- (5) Hlubinka, D., Implicit Markov kernels, Preprint KPMS, 2000
- (6) Kallenberg, O., *Foundation of Modern Probability*, Springer, 1997
- (7) Lukeš, J., *Zápisky z funkcionální analýzy*, Karolinum, 1997
- (8) Lukeš, J., Malý, J., *Míra a integrál*, Karolinum, 1993
- (9) Srivastava, S.M., *A Course on Borel Sets*, Springer, 1998
- (10) Štěpán, J., How to construct a two dimensional random vector with a given conditional structure, sborník *Distribution with Given Marginals and Moment Problems*, edit. V. Beneš a J. Štěpán, Kluwer, 1997, str. 161–171
- (11) Štěpán, J., Hlubinka, D., Two dimensional probabilities with given conditional structure, *Kybernetika*, 35.3, 1999, str. 367–381
- (12) Topsøe, F., *Topology and Measure*, LNM 133, Springer, 1970
- (13) Weizsäcker, H.v., Winkler, G., Non-compact extremal integral representations: some probabilistic aspects, *Functional analysis: Surveys and recent results II*, *Math. Studies* 38, 1980, North Holland, str. 115–148
- (14) Weizsäcker, H.v., Winkler, G., Integral representation in the set of a solutions of a generalized moment problem, *Math. Ann.*, 246, 1979, str. 23–32
- (15) Winkler, G., *Choquet order and simplices*, LNM 1145, Springer, 1985
- (16) Winkler, G., Extreme points of moment sets, *Mathematics of oper. research*, 13.4, 1988, str. 581–587

RCA(1) MODEL WITH HETEROSCEDASTICITY

HANA JANEČKOVÁ

ABSTRACT. The paper is concerned with a zero mean stochastic process $\{X_t\}$ that follows RCA(1) model of the form $X_t = b_t X_{t-1} + Y_t$. It is supposed that the process of random coefficients $\{b_t\}$ consists of independent random variables with constant expectation β and the second moment σ_b^2 , while the error process $\{Y_t\}$ of independent random variables is permitted to be heteroscedastic. In the paper there are presented strong consistency and asymptotic normality of OLS and WLS estimators of the unknown parameter β . All these results are then generalized to the case of a non-zero mean process with unknown expectation. In the last part some simulations are presented.

Абстракт. В этой статье мы сосредоточим внимание на процессе авторегрессии первого порядка со случайным параметром. Этот процесс имеет вид $X_t = b_t X_{t-1} + Y_t$. Сначала мы предполагаем, что X_t имеют нулевые средние значения. Процесс случайных параметров $\{b_t\}$ состоит из последовательности независимых случайных переменных со средним значением β и постоянной дисперсией σ_b^2 , пока дисперсии шума Y_t зависят от t . В статье мы представляем асимптотические свойства оценок параметра β используя методы наименьших квадратов и взвешенных наименьших квадратов. Все результаты обобщены для процесса со средним значением μ и добавлены симуляциями.

1. INTRODUCTION

Random coefficient autoregressive models (RCA), which were firstly introduced by Anděl in [1], are natural generalization of AR models. Well-arranged review of results for homoscedastic RCA models is given in [10]. Through the time a lot of generalization of these basic models were studied. This paper is focused on the case when the disturbances in the RCA(1) model consist of independent random variables with heteroscedastic variances. For this model strong consistency and asymptotic normality of two types of estimates of parameter β are proved.

In a literature it can be found several papers in which asymptotic properties of estimators of unknown parameter β are studied in closely related models but none of them concerns exactly with this case. Weak consistency in heteroscedastic AR processes with independent errors is presented in [12]. Heteroscedastic AR model with martingale difference errors are studied for example in [11], [3]. While in the former one asymptotic normality is proved, in the latter one rate of convergence to normal distribution is moreover given. Further, in [9] generally explosive heteroscedastic AR processes are discussed. Fixed AR models with more general structure of heteroscedastic disturbances are studied in [5].

In the field of RCA models one can find for example [2] where authors derived rate of convergence to normal distribution in the RCA model with almost surely

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62M10.

Key words and phrases. Random coefficient autoregressive models, heteroscedasticity.

This work was partially supported by grants MSM 113200008 (Mathematical Methods in Stochastics) and GAČR 201/00/0769.

bounded and homoscedastic errors that follows martingale difference structure. In [6] asymptotic properties of estimators in the generalized RCA model in which processes of random coefficients and disturbances are permitted to be correlated are derived, but again under homoscedastic assumption. The only one paper concerned with heteroscedastic RCA models, we know about, is [8]. But strong consistency and asymptotic normality are proved under stronger assumptions there and moreover only for the OLS estimator and a zero mean case.

2. ZERO MEAN CASE

2.1. Model definition and assumptions. Suppose that the behaviour of a stochastic process $\{X_t\}$ is described by the RCA(1) model

$$(1) \quad X_t = b_t X_{t-1} + Y_t, \quad t = 1, \dots, n.$$

Through the whole paper we will assume that $EX_0 = 0, 0 < EX_0^2 = \sigma_0^2 < \infty$, $Y_t, t = 1, \dots, n$ are random variables with $EY_t = 0 \forall t, 0 < EY_t^2 = \sigma_t^2 < \infty$ which are independent of X_0 and that $b_t, t = 1, \dots, n$ are random variables with $Eb_t = \beta, 0 < Eb_t^2 = \sigma_b^2 < \infty \forall t$ which are independent of X_0 and of $\{Y_t\}$.

It is useful to rewrite model (1) in the following way

$$(2) \quad X_t = \beta X_{t-1} + B_t X_{t-1} + Y_t = \beta X_{t-1} + u_t,$$

where $u_t = B_t X_{t-1} + Y_t$ and $B_t = b_t - \beta$. To keep unified notation let us denote $\sigma_B^2 := EB_t^2$, so the equation $\sigma_B^2 = \sigma_b^2 - \beta^2$ holds.

In this paper we will study two types of estimators of the parameter β in model (2) together with their statistical properties, namely strong consistency and asymptotic normality. We will focus on ordinary least squares (OLS) and weighted least squares (WLS) estimators which are given by (3) and (4), respectively:

$$(3) \quad \hat{\beta} = \frac{\sum_{t=1}^n X_t X_{t-1}}{\sum_{t=1}^n X_{t-1}^2},$$

$$(4) \quad \hat{\beta}_W = \frac{\sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} X_t X_{t-1}}{\sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} X_{t-1}^2}.$$

Since the space for this contribution is limited, there is given only a brief summary of the most important theorems together with main ideas of their proofs. Complete proofs and all important lemmas on which the proofs are based can be found in [7].

2.2. Strong consistency. To establish strong consistency of the above-mentioned estimators we have to define an additional set of assumptions:

A0: both $\{Y_t\}$ and $\{b_t\}$ are processes of independent random variables,

A1: $\omega_t := E|Y_t|^{2+\delta} \leq K < \infty \forall t$ and for some $\delta > 0$,

A2: $\omega_b := \sup_t E|b_t|^{2+\delta} < 1$ for some $\delta > 0$,

A3: $\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \sigma_t^2 \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \sigma^2 > 0$.

The proving methodology in this field is substantially based on the theory of martingale difference sequences and mixingales. Definitions of these two concepts can be found in [4]. In this case these properties are defined with respect to the filtration $\mathcal{F} = (\mathcal{F}_t, t \geq 0)$, where $\mathcal{F}_0 = \sigma(X_0)$, $\mathcal{F}_t = \sigma(X_0, Y_1, B_1, \dots, Y_t, B_t)$.

Remark 2.1. *It can be shown that $\{u_t\}$ is an \mathcal{F}_t -martingale difference sequence (\mathcal{F}_t -m.d.s.). Combining this fact with (2) we could see that the random coefficient RCA(1) model (1) with independent errors can be represented as the fixed coefficient AR(1) model (2) with martingale difference errors of a structure $u_t = B_t X_{t-1} + Y_t$. But the results about these models that can be found for example in [11] cannot be applied directly, since the crucial assumption of this paper, i.e. $E(u_t^2 | \mathcal{F}_{t-1}) = E u_t^2$ a.s, is in our model satisfied in a degenerate case $X_t^2 = E X_t^2$ a.s, only.*

Theorem 2.1. *Under Assumptions A0–A3, $\hat{\beta} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{a.s.} \beta$ holds.*

Proof. Combining (2) and (3) we get $\hat{\beta} - \beta = \left(\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n X_{t-1} u_t \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n X_{t-1}^2 \right)^{-1}$. In the first step it is shown that $\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n X_{t-1} u_t \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{a.s.} 0$. This arises from the fact that $\{X_{t-1} u_t\}$ is an \mathcal{F}_t -m.d.s. (see Lemma 1.3. in [7]) and from Theorem 20.11 in [4]. Further, it can be proved that the sequence $\{X_t^2 - E X_t^2, \mathcal{F}_t\}$ is an $L_{1+\varepsilon}$ -mixingale of an arbitrary size for some $\varepsilon > 0$ (see Lemma 1.4. in [7]). This fact together with Theorem 20.16. in [4] yields that $\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n X_{t-1}^2 \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{a.s.} \frac{\sigma^2}{1 - (\beta^2 + \sigma_B^2)} > 0$, which concludes the proof. \square

In case of the WLS estimator (4) we have to add one more assumption:

A4: $0 < N \leq \sigma_t^2 \quad \forall t$.

Theorem 2.2. *Under Assumptions A0–A4, $\hat{\beta}_W \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{a.s.} \beta$ holds.*

Proof. The proof can be done similarly as in the previous case. To ensure existence of all a.s.-limits, it is necessary in this case to rewrite the difference $\hat{\beta}_W - \beta$ in the way $\hat{\beta}_W - \beta = \left(\frac{1}{n c_n} \sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} X_{t-1} u_t \right) \left(\frac{1}{n c_n} \sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} (X_{t-1}^2 - E X_{t-1}^2) + 1 \right)^{-1}$, where $c_n = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} E X_{t-1}^2$. \square

2.3. Asymptotic normality. In order to find an asymptotic distribution of given estimators of the parameter β in model (2), we have to suppose a stronger set of assumptions than in the previous paragraph. In the following let us assume:

A0: both $\{Y_t\}$ and $\{b_t\}$ are processes of independent random variables,

A1': $\eta_t := E|Y_t|^{4+\delta} \leq K < \infty \forall t$ and for some $\delta > 0$,

A2': $\eta_b := \sup_t E|b_t|^{4+\delta} < 1$ for some $\delta > 0$, moreover $E b_t^4 = \gamma_b \forall t$,

A3: $\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \sigma_t^2 \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \sigma^2 > 0$,

A5: $\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \gamma_t \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \gamma$, where $\gamma_t := E Y_t^4$,

A6: $\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \sigma_t^2 E X_{t-1}^2 \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \bar{\sigma}^2 > 0$.

Theorem 2.3. *Under Assumptions A0, A1', A2' and A3, A5, A6, the asymptotic distribution of $\sqrt{n}(\hat{\beta} - \beta)$ is $N\left(0, \Delta \left(\frac{1 - (\beta^2 + \sigma_B^2)}{\sigma^2}\right)^2\right)$, where*

$$(5) \quad \Delta = \sigma_B^2 \frac{6(\beta^2 + \sigma_B^2)\bar{\sigma}^2 + \gamma}{1 - \gamma_b} + \bar{\sigma}^2.$$

Proof. The proof is based on analyzing asymptotic behaviour of the expression $\sqrt{n}(\hat{\beta} - \beta) = \left(\frac{1}{s_n} \sum_{t=1}^n X_{t-1} u_t\right) \left(\sqrt{\frac{n}{s_n^2}} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n X_{t-1}^2\right)^{-1}$. Firstly, it can be derived that $\frac{1}{n} s_n^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \Delta$ holds for $s_n^2 := \sum_{t=1}^n E(X_{t-1}^2 u_t^2)$. Thus, in the rest of the proof it is sufficient to show that $\frac{1}{s_n} \sum_{t=1}^n X_{t-1} u_t$ has the asymptotic distribution $N(0, 1)$, which requires again theory of martingale differences and mixingales (see the proof of Theorem 1.3. in [7]). \square

To get asymptotic results about $\hat{\beta}_W$ we would need, next to Assumption A4, at least two additional assumptions that would guarantee the existence of the limit $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n E\left(\frac{1}{\sigma_t^2} X_{t-1}^2 u_t^2\right)$. The assumptions are as follows:

$$\mathbf{A7:} \quad \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} E X_{t-1}^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \underline{\sigma}^2 > 0,$$

$$\mathbf{A8:} \quad \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^4} E X_{t-1}^4 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \underline{\gamma} > 0.$$

Since Assumptions A6–A8 seems rather technical and complicated we formulate the following theorem with the stronger version of Assumption A3 of the form:

$$\mathbf{A3':} \quad \sigma_n^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sigma^2 > 0.$$

Theorem 2.4. *Under Assumptions A0, A1', A2', A3', A4 and A5, the asymptotic distribution of $\sqrt{n}(\hat{\beta}_W - \beta)$ is the same as that of $\sqrt{n}(\hat{\beta} - \beta)$ given in Theorem 2.3.*

Proof. The proof can be done analogously as for the OLS estimator $\hat{\beta}$. Existence of all corresponding limits is ensured by Assumption A3'. \square

Remark 2.2. *Under Assumption A3', all three limits defined in Assumptions A6–A8 exist and they are of the following form:*

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}^2 &= \frac{\sigma^4}{1 - (\beta^2 + \sigma_B^2)}, \\ \underline{\sigma}^2 &= \frac{1}{1 - (\beta^2 + \sigma_B^2)}, \\ \underline{\gamma} &= \frac{1}{\sigma^4} \frac{6(\beta^2 + \sigma_B^2) \frac{\sigma^4}{1 - (\beta^2 + \sigma_B^2)} + \gamma}{1 - \gamma_b}. \end{aligned}$$

3. NON-ZERO MEAN CASE

A situation described by model (1) and all asymptotic results presented in Section 2 can be generalized to the case of a non-zero mean process.

3.1. Model definition and assumptions. Let us consider the stochastic process $\{V_t\}$ with $EV_t = \mu \forall t$ that follows the model

$$(6) \quad (V_t - \mu) = b_t (V_{t-1} - \mu) + Y_t, \quad t = 1, \dots, n.$$

Put $X_t := V_t - \mu$ and let us suppose that all assumptions of Section 2.1 for X_t, Y_t and b_t are satisfied.

In case of known parameter μ , all previous results remain valid with $X_t := V_t - \mu$. Mostly, the parameter μ is unknown and has to be estimated. Consequently, all estimators of β have to be modified using the estimated value $\hat{\mu}$ instead of a true unknown parameter μ . In the following we will give results about strong consistency and asymptotic normality of modified OLS and WLS estimators of the form:

$$(7) \quad \hat{\beta} = \frac{\sum_{t=1}^n (V_t - \hat{\mu})(V_{t-1} - \hat{\mu})}{\sum_{t=1}^n (V_{t-1} - \hat{\mu})^2},$$

$$(8) \quad \hat{\beta}_W = \frac{\sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} (V_t - \hat{\mu})(V_{t-1} - \hat{\mu})}{\sum_{t=1}^n \frac{1}{\sigma_t^2} (V_{t-1} - \hat{\mu})^2},$$

where $\hat{\mu}$ is a natural estimator of μ given by the following expression:

$$(9) \quad \hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n V_t.$$

It can be proved that all asymptotic results stated in the previous section remain valid in non-zero mean case. All proofs are however a little bit complicated and they can be found in [7]. Moreover, asymptotic properties of $\hat{\mu}$ can be derived which is summarized in the sequel.

Theorem 3.1. *Under Assumptions A0–A2, $\hat{\mu} \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{a.s.} \mu$ holds.*

Proof. Since $\hat{\mu} - \mu = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (V_t - \mu)$ the statement is a direct consequence of the fact that $\{V_t - \mu, \mathcal{F}_t\}$ is an $L_{1+\varepsilon}$ -mixingale (see Lemma 1.4. in [7]) and of Theorem 20.16. in [4]. \square

Remark 3.1. *In case that only strong consistency of the parameter $\hat{\mu}$ is of interest, Assumptions A1 and A2 required in Theorem 3.1 could be weakened to analogous conditions for absolute moments of an order $1 + \varepsilon$ for some $\varepsilon > 0$ instead of $2 + \delta$.*

Theorem 3.2. *Under Assumptions A0–A3, the asymptotic distribution of $\sqrt{n} (\hat{\mu} - \mu)$ is $N\left(0, \frac{\sigma^2(1+\beta)}{(1-\beta)(1-(\beta^2+\sigma_B^2))}\right)$.*

Proof. After some algebra it can be derived that $\sqrt{n} (\hat{\mu} - \mu) = U_n + \left(\frac{1}{s_n} \sum_{t=1}^n \rho_{n,t} u_t\right) \left(\sqrt{\frac{n}{s_n^2}}\right)^{-1}$, where $\rho_{n,t} := \frac{1-\beta^{n-t+1}}{1-\beta}$, $s_n^2 := \sum_{t=1}^n \rho_{n,t}^2 E u_t^2$ and

U_n is a random variable for which $U_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{p} 0$ holds. Firstly, it is shown that $\frac{1}{n} s_n^2 \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} \frac{\sigma^2}{1-\beta} \left[\frac{1+\beta}{1-(\beta^2+\sigma_B^2)} \right]$. Further, it has to be proved that $\frac{1}{s_n} \sum_{t=1}^n \rho_{n,t} u_t$ has the limiting distribution $N(0,1)$ (see the proof of Theorem 2.4. in [7] for more details). \square

4. SIMULATIONS

To demonstrate asymptotic behaviour of previously studied estimators we present here results of a short simulation study.

The error process $\{Y_t\}$ considered in (1) was generated from the distribution $N(0, \sigma_t^2)$ with σ_t^2 chosen to satisfy one of the following models (sample size in each case was 500 observations):

- H1: homoscedastic with $\sigma_t^2 = 3$ for $t = 1, \dots, 500$,
- H2: heteroscedastic with stepwise ascending σ_t^2 having successively values 1, 1.5, 2.5, 4 with breaking points at times $n = 80, 180, 300$,
- H3: heteroscedastic with linearly descending σ_t^2 given by $\sigma_t^2 = 6 - 0.01t$ for $t = 1, \dots, 400$ and then constant at the value 2.

For the process of random parameters $\{b_t\}$ normal respectively uniform distribution were supposed, exact parameters of which are given in Table 1. These parameters were chosen in order to study the influence of the stability condition $\beta^2 + \sigma_B^2 < 1$ on one side, and the individual impact of β^2 respectively of σ_B^2 for the fixed value of $\beta^2 + \sigma_B^2$ on the other side.

case	A	B	C	D	E	F
b_t	N(0.2;0.2)	N(0.5;0.7)	N(0.75;0.2)	N(0.25;0.7)	U(-1;1)	U(0;1)
β	0.2	0.5	0.75	0.25	0	0.5
σ_B^2	0.2	0.7	0.2	0.7	1/3	1/12
$\beta^2 + \sigma_B^2$	0.24	0.95	0.7625	0.7625	1/3	1/3

Table 1: Parameters of distribution of b_t

Combining all these possibilities we simulated 18 different types of model (1). Convergence of estimates towards the true parameter β was studied for generated series with ascending number of observations $n = 50, 100, 150, \dots, 500$. In each case estimated parameters were based on 50 independent realizations.

In addition to the previous part of the paper, in this section we also consider conditionally weighted least squares estimator (CWLS), which is defined as

$$(10) \quad \hat{\beta}_{CW} = \sum_{t=1}^n \frac{X_t X_{t-1}}{\sigma_B^2 X_{t-1}^2 + \sigma_t^2} \bigg/ \sum_{t=1}^n \frac{X_{t-1}^2}{\sigma_B^2 X_{t-1}^2 + \sigma_t^2}.$$

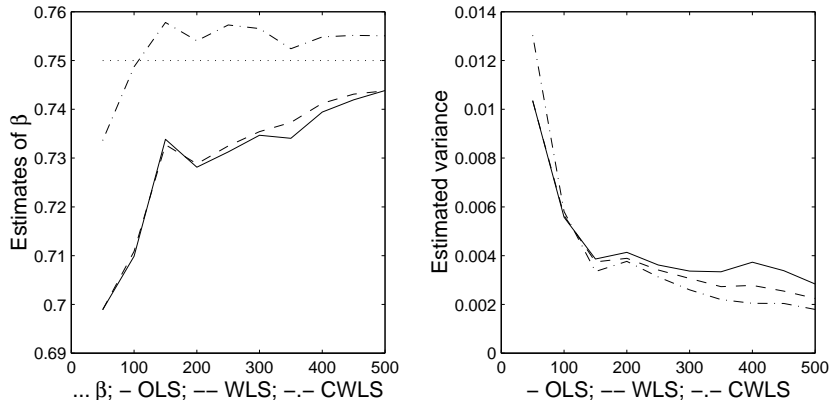
Since $E(u_t^2 | \mathcal{F}_{t-1}) = \sigma_B^2 X_{t-1}^2 + \sigma_t^2$, weights in (10) should better correspond to character of heteroscedasticity in model (2) rather than σ_t^2 alone. This hypothesis is numerically demonstrated by our results, while the theoretical derivation of asymp-

otic properties of $\hat{\beta}_{CW}$ is a subject of the future research. For generalized RCA(p) model with homoscedastic disturbances it has been already proved in [6].

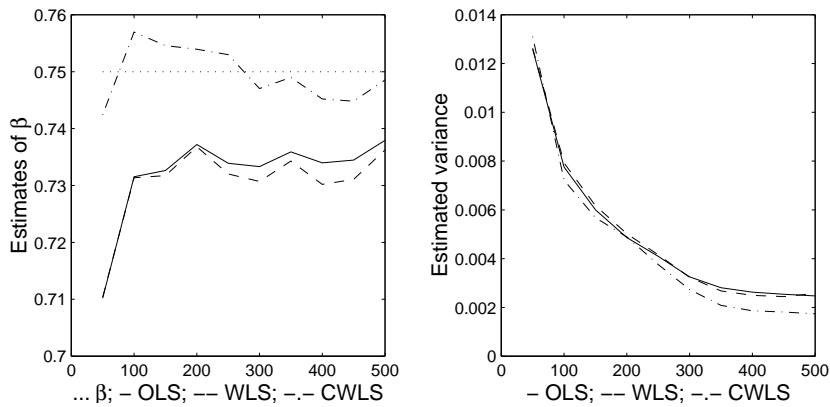
Graphs 4–4 demonstrate convergence of all estimates of β together with development of their estimated variances in cases C and D and under all types of heteroscedasticity H1, H2 and H3. Summary of selected results for $n = 50, 200, 500$ in remaining cases is given in Table 2.

gnc1.eps

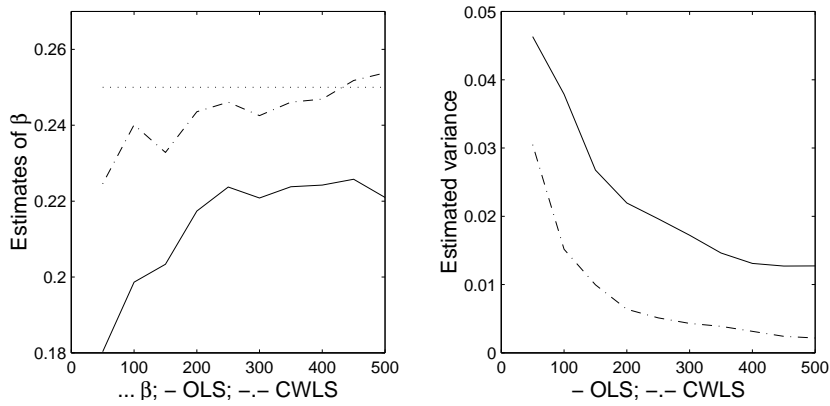
Graph 0: $b_t \sim N(0.75; 0.2)$, homoscedasticity H1



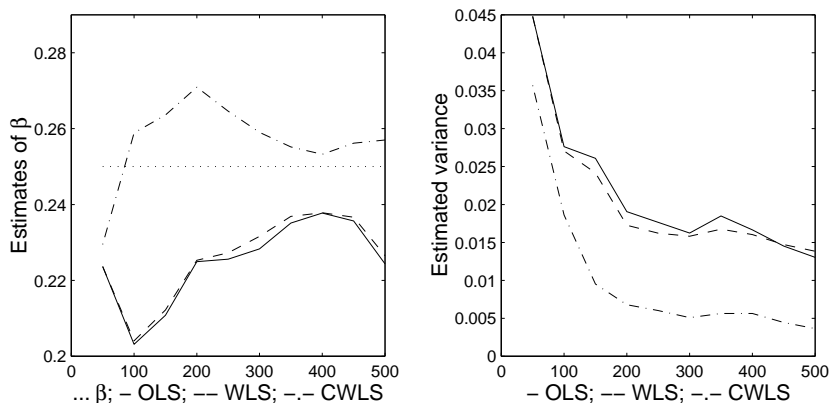
Graph 0: $b_t \sim N(0.75; 0.2)$, heteroscedasticity H2



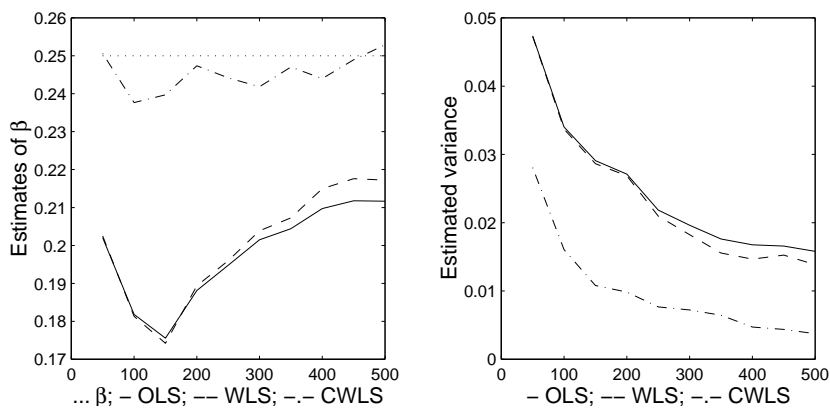
Graph 0: $b_t \sim N(0.75; 0.2)$, heteroscedasticity H3



Graph 0: $b_t \sim N(0.25; 0.7)$, homoscedasticity H1



Graph 0: $b_t \sim N(0.25; 0.7)$, heteroscedasticity H2



Graph 0: $b_t \sim N(0.25; 0.7)$, heteroscedasticity H3

From numerical and graphical results it is clearly seen that in all cases WLS, estimates are slightly preferable to OLS ones in both criteria convergence and estimated variance. Improvement of CWLS estimates is much more significant than that of WLS ones.

In case A, the differences between weighted and unweighted estimates and their estimated variances are not so big since both β and σ_B^2 are relatively small. On the other hand in case B, where both parameters are quite big, better convergence and smaller estimated variances of CWLS estimates are evident. It is well known that if the value of stability condition is close to 1, both OLS and WLS estimates can be unstable. In this light very good behaviour of CWLS estimates in case B could seem quite surprising.

Results of cases C and D demonstrate that under the fixed value of $\beta^2 + \sigma_B^2$, higher values of σ_B^2 lead to greater improvement of estimated variances of WLS and mainly CWLS estimates in comparison with OLS ones. Benefit from estimated variances of weighted estimates is not as big as in case C where σ_B^2 is small.

In cases of uniform distribution, the situation is analogous with the only one difference, namely that better convergence of CWLS estimates is not as significant as in cases of normal distribution.

	n	N(0.2;0.2)		N(0.5;0.7)		U(-1;1)		U(0;1)		
		$\hat{\beta}_*$	$\hat{s}_{\hat{\beta}_*}^2$	$\hat{\beta}_*$	$\hat{s}_{\hat{\beta}_*}^2$	$\hat{\beta}_*$	$\hat{s}_{\hat{\beta}_*}^2$	$\hat{\beta}_*$	$\hat{s}_{\hat{\beta}_*}^2$	
H1	OLS	50	0.1565	0.0219	0.3684	0.0407	-0.0315	0.0263	0.4511	0.0226
		200	0.1736	0.0068	0.4413	0.0221	0.0055	0.0093	0.4844	0.0061
		500	0.1880	0.0022	0.4527	0.0161	0.0032	0.0038	0.4955	0.0020
	CWLS	50	0.1667	0.0212	0.4707	0.0238	-0.0387	0.0184	0.4558	0.0233
		200	0.1782	0.0070	0.4892	0.0068	-0.0018	0.0064	0.4865	0.0062
		500	0.1926	0.0020	0.5058	0.0030	-0.0002	0.0024	0.4960	0.0018
H2	OLS	50	0.1895	0.0191	0.3753	0.0442	-0.0117	0.0241	0.4737	0.0143
		200	0.1941	0.0059	0.4269	0.0260	-0.0004	0.0073	0.5084	0.0055
		500	0.1935	0.0035	0.4525	0.0150	0.0007	0.0036	0.4986	0.0026
	WLS	50	0.1895	0.0191	0.3753	0.0442	-0.0117	0.0241	0.4737	0.0143
		200	0.1928	0.0044	0.4306	0.0238	0.0031	0.0069	0.5068	0.0048
		500	0.1948	0.0024	0.4536	0.0157	0.0031	0.0028	0.5011	0.0021
	CWLS	50	0.1946	0.0188	0.5047	0.0311	-0.0082	0.0218	0.4824	0.0131
		200	0.2004	0.0042	0.5033	0.0085	0.0161	0.0055	0.5117	0.0047
		500	0.2032	0.0021	0.5048	0.0034	0.0087	0.0030	0.5049	0.0022
H3	OLS	50	0.2205	0.0176	0.4108	0.0345	0.0408	0.0238	0.5260	0.0160
		200	0.2023	0.0050	0.4457	0.0228	0.0132	0.0100	0.5075	0.0033
		500	0.1958	0.0025	0.4397	0.0145	0.0068	0.0036	0.5011	0.0013
	WLS	50	0.2206	0.0178	0.4105	0.0346	0.0411	0.0237	0.5264	0.0159
		200	0.2012	0.0050	0.4423	0.0245	0.0113	0.0102	0.5055	0.0034
		500	0.1975	0.0025	0.4388	0.0128	0.0059	0.0031	0.4994	0.0013
	CWLS	50	0.2271	0.0173	0.5503	0.0277	0.0288	0.0237	0.5331	0.0169
		200	0.1968	0.0047	0.5212	0.0078	0.0143	0.0072	0.5069	0.0035
		500	0.2001	0.0027	0.5091	0.0027	0.0038	0.0028	0.4997	0.0014

Table 2: Estimates of parameters β and their estimated variances

In practice we rarely know the true values of variances σ_t^2 and σ_B^2 and hence we could not compute estimators $\hat{\beta}_W$ and $\hat{\beta}_{CW}$ directly. However, we can use the two-stage estimation procedure. In the first stage, OLS estimate $\hat{\beta}$ is computed and then unknown variances σ_t^2 and σ_B^2 are taken as OLS estimates of parameters S_t and S_B from the regression model of the form $\hat{u}_t^2 = S_t + S_B X_{t-1}^2 + \xi_t$, where \hat{u}_t denotes OLS residuals from the first stage. In the second stage, WLS and CWLS estimates are then computed using values $\hat{\sigma}_t^2$ and $\hat{\sigma}_B^2$ instead of unknown σ_t^2 and σ_B^2 .

We also applied this two-stage procedure to all 18 types of models in order to compare estimated variances with the true ones and subsequently to compare WLS and CWLS estimates of β computed using true and estimated variances.

From our simulation results (which are not presented here) it can be seen that the biggest differences between $\hat{\sigma}_t^2$, σ_t^2 and $\hat{\sigma}_B^2$, σ_B^2 are realized in cases B and D, where the random coefficients have quite high variance. In the remaining cases the estimates are very accurate. We can also see that estimates $\hat{\sigma}_t^2$ always overestimate true values σ_t^2 in contrast to $\hat{\sigma}_B^2$ that are lower than σ_B^2 in all cases. It can lead to the conclusion that this procedure is not able to separate well the variation in the data due to the variation in coefficients and due to random errors. It seems that it moves certain part of the variation σ_B^2 into the variation σ_t^2 . On the other hand, an interesting observation could be the fact that differences in estimated variances from the first stage do not have as significant impact on the second-stage WLS and CWLS estimates of β as we have expected, not even in cases B and D. This is in our opinion a positive result, since it allows us to compute weighted estimates based on estimated variances without committing any significant deviations from truly computed WLS and CWLS ones.

REFERENCES

- [1] Anděl J. (1976); *Autoregressive Series with Random Parameters*, Math. Operationsforsch. Statist., 7, 735-741.
- [2] Basu A. K., Sen Roy S. (1988); *On a Rates of Convergence in the Central Limit Theorem for Parameter Estimation in Random Coefficient Autoregressive Models*, J. Indian Statist. Association, 26, 19-25.
- [3] Basu A. K., Sen Roy S. (1990); *On a Rates of Convergence in the Central Limit Theorem for Parameter Estimation in General Autoregressive Model*, Statistics, 21, No. 3, 461-470.
- [4] Davidson J. (1994); *Stochastic Limit Theory*, Oxford University Press, New York.
- [5] Dürr D., Loges W. (1985); *Large Deviation Results and Rates in the Central Limit Theorem for Parameter Estimators for Autoregressive Processes*, Sankyā 47, Ser. A, 6-24.
- [6] Hwang S. Y., Basawa I. V. (1998); *Parameter Estimation for Generalized Random Coefficient Autoregressive Processes*, J. Statist. Plann. Inference, 68, No. 2, 323-337.
- [7] Janečková H. (2000); *RCA(1) model with heteroscedasticity*, Preprint No. 13, Charles University, Prague.
- [8] Jürgens U. (1985); *The estimation of a random coefficient AR(1) process under moment conditions*, Stat. Hefte, 26, 237-249.
- [9] Lai T. L., Wei C. Z. (1983); *Asymptotic Properties of General Autoregressive Models and Strong Consistency of Least-Squares Estimates of Their Parameters*, J. Multivariate Anal., 13, No. 1, 1-23.
- [10] Nicholls D. F., Quinn B. G. (1982); *Random Coefficient Autoregressive Models: An Introduction*, Lecture Notes in Statistics, Springer-Verlag, Heidelberg-Berlin-New York.
- [11] Tjøstheim D., Paulsen J. (1985); *Least Squares Estimation and Order Determination Procedures for Autoregressive Processes with a Time Dependent Variance*, J. Time Ser. Anal., 6, No. 2, 117-133.
- [12] Tyssedal J. S., Tjøstheim D. (1982); *Autoregressive Processes with a Time Dependent Variance*, J. Time Ser. Anal., 3, No. 3, 209-217.

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSKÁ 83, 186 75 PRAHA
 E-mail address: janecko@karlin.mff.cuni.cz

TEST EXISTENCE VNĚJŠÍHO POLE V ISINGOVĚ MODELU

MARTIN JANŽURA A KAREL VRBENSKÝ

ABSTRAKT. The null hypothesis for the external field in the Ising model is tested. The proposed test is based on the pseudolikelihood approach and works both from theoretical and practical points of view even in the phase transition area.

Резюме. В работе изучается тест нулевой гипотезы для внешнего поля в модели Изинга. Предложенный тест основан на принципе максимального псевдоправдоподобия и работает хорошо с теоретической и практической точки зрения даже в области фазовых переходов.

1. ÚVOD

Isingův model je považovaný za nejjednodušší netriviální pravděpodobnostní model pro statistickou analýzu binárních dat v rovině (obecněji prostoru), například pro binární (černo-bílé) obrazy. Přes svou relativní jednoduchost však přináší většinu komplikací, které souvisejí se zobecněním výsledků z dimenze 1 do dimenzí vyšších. V pozadí všech obtíží leží neexistence přirozeného lineárního uspořádání a následná neexistence rozložitelných (rekurentních, acyklických, součinných) modelů typu Markovova řetězce.

Markovské modely ve vyšší dimenzi (mezi něž např. Isingův model náleží) zobecňují vlastnost “oboustranné markovosti” (založené na pojmu “okolí”), která je v dimenzi 1 ekvivalentní s obvyklou “jednostrannou markovostí”. Tato ekvivalence však ve vyšší dimenzi nemá přímou analogii, což ovšem není dáno nějakou chybnou konstrukcí či nešikovnou parametrizací. Jedná se o přirozené vlastnosti náhodných polí, které se u náhodných procesů v dimenzi 1 prostě nevyskytují. Podstatným kvalitativním rozdílem je existence tzv. fázových přechodů, které mají velmi dobrou interpretaci z hlediska statistické fyziky. Matematicky to znamená existenci různých nekonečněrozměrných distribucí (náhodných polí) se stejným systémem konečněrozměrných podmíněných marginálních rozdělení. Podrobněji viz Georgii (1988) nebo Ellis (1985).

Takový fenomén přináší ovšem komplikace i při statistické analýze. Problémy, s nimiž se lze setkat při analýze založené na věrohodnostním přístupu, lze rozdělit zhruba do dvou (vzájemně souvisejících) oblastí:

- (1) výpočetní – absence analytických formulek, absence realizovatelných výpočetních algoritmů;
- (2) teoreticko-matematické – neregulárnost (nespojitosť, nehladkosť, nejednoznačnosť) stěžejních charakteristik, neplatnosť limitních vět.

Ukážeme, že analýza založená na pseudověrohodnostním přístupu (Besag (1975), Comets (1992), Comets a Janžura (1998), Janžura (1999a)) umožňuje vypořádat se

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62M40; Secondary 65C40.

Klíčová slova. Isingův model, analýza obrazu, Gibsovská náhodná pole, MCMC.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 201/00/1149.

s oběma typy problémů. Konkrétně zde předvedeme, jak lze testovat hypotézu (ne-) existence vnějšího pole (jednoho z parametrů) v Isingově modelu. Problém budeme řešit jako Úlohu testování složené hypotézy; navrženou testovou statistiku lze relativně snadno numericky vypočítat a metoda funguje jak teoreticky tak prakticky i v oblasti fázových přechodů.

2. ISINGŮV MODEL

2.1. Definice. Dvourozměrný Isingův model je pravděpodobnostní rozdělení $P^{h,J}$ na prostoru $\{-1, +1\}^{Z^2}$, kde Z označuje množinu celých čísel. Je to tedy rozdělení náhodného procesu (pole) v diskretní rovině, s hodnotami v dvoubodové množině $\{-1, +1\}$. Rozdělení náhodného procesu bývá zpravidla definováno prostřednictvím systému konečněrozměrných marginálních rozdělení. Ta bývají někdy explicitně známa (jako u gaussovských procesů) nebo mohou být vyjádřena pomocí určité rekurentní (např. součinnové) formule (jako u markovských řetězců). Nic takového zde není k dispozici, proto bude Isingův model $P^{h,J}$ určen pomocí “přibližných” vztahů:

$$(I) \quad P_V^{h,J}(x_V) = \exp \left\{ h \cdot \sum_{t \in V} x_t + J \sum_{t,s \in V: \|t-s\|=1} x_t x_s - c(V, h, J) + O(|\partial V|) \right\}$$

pro každé $x_V \in \{-1, 1\}^V$ a konečnou $V \subset Z^2$, kde $h, J \in R$ jsou reálné parametry, $P_V^{h,J}$ je marginální rozdělení na $\{-1, +1\}^V$ a

$$c(V, h, J) = \log \sum_{x_V \in \{-1, 1\}^V} \exp \left\{ h \sum_{t \in V} x_t + J \sum_{t,s \in V: \|t-s\|=1} x_t x_s \right\}$$

je normalizační konstanta. Pracujeme s normou $\|t - s\| = \max_{i=1,2} |t_i - s_i|$; tudíž $\|t - s\| = 1$, jsou-li t, s nejbližší sousedé v horizontálním nebo vertikálním směru, a $\partial V = \{s \in V^c; \min_{t \in V} \|t - s\| = 1\}$ je nejbližší okolí množiny V .

Vliv parametrů h, J na vlastnosti rozdělení je zřejmý:

- (1) Pokud $h > 0$, budou pravděpodobnější konfigurace s převahou hodnot $+1$, pro $h < 0$ nastává opak. Tento parametr má v modelech statistické fyziky (zejména v modelu ferromagnetu) smysl “vnějšího pole”, které ve směru svého působení natáčí jednotlivé “spiny”.
- (2) Jestliže $J > 0$, budou pravděpodobnější konfigurace s převahou stejných hodnot v sousedících bodech. Tento parametr má tedy význam interakce mezi sousedy, je kladný pro ferromagnet a záporný pro antiferromagnet.

Výše uvedená definice I pro Isingův model je ekvivalentní s následující podmínkou:

$$(II) \quad P_{t|\{t\}^c}^{h,J}(x_t|x_{\{t\}^c}) = P_{t|\partial t}^{h,J}(x_t|x_{\partial t}) = \frac{\exp\{x_t(h + J \sum_{s \in \partial t} x_s)\}}{2 \cosh(h + J \sum_{s \in \partial t} x_s)},$$

kde $P_{t|\{t\}^c}$ je podmíněné rozdělení veličiny v bodě $t \in Z^2$ při zadaných hodnotách ve všech ostatních bodech diskretní roviny Z^2 , $\partial t = \{s \in Z^2; \|s - t\| = 1\}$ je nejbližší okolí bodu $t \in Z^2$. Vzhledem k tomu, že podmíněné rozdělení závisí pouze na nejbližších sousedech, má rozdělení $P^{h,J}$ vlastně (prostorovou) markovskou vlastnost.

Na první pohled je možná překvapivé, že “přibližné” určení v definici I je ekvivalentní s “přesnými” vztahy v definici II. Důkaz implikace $I \Rightarrow II$ skutečně není zcela triviální, vyplývá z variačního principu pro gibbsovská náhodná pole (viz např. Ellis (1985), kapitola III.8, Georgii (1988), kapitola 15.4, nebo Janžura (1999b)).

2.2. Fázové přechody. Otázka existence pravděpodobnostní distribuce $p^{h,J}$ s výše uvedenými vlastnostmi není obtížná, řešení zde vyplývá přímo ze známých vlastností měr na kompaktních prostorech. Mnohem závažnější je problém jednoznačnosti. Jestliže pro dané parametry h, J splňuje podmínku I (nebo II) více než jedna pravděpodobnostní distribuce, nastává jev nazývaný ve statistické fyzice fázovým přechodem. (To odpovídá přírodním úkazům, kdy se při určité teplotě může vyskytnout daná látka v různých skupenstvích.)

Problém fázových přechodů je poměrně dobře popsán pro případ Isingova ferromagnetu, tj. když $J \geq 0$. Potom $P^{h,J}$ je dáno jednoznačně, pokud

$$h \neq 0 \quad \text{a současně} \quad J \geq 0$$

nebo

$$h = 0 \quad \text{a současně} \quad 0 \leq J \leq J_c.$$

Pro $h = 0$ a $J > J_c$ platí

$$P^{h,J} \in \{ \alpha P^{h,J,+} + (1 - \alpha) P^{h,J,-}; \alpha \in [0, 1] \},$$

kde $P^{h,J,+}$ a $P^{h,J,-}$ jsou tzv. čisté fáze; všechny ostatní distribuce splňující definici I (nebo II) jsou jejich konvexní kombinací.

Přitom kritická hodnota parametru J je dána jako

$$J_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \doteq 0,44$$

Označíme-li

$$\mu^{h,J} = E^{P^{h,J}}[X_0] = P^{h,J}(1) - P^{h,J}(-1)$$

potom při pevném $J \geq 0$ je

$$\mu^{h,J}$$

spojitá rostoucí funkce h , záporná na intervalu $(-\infty, 0)$ a kladná na $(0, +\infty)$. Přitom platí $\mu^{0,J} = 0$ pokud $J \leq J_c$ a $\mu^{0,J} \in [\mu^{0,J,-}, \mu^{0,J,+}]$ pro $J > J_c$, kde

$$\mu^{0,J,+} = -\mu^{0,J,-} = [1 - (\sinh(2J))^{-4}]^{1/8}.$$

Při pevném $J > J_c$ se pak v bodě $h = 0$ funkce $\mu^{h,J}$ stává multifunkcí. Podobně viz např. Ellis (1985), kapitola V.5.

2.3. Úloha. V tomto článku budeme řešit statistickou úlohu, jak v rámci Isingova modelu testovat hypotézu

$$H_0 : h = 0$$

na základě dat $\hat{x}_{V_n} = (\hat{x}_t)_{t \in V_n} \in \{-1, +1\}^{V_n}$, kde např. $V_n = [-n, n]^2 \subset Z^2$ je (čtvercová) pozorovací oblast. Příklady takových datových souborů vidíme pro $h = 0$ a $J = 0,125$ resp. $J = 0,625$ na obr. 1a) resp. 1b).

Obr. 1a)

Obr. 1b)

Vzhledem k interpretaci parametru h budeme říkat, že testujeme (ne-)existenci vnějšího pole v Isingově modelu.

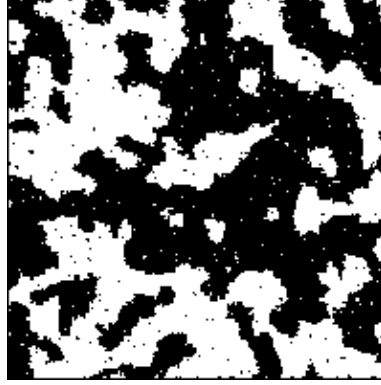
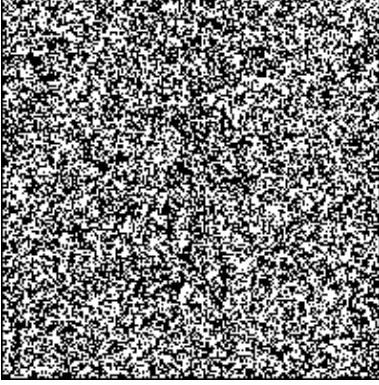
Vidíme, že ani jedna z hodnot $+1, -1$ není parametrem favorizována, intuitivně by se dalo očekávat, že se za platnosti hypotézy budou obě vyskytovat přibližně stejně často, tedy, označíme-li

$$\bar{X}_n = |V_n|^{-1} \sum_{t \in V_n} \hat{x}_t,$$

mělo by být

$$P^{0,J}(-\varepsilon < \bar{X}_n < \varepsilon) \rightarrow 0 \quad \text{pro } n \rightarrow \infty$$

při každém $\varepsilon > 0$.



Tato představa je však pro $J > J_c$ vyvrácena existencí fázových přechodů, neboť máme zaručeno pouze (díky větě o velkých odchylkách – viz např. Janžura (1987))

$$P^{0,J}(\mu^{0,J,-} - \varepsilon < \bar{X}_n < \mu^{0,J,+} + \varepsilon) \rightarrow 1 \quad \text{pro } n \rightarrow \infty$$

při každém $\varepsilon > 0$. Hypotézu bychom tudíž mohli zamítnout jenom v případě naprosto extrémních hodnot, neboť např. už pro $J = 0,5$ máme $\mu^{0,J,+} \doteq 0,9$.

Je proto evidentní, že test hypotézy H_0 nemůže být založen na statistice \bar{X}_n ani jiném odhadu střední hodnoty. Úlohu zformulujeme jako problém testování složených hypotéz v obecnějším modelu gibbovských náhodných polí a řešení ukážeme v následující kapitole.

3. GIBBOVSKÁ NÁHODNÁ POLE

3.1. Definice. Nechť \mathcal{X}_0 je konečný prostor stavů a Z^d je d -rozměrná celočíselná mříž se systémem konečných podmnožin $\mathcal{V} = \{V \subset Z^d; |V| < \infty\}$.

Zobrazení $\Phi : \mathcal{X}_0^V \rightarrow R$ pro nějaké pevné $V \in \mathcal{V}$ nazveme potenciálem. Množinu V můžeme považovat za “řád” (nebo “rozsah”) potenciálu a potenciál s konečným řádem budeme nazývat lokálním.

Pravděpodobnostní míru P na $\mathcal{X}_0^{Z^d}$ nazveme gibbovským náhodným polem vzhledem k potenciálu Φ , píšeme $P \in G(\Phi)$, jestliže jsou dána konečněrozměrná podmíněná rozdělení

$$P(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \Pi_\Lambda^\Phi(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) \quad \text{pro každé } \Lambda \in \mathcal{V}, x = (x_\Lambda, x_{\Lambda^c}) \in \mathcal{X}_0^{Z^d},$$

kde

$$\Pi_\Lambda^\Phi(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = N_\Lambda^\Phi(x_{\Lambda^c})^{-1} \exp \left\{ \sum_{j \in \Lambda - V} \Phi(x_{V+j}) \right\}$$

s normalizační konstantou

$$N_\Lambda^\Phi(x_{\Lambda^c}) = \sum_{y_\Lambda \in \mathcal{X}_0^\Lambda} \exp \left\{ \sum_{j \in \Lambda - V} \Phi(y_{(V+j) \cap \Lambda} x_{(V+j) \cap \Lambda^c}) \right\}$$

(zde značíme $\Lambda - V = \{\lambda - v; \lambda \in \Lambda, v \in V\} = \{j \in Z^d; (j + V) \cap \Lambda \neq \emptyset\}$).

Poznámka 1. Všimněme si, že

$$\Pi_{\Lambda}^{\Phi}(x_{\Lambda}|x_{\Lambda^c}) = \Pi_{\Lambda}^{\Phi}(x_{\Lambda}|x_{\partial\Lambda}),$$

tedy Φ_{Λ} závisí ve skutečnosti pouze na hodnotách $x_{\bar{\Lambda}}$ kde $\bar{\Lambda} = \Lambda \cup \partial\Lambda$ a $\partial\Lambda = (\Lambda - V + V) \setminus \Lambda$. To znamená, že i obecně gibbovské náhodné pole (s lokálním potenciálem Φ) má prostorovou markovskou vlastnost příslušného řádu. \square

Poznámka 2. Mohli bychom opět zformulovat ekvivalentní definici, zobecňující definici I. Isingovu modelu, tedy

$$P_{\Lambda}(x_{\Lambda}) = \exp \left\{ \sum_{j:j+V \subset \Lambda} \Phi(x_{V+j}) - c(\Lambda, \Phi) + \delta(|\partial V|) \right\}$$

pro každé $\Lambda \in \mathcal{V}$. \square

Systém markovských jader (lokálních charakteristik)

$$\{\Pi_{\Lambda}^{\Phi}\}_{\Lambda \in \mathcal{V}}$$

je evidentně konzistentní, nic tudíž nebrání, abychom s pomocí kompaktnosti prostoru $\mathcal{X}_0^{Z^d}$ ukázali existenci gibbovského pole $P \in G(\Phi)$, tedy obecně platí

$$|G(\Phi)| \geq 1.$$

Současně však problém jednoznačnosti je poměrně velmi komplikovaný. Množina gibbovských polí může obsahovat i pole neergodická, ale i zcela nestacionární (přestože lokální charakteristiky Π_{Λ}^{Φ} jsou homogenní, tj. invariantní na posunutí v prostoru Z^d). Např. v Isingově modelu jsou čisté fáze $P^{0,J,+}$ a $P^{0,J,-}$ ergodické, jejich kombinace pak jsou stacionární neergodické. Nestacionární stavy se vyskytují až ve vyšších dimenzích $d \geq 3$, kdy spolu mohou koexistovat různé fáze v různých částech prostoru. Podrobněji viz Georgii (1988) nebo Ellis (1985).

3.2. Parametrická rodina a odhad parametrů. Uvažujme nyní vektor potenciálů

$$\Phi^1, \dots, \Phi^p : \mathcal{X}_0^V \rightarrow R$$

a označme pro každé $\theta \in R^p$

$$\Phi^{\theta} = \sum_{i=1}^p \theta_i \Phi^i.$$

Budeme uvažovat parametrickou rodinu

$$\{P^{\theta}\}_{\theta \in R^p}$$

kde $P^{\theta} \in G(\Phi^{\theta})$ pro každé $\theta \in R^p$.

Představujme si věc tak, že P^{θ} je (v případě $|G(\Phi^{\theta})| > 1$) nějaké pevně vybrané gibbovské pole vzhledem k potenciálu Φ^{θ} . Nemáme tudíž předem zaručeno, že P^{θ} je ergodické nebo alespoň stacionární.

Pro rozumné řešení statistických úloh potřebujeme podmínku identifikovatelnosti, která bude mít v tomto případě následující tvar:

$$\text{jestliže } G(\Phi^{\theta}) = G(\Phi^{\bar{\theta}}), \quad \text{potom } \theta = \bar{\theta}.$$

Poznámka 3. Tato podmínka je poněkud silnější než obvyklá podmínka lineární nezávislosti; redukuje se však na ni, pokud doplníme nějakou normalizační podmínku (např. se omezíme na tzv. vakuové potenciály), která není na úkor obecnosti. Problém ekvivalentnosti potenciálů (potenciály jsou ekvivalentní, jestliže $G(\Phi) = G(\Psi)$) zde nebude detailně řešen, viz např. Georgii (1988), Kapitola 2, nebo Janžura (1997). Užitečná a relativně jednoduše ověřitelná podmínka zní takto:

$$\Phi \text{ a } \Psi \text{ jsou ekvivalentní, jestliže } \Pi_{\{0\}}^{\Phi}(\cdot|\cdot) = \Pi_{\{0\}}^{\Psi}(\cdot|\cdot).$$

□

Máme tedy parametrickou rodinu pravděpodobnostních rozdělení, která ovšem obecně není regulární. Viděli jsme, že zobrazení

$$\theta \mapsto P^{\theta}$$

nemusí být dokonce ani spojitě, natož pak hladké. To ovšem značně komplikuje konstrukci a vyšetřování vlastností maximálně věrohodného odhadu, jehož výpočet navíc vede na úlohu, pro niž neexistuje efektivní deterministický numerický algoritmus. Je sice možné využít pravděpodobnostní metodu “stochastického gradientu” (viz Younes (1988)), ale ta je výpočetně velmi náročná. Navíc neregulárnost parametrické rodiny souvisí i s neplatností standardní verze centrální limitní věty v plně obecnosti, což bychom potřebovali pro odvození asymptotického rozdělení příslušné testové statistiky.

Budeme tedy postupovat jinak a testy (složených) hypotéz založíme na odhadu maximálně pseudověrohodném. Pro daný datový soubor $\hat{x}_{V_n} \in \mathcal{X}_0^{V_n}$ a pevně zvolené $\Lambda_0 \in \mathcal{V}$ definujeme

$$\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} = \operatorname{argmax}_{\theta \in R^p} PL_n^{\Lambda_0}(\theta)$$

kde

$$PL_n^{\Lambda_0}(\theta) = \sum_{j \in V_n(\Lambda_0)} \log \Pi_{\Lambda_0}^{\theta}(\hat{x}_{\Lambda_0+j} | \hat{x}_{\partial\Lambda_0+j})$$

a

$$V_n(\Lambda_0) = \{j \in Z^d; j + \bar{\Lambda}_0 \subset V_n\}.$$

Pro jednoduchost píšeme Π^{θ} místo $\Pi^{\Phi^{\theta}}$.

Je známo, že maximálně pseudověrohodný odhad $\hat{\theta}^{n, \Lambda_0}$ existuje (s pravděpodobností rostoucí k 1), je konzistentní (viz např. Comets (1992)) a také asymptoticky normální – Comets a Janžura (1998). (Není však plně eficientní, jak ukazuje srovnání s Rao–Cramérovou mezí tam, kde je to možné, tzn. v oblasti regularity (jednoznačnosti) – Janžura (1997)).

Poznámka 4. Přímo na asymptotické normalitě odhadu $\hat{\theta}^{n, \Lambda_0}$ je možné založit test jednoduché hypotézy $H_{00} : \theta = \theta^0$. Pro složenou hypotézu $H_0 : \theta \in \Theta$ však potřebujeme obecnější verzi centrální limitní věty. Není cílem této práce zabývat se problematikou limitních vět, zdůrazníme pouze, že díky fázovým přechodům jsme v netypické situaci. Jsme schopni dokázat centrální limitní větu pouze ve “studentizované” formě

$$(\Sigma^n)^{-\frac{1}{2}} S_n \Longrightarrow \mathcal{N}_p(0, I),$$

kde ale odhad kovarianční matice Σ^n sám o sobě nekonverguje.

3.3. Testování složených hypotéz. Budeme tedy testovat hypotézu

$$H_0 : \theta \in \Theta_0,$$

kde $\Theta_0 = \{\theta \in R^p; \theta_1 = \dots = \theta_q = 0\}$ pro nějaké $q < p$.

Testovou statistiku založíme na porovnání odhadu za hypotézy s odhadem v saturevaném modelu. Označme tedy navíc

$$\hat{\theta}_0^{n, \Lambda_0} = \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta_0} PL_n^{\Lambda_0}(\theta)$$

a hledejme takovou posloupnost matic $M_n^{\Lambda_0}(\theta)$, při které

$$\hat{\chi}_{n, \Lambda_0}^2 = \left(\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} - \hat{\theta}_0^{n, \Lambda_0} \right)^T M_n^{\Lambda_0} \left(\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} \right) \left(\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} - \hat{\theta}_0^{n, \Lambda_0} \right) \implies \chi_q^2.$$

Vynecháme-li ze značení závislost na n a Λ_0 , dostaneme

$$M(\theta) = B(\theta)_{[1, p] \times [1, q]} [C(\theta) A(\theta) C(\theta)^T]^{-1} B(\theta)_{[1, q] \times [1, p]},$$

kde

$$\begin{aligned} A(\theta) &= \sum_{t, s \in V_n(\Lambda_0) : (t + \bar{\Lambda}_0) \cap (s + \bar{\Lambda}_0) \neq \emptyset} \nabla \log \Pi_{\Lambda_0 + t}^\theta(\cdot | \cdot) \nabla \log \Pi_{\Lambda_0 + s}^\theta(\cdot | \cdot)^T, \\ B(\theta) &= \sum_{t \in V_n(\Lambda_0)} \nabla^2 \log \Pi_{\Lambda_0 + t}^\theta(\cdot | \cdot) \end{aligned}$$

a

$$C(\theta) = \left(-B(\theta)_{(1, q] \times [q+1, p]} [B(\theta)_{[q+1, p] \times [q+1, p]}]^{-1}, I_{[1, q] \times [1, q]} \right).$$

Důkaz je založen na platnosti centrální limitní věty ve tvaru

$$(C_n(\theta) A_n(\theta) C_n(\theta)^T)^{-\frac{1}{2}} C_n(\theta) S_n(\theta) \implies \mathcal{N}_q(0, I)$$

kde

$$S_n(\theta) = \sum_{t \in V_n(\Lambda_0)} \nabla \log \Pi_{\Lambda_0 + t}^\theta(\cdot | \cdot).$$

Podrobněji viz Janžura (1999a), pro $p = q$ také Comets a Janžura (1998).

4. TEST EXISTENCE VNĚJŠÍHO POLE V ISINGOVĚ MODELU

Budeme nyní tvrzení předchozí části specifikovat pro úlohu formulovanou v odstavci 2.3.

Mějme tedy opět stavový prostor $\mathcal{X}_0 = \{-1, 1\}$ a dimenzi $d = 2$. Pro parametrickou rodinu považujeme za řád potenciálů množinu $V = \{(0, 0), (0, 1), (1, 0)\}$ a konkrétní báze bude dána vektorem

$$\begin{aligned} \Phi_1(x_V) &= x_{(0,0)} \\ \Phi_2(x_V) &= x_{(0,0)} x_{(0,1)} \\ \Phi_3(x_V) &= x_{(0,0)} x_{(1,0)}, \end{aligned}$$

tedy $p = 3$. Pro $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3) \in R^3$ máme tedy např.

$$\begin{aligned} &\Pi_{\{0\}}^\theta(x_{\{0\}} | x_{\partial 0}) = \\ &= \frac{\exp\{\theta_1 x_{(0,0)} + \theta_2 x_{(0,0)} (x_{(0,1)} + x_{(0,-1)}) + \theta_3 x_{(0,0)} (x_{(1,0)} + x_{(-1,0)})\}}{2 \cosh\{\theta_1 + \theta_2 (x_{(0,1)} + x_{(0,-1)}) + \theta_3 (x_{(1,0)} + x_{(-1,0)})\}}. \end{aligned}$$

Porovnáme-li tento výraz s funkcí v definici II v odstavci 2.1, shodují se pro $h = \theta_1$, $J = \theta_2 = \theta_3$. V části 2 byl totiž uvažován izotropní model, kde vertikální a horizontální interakce jsou stejné. Zde však budeme pracovat s obecnějším modelem, který připouští anizotropii.

Poznámka 5. Kdybychom chtěli dostat přesně izotropní model, vzali bychom $p = 2$ a bázi

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_1(x_V) &= x_{(0,0)} \\ \tilde{\Phi}_2(x_V) &= x_{(0,0)} (x_{(0,1)} + x_{(1,0)}).\end{aligned}$$

□

Poznámka 6. Snadno ověříme, že podmínka identifikovatelnosti je splněna. Využijme Poznámku 3 a předpokládejme, že $\Pi_{\{0\}}^\theta(\cdot|\cdot) = \Pi_{\{0\}}^\beta(\cdot|\cdot)$. Nyní při $x_{(0,1)} + x_{(-1,0)} = 0$ a současně $x_{(0,1)} + x_{(0,-1)} = 0$ dostaneme

$$\frac{\exp\{\theta_1 x_{(0,0)}\}}{2 \cosh\{\theta_1\}} = \frac{\exp\{\beta_1 x_{(0,0)}\}}{2 \cosh\{\beta_1\}}$$

a odtud $\theta_1 = \beta_1$. Podobně dostaneme i ostatní rovnosti a tudíž $\theta = \beta$.

□

Pro maximálně pseudověrohodný odhad zvolme pro jednoduchost $\Lambda_0 = \{0\}$. Potom pro pozorovací oblast V_n dostaneme $V_n(\Lambda_0) = V_n(\{0\}) = \{t; \bar{t} \subset V_n\}$.

Hypotéza $H_0 : h = 0$, jak byla formulována v části 2.3, může být přepsána v podobě

$$H_0 : \theta \in \Theta_0,$$

kde $\Theta_0 = \{\theta \in R^3; \theta_1 = 0\}$, tedy $q = 1$.

Na základě pozorovaných dat $\hat{x}_{V_n} \in \{-1, 1\}^{V_n}$ získáme odhady $\hat{\theta}^{n, \{0\}}$ resp. $\hat{\theta}_0^{n, \{0\}}$ pomocí procedury popsané v odstavcích 3.2 a 3.3. A do vzorečků pro matice $A(\theta)$ resp. $B(\theta)$ dosadíme

$$\begin{aligned}\nabla \log \Pi_{\{t\}}^\theta(x_t|x_{\partial t}) &= (x_t - z(t, \theta)) y_t \\ \nabla^2 \log \Pi_{\{t\}}^\theta(x_t|x_{\partial t}) &= (1 - z(t, \theta)^2) y_t y_t^T\end{aligned}$$

kde

$$y_t = \begin{pmatrix} 1 \\ x_{t+(0,1)} + x_{t-(0,1)} \\ x_{t+(1,0)} + x_{t-(1,0)} \end{pmatrix}$$

a

$$\begin{aligned}z(t, \theta) &= E^{P^\theta}[x_t|x_{\partial t}] = \Pi_{\{t\}}^\theta(1|x_{\partial t}) - \Pi_{\{t\}}^\theta(-1|x_{\partial t}) = \\ &= \operatorname{tgh}(\theta_1 + \theta_2(x_{t+(0,1)} + x_{t-(0,1)}) + \theta_3(x_{t+(1,0)} + x_{t-(1,0)})).\end{aligned}$$

Všechny výpočty jsou poměrně snadno numericky realizovatelné.

5. PŘÍKLAD

Zkoušeli jsme účinnost testu pomocí simulovaných dat. Pro simulaci jsme použili metodiku MCMC (Markov Chain Monte Carlo), jmenovitě Gibbsův sampler (viz např. Winkler (1995)). Abychom ověřili použitelnost asymptotických výsledků na konečné rozsahy výběru, volili jsme postupně

$$\text{I. } V_n = 50 \times 50 \quad \text{II. } V_n = 100 \times 100 \quad \text{III. } V_n = 200 \times 200.$$

Pro každou hodnotu parametru jsme opakovali experiment 100 krát. V následujících tabulkách jsou uvedeny četnosti zamítnutí hypotézy H_0 na hladině 5% při některých hodnotách parametru. V tabulce 1 zůstává fixní hodnota $\theta_1 = h = 0$, mění se pouze parametr $\theta_2 = \theta_3 = J$. Hypotéza by tedy zamítána být neměla (očekávaný počet zamítnutí by neměl překročit 5). V tabulce 2 zůstane fixní hodnota $\theta_2 = \theta_3 = J = 0,5$ a mění se parametr $\theta_1 = h$. Hypotéza by neměla být zamítána pro $h = 0$ a naopak měla být zamítána pro $h > 0$.

	$J = 0$	0,25	0,5	0,75	1	1,25
$V_n = 50 \times 50$	0	0	0	0	3	25
100×100	0	0	0	0	0	17
200×200	0	0	0	0	0	6

Tabulka 1: $\theta_1 = h = 0$, $\theta_2 = \theta_3 = J$

	$h = 0$	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
$V_n = 50 \times 50$	0	13	88	90	100	100
100×100	0	67	100	100	100	100
200×200	0	99	100	100	100	100

Tabulka 2: $\theta_1 = h$, $\theta_2 = \theta_3 = J = 0,5$

Z výsledků vidíme, že metoda funguje i po překročení kritické hodnoty $J_c \doteq 0.44$. A to tak, že zřejmě naprosto bezpečně pro dostatečný rozsah výběru 200×200 . Chyby v obou tabulkách jsou způsobeny různými důvody. V tabulce 1 se zdá, že interakce $J = 1,25$ je již natolik silná, že dochází k velkým nepřesnostem už při simulaci (připomeňme, že metoda MCMC je pouze přibližná). V tabulce 2 zřejmě nastává klasický efekt nedostatečného datového souboru: pro slabé vnější pole není rozsah 50×50 dostatečně velký, aby byla hypotéza o jeho absenci zamítnuta.

Poznámka 7. Efekt fázových přechodů (a tudíž nenulové střední hodnoty při $h = 0$) se může při simulaci docílit volbou okrajové podmínky, tj. fixní konfigurace na “hranici” množiny V_n . Volbou konstantní okrajové podmínky generovaná data vykazovala empirické střední hodnoty až v rozsahu $\pm 0,3$. Přesto i takové vychýlení ve prospěch $+1$ nebo -1 nemá vliv na účinnost metody, jak ukázaly dodatečné experimenty. Výše uvedené výsledky byly spočteny při datech generovaných s náhodnou okrajovou podmínkou, kde byly výchyly přirozeně menší, maximálně $\pm 0,1$.

LITERATURA

- [1] Besag J. (1975): Statistical analysis of non-lattice data. *The Statistician* 24, 179–195.
- [2] Comets F. (1992): On consistency of a class of estimators for exponential families of Markov random fields on a lattice. *Ann. Statist.* 20, 455–468.
- [3] Comets F., Janžura M. (1998): A central limit theorem for conditionally centred random fields with an application to Markov fields. *J. Appl. Prob.* 35, 608–621.
- [4] Ellis R. S. (1985): *Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics*. Springer–Verlag, New York.

- [5] Georgii H. O. (1988): Gibbs Measures and Phase Transitions. Berlin, De Gruyter.
- [6] Janžura M. (1987): Large deviations theorem for Gibbs random fields: In: Proc. 5th Pannonian Symp. on Math. Statist. (W. Grossmann, J. Mogyorodi, I. Vincze and W. Wertz, eds.), Akadémiai Kiadó, Budapest 1987, pp. 97–112.
- [7] Janžura M. (1997): Asymptotic results in parameter estimation for Gibbs random fields. Kybernetika 33, 2, 133–159.
- [8] Janžura M. (1999a): A central limit theorem for conditionally centred random fields with an application to testing statistical hypotheses. To appear in: Proceedings of Colloquium on Limit Theorems in Probability and Statistics, Hungary 1999.
- [9] Janžura M. (1999b): On the concept of asymptotic Rényi distances for random fields. Kybernetika 5, 3, 353–366.
- [10] Winkler G. (1995): Image Analysis. Random Fields and Dynamic Monte Carlo Methods. Springer-Verlag, Berlin.
- [11] Younes L. (1988): Estimation and annealing for Gibbsian fields. Ann. Inst. Henri Poincaré 24, 2, 269–294.

ÚTIA AV ČR, POD VODÁRENSKOU VĚŽÍ 4, 182 08 PRAHA 8
E-MAIL: janzura@utia.cas.cz

ODHAD BODU VZNIKU KVADRATICKÉHO TRENDU

DANIELA JARUŠKOVÁ

ABSTRAKT. The problem of least squares method estimation of the parameter τ^* in the regression model

$$Y_i = \beta^*(i/n - \tau^*)_+ + \gamma^*(i/n - \tau^*)_+^2 + e_i$$

is considered. Supposing $\gamma^* \neq 0$ and $\tau^* \in (0, 1)$ it is shown that the distribution of $(\hat{\tau} - \tau^*)$ is largely affected by the value of β^* . In the case $\beta^* \neq 0$ the variable $\sqrt{n}(\hat{\tau} - \tau^*)$ is asymptotically normally distributed whereas in the case $\beta^* = 0$ the variable $\sqrt{n}(\hat{\tau} - \tau^*)^2$ has the same distribution as $\max(0, Z)$ where Z has a zero mean normal distribution.

The problem of least squares method estimation of the parameter τ^* in the regression model

$$Y_i = \beta^*(i/n - \tau^*)_+ + \gamma^*(i/n - \tau^*)_+^2 + e_i$$

is considered. Supposing $\gamma^* \neq 0$ and $\tau^* \in (0, 1)$ it is shown that the distribution of $(\hat{\tau} - \tau^*)$ is largely affected by the value of β^* . In the case $\beta^* \neq 0$ the variable $\sqrt{n}(\hat{\tau} - \tau^*)$ is asymptotically normally distributed whereas in the case $\beta^* = 0$ the variable $\sqrt{n}(\hat{\tau} - \tau^*)^2$ has the same distribution as $\max(0, Z)$ where Z has a zero mean normal distribution.

Резюме: Уважается проблема оценивания параметра τ^* в модели линейной регрессии

$$Y_i = \beta^*(i/n - \tau^*)_+ + \gamma^*(i/n - \tau^*)_+^2 + e_i$$

при использовании метода наименьших квадратов. Показывается, что предполагая $\gamma^* \neq 0$ и $\tau^* \in (0, 1)$, значение параметра β^* имеет большое влияние на распределение $(\hat{\tau} - \tau^*)$. В случае когда $\beta^* \neq 0$, потом $(\hat{\tau} - \tau^*)$ имеет асимптотически нормальное распределение. Наоборот, когда $\beta^* = 0$, потом $(\hat{\tau} - \tau^*)$ обладает тем же распределением как $(0, Z)$, где Z следует нормальное распределение с нулевым средним.

1. ÚVOD

V praxi občas narazíme na problém, kde se lineární závislost v neznámém časovém okamžiku změně v závislost kvadratickou. Sledujeme-li například u jistých typů slitin závislost napětí Y na zatížení X , ukazuje se, že při malém zatížení je zvyšování napětí lineární (elastická oblast), zatímco po překročení určitého kritického zatížení se mění kvadraticky (quasielastická oblast), tj. $Y = f(X)$, kde

$$f(x) = p + qx + \beta^*(x - \tau^*)_+ + \gamma^*(x - \tau^*)_+^2,$$

při označení $a_+ = \max(0, a)$.

V našem článku si poněkud zjednodušíme situaci tím, že budeme předpokládat, že parametry p a q jsou známé, a tedy je bez újmy na obecnosti můžeme položit rovny nule. Dále budeme předpokládat, že veličina X je měřena v equidistantních vzdálenostech $\Delta, 2\Delta, \dots, n\Delta$, a tudíž ji lze transformovat na veličinu nabývající

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62F12.

Klíčová slova. Detekce bodu změny (change-point problem), nelineární regrese, odhady.

Práce byla částečně podporována granty GAČR 201/00/0769 a MSM 210000001.

hodnot $1/n, 2/n, \dots, 1$, to jest veličinu, která nabývá hodnot pouze v intervalu $[0, 1]$. Jestliže předpokládáme aditivní vliv náhodných chyb $\{e_i\}$ na naměřené hodnoty nezávisle proměnné Y , dospíváme k regresnímu modelu

$$(1) \quad Y_i = \beta^* (i/n - \tau^*)_+ + \gamma^* (i/n - \tau^*)_+^2 + e_i,$$

kde β^*, γ^* a τ^* jsou neznámé parametry.

Pro jednoduchost předpokládejme, že náhodné chyby $\{e_i\}$ jsou nezávislé stejně rozdělené s rozdělením $N(0, \sigma^2)$, kde σ^2 je známé, a tudíž opět bez újmy na obecnosti můžeme položit $\sigma^2 = 1$.

Úlohou, kterou se budeme zabývat, je odhad neznámých parametrů β^*, γ^* a τ^* . Především nás bude zajímat odhad parametru τ^* , který se nazývá bod změny. Budeme předpokládat, že $\tau^* \in (0, 1)$. Parametr β^* odpovídá první derivaci zprava a $2\gamma^*$ druhé derivaci zprava regresní funkce v bodě τ^* .

Vzhledem k normalitě chyb $\{e_i\}$ lze maximálně věrohodné odhady získat metodou nejmenších čtverců.

2. BODOVÝ ODHAD PARAMETRŮ

Model (1) je speciálním modelem nelineární regrese, kterému se někdy říká semilineární model, viz Knowles et al. (1991). Kdybychom totiž znali hodnotu τ parametru τ^* , tj. $\tau^* = \tau$, pak by model (1) byl modelem lineární regrese s dvěma vysvětlujícími proměnnými, tj. lineární model s maticí plánu experimentu

$$\mathbf{X}_n(\tau) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \\ \frac{[n\tau]+1}{n} - \tau & \left(\frac{[n\tau]+1}{n} - \tau\right)^2 \\ \frac{[n\tau]+2}{n} - \tau & \left(\frac{[n\tau]+1}{n} - \tau\right)^2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 - \tau & (1 - \tau)^2 \end{pmatrix}.$$

Označme

$$(\tilde{\beta}_\tau, \tilde{\gamma}_\tau)^T = (\mathbf{X}_n^T(\tau)\mathbf{X}_n(\tau))^{-1}\mathbf{X}_n^T(\tau)\mathbf{Y},$$

kde $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$, a

$$S_n(\tau, \beta, \gamma) = \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \left(\beta(i/n - \tau)_+ + \gamma(i/n - \tau)_+^2 \right) \right)^2.$$

Pak

$$S_n(\hat{\tau}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) = \min_{\beta, \gamma, \tau \in (0,1)} S_n(\tau, \beta, \gamma) = \min_{\tau \in (0,1)} S_n(\tau, \tilde{\beta}_\tau, \tilde{\gamma}_\tau).$$

Nejčastějším numerickým postupem pro nalezení přibližných hodnot odhadů $\hat{\tau}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$ spočívá v tom, že pro hodnoty τ z dosti husté mříže bodů T v intervalu $(0,1)$ počítáme residuální součet čtverců $S_n(\tau, \tilde{\beta}_\tau, \tilde{\gamma}_\tau)$ a pak hledáme $\min_{\tau \in T} S_n(\tau, \tilde{\beta}_\tau, \tilde{\gamma}_\tau)$.

Statistik se však obvykle nespokojí s bodovým odhadem neznámých parametrů, ale zajímá se též o intervaly spolehlivosti, respektive oblasti spolehlivosti.

3. OBLASTI SPOLEHLIVOSTI V NELINEÁRNÍ REGRESI

Uvažujme obecný model nelineární regrese s k - rozměrným vektorem parametrů $\boldsymbol{\theta}^* = (\theta_1^*, \dots, \theta_k^*)^T$

$$Y_i = f_i(\boldsymbol{\theta}^*) + e_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

kde $\{f_i(\cdot)\}$ jsou známé funkce a $\{e_i\}$ jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny s rozdělením $N(0, 1)$.

Označme $S_n(\boldsymbol{\theta}) = \sum (Y_i - f_i(\boldsymbol{\theta}))^2$ a $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ odhad $\boldsymbol{\theta}^*$ metodou nejmenších čtverců, tj. $S_n(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \min_{\theta_1, \dots, \theta_k} \sum (Y_i - f_i(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k))^2$. Dále označme $(\tilde{\theta}_2(\theta_1), \dots, \tilde{\theta}_k(\theta_1))$ odhad metodou nejmenších čtverců při pevné hodnotě prvního parametru rovnajícího se θ_1 , tj. $S_n(\theta_1, \tilde{\theta}_2(\theta_1), \dots, \tilde{\theta}_k(\theta_1)) = \min_{\theta_2, \dots, \theta_k} \sum (Y_i - f_i(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k))^2$.

Užívané konfidenční oblasti pro celý vektor parametrů $\boldsymbol{\theta}$ jsou obvykle dvou typů:

- 1 a) $\{\boldsymbol{\theta}, (\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})^T \mathbf{A} (\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}) < C_1\}$, kde \mathbf{A} je nějaká symetrická matice,
- 2 a) $\{\boldsymbol{\theta}, S_n(\boldsymbol{\theta}) < S_n(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + C_2\}$.

První oblast je eliptická, zatímco druhá může mít naprosto obecný tvar a může být dokonce nesouvislá. Druhé oblasti se někdy říká exaktní, neboť je odvozena přímo z poměru věrohodnosti.

Analogické konfidenční oblasti pro jeden parametr, řekněme θ_1 , mají tvar:

- 1 b) $\{\theta_1, |\theta_1 - \hat{\theta}_1| < K_1\}$,
- 2 b) $\{\theta_1, S_n(\theta_1, \tilde{\theta}_2(\theta_1), \dots, \tilde{\theta}_k(\theta_1)) < S_n(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + K_2\}$.

Konstanty C_1, C_2 , resp. K_1, K_2 , jsou obvykle odvozeny z asymptotického rozdělení $\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}^*$ a $S_n(\hat{\boldsymbol{\theta}}) - S_n(\boldsymbol{\theta}^*)$, resp. $\hat{\theta}_1 - \theta_1^*$ a $S_n(\hat{\boldsymbol{\theta}}) - S_n(\theta_1^*, \tilde{\theta}_2(\theta_1^*), \dots, \tilde{\theta}_k(\theta_1^*))$.

Je-li splněna celá řada podmínek, viz například podmínky A(1), ..., A(9) nebo B(1), ..., B(8) v knize Seber & Wild (1989), kapitola 12, pak $\sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}^*)$ má asymptoticky normální rozdělení. Většinou mezi tyto podmínky patří existence spojitých prvních i druhých parciálních derivací $\frac{\partial f_i(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_r}$ a $\frac{\partial^2 f_i(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_r \partial \theta_s}$, $i = 1, \dots, n$, $r, s = 1, \dots, k$, na nějakém okolí správné hodnoty $\boldsymbol{\theta}^*$. Navíc se předpokládá, že matice $\frac{1}{n}(\mathbf{F}_n(\boldsymbol{\theta}))^T (\mathbf{F}_n(\boldsymbol{\theta}))$, kde

$$\mathbf{F}_n(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial \theta_k} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial \theta_k} \end{pmatrix},$$

konverguje stejnoměrně na nějakém okolí $\boldsymbol{\theta}^*$ k nesingulární matici $\mathbf{G}(\boldsymbol{\theta})$. Matice $\mathbf{G}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^*)$ je pak limitní varianční maticí vektoru $\sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}^*)$.

4. OBLASTI SPOLEHLIVOSTI V MODELU (1)

Je patrné, že v modelu (1) nemá regresní funkce vzhledem k parametru τ^* již ani první derivaci. Přesto se však dá ukázat, že v případě, že $\beta^* \neq 0$, $\gamma^* \neq 0$ a $\tau^* \in (0, 1)$, má $\sqrt{n}(\hat{\tau} - \tau^*, \hat{\beta} - \beta^*, \hat{\gamma} - \gamma^*)$ asymptoticky normální rozdělení se symetrickou varianční maticí \mathbf{G}^{-1} , kde

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \beta^{*2}(1-\tau^*) + 4\beta^*\gamma^*\frac{(1-\tau^*)^2}{2} + 4\gamma^{*2}\frac{(1-\tau^*)^3}{3} & \dots & \dots \\ -\beta^*\frac{(1-\tau^*)^2}{2} - 2\gamma^*\frac{(1-\tau^*)^3}{3} & \frac{(1-\tau^*)^3}{3} & \dots \\ -\beta^*\frac{(1-\tau^*)^3}{3} - 2\gamma^*\frac{(1-\tau^*)^4}{4} & \frac{(1-\tau^*)^4}{4} & \frac{(1-\tau^*)^5}{5} \end{pmatrix}$$

Zřejmě $\mathbf{G} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \mathbf{F}_n^{*T} \mathbf{F}_n^*$, kde

$$\mathbf{F}_n^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 \\ -\beta^* - 2\gamma^* \left(\frac{[n\tau^*]+1}{n} - \tau^* \right) & \frac{[n\tau^*]+1}{n} - \tau^* & \left(\frac{[n\tau^*]+1}{n} - \tau^* \right)^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ -\beta^* - 2\gamma^*(1-\tau^*) & 1-\tau^* & (1-\tau^*)^2 \end{pmatrix}$$

K důkazu lze použít stejný postup, který použila Hušková (1998) pro jednodušší model typu

$$(2) \quad Y_i = \beta^* (i/n - \tau^*)_+ + e_i,$$

a který spočívá v tom, že na okolí správné hodnoty aproximujeme funkci nejmenších čtverců kvadratickou funkcí. Speciálně ukázala, že na okolí bodu τ^* lze aproximovat

$$S_n(\tau, \tilde{\beta}_\tau) - S_n(\tau^*, \tilde{\beta}_{\tau^*})$$

funkcí

$$-C n (\tau - \tau^*)^2 + 2 X \sqrt{n} (\tau - \tau^*),$$

kde X/C má normální rozdělení $N(0, 1/C)$.

Jiný postup použil Feder (1975), který modely (1) i (2) považuje za speciální případy regresní funkce

$$\begin{aligned} f(x, \boldsymbol{\theta}) &= f_1(x, \boldsymbol{\theta}_1) \quad \text{pro } 0 \leq x \leq \tau^* \\ &= f_2(x, \boldsymbol{\theta}_2) \quad \text{pro } \tau^* \leq x \leq 1, \end{aligned}$$

kde $f_i(x, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{j=1}^{K(i)} \theta_{ij} f_{ij}(x)$. Za přípustnou množinu parametrů Θ pak uvažuje jen takové parametry, při kterých se funkce $f_1(x, \boldsymbol{\theta}_1)$ a $f_2(x, \boldsymbol{\theta}_2)$ protínají uvnitř intervalu $(0,1)$. Ukazuje, že limitní rozdělení $\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}^*$ závisí na tom, zda $\boldsymbol{\theta}^*$ je vnitřním nebo krajním bodem množiny Θ . Parametr τ^* pak odhaduje jako průsečík funkcí $f_1(x, \hat{\boldsymbol{\theta}}_1)$ a $f_2(x, \hat{\boldsymbol{\theta}}_2)$. Řád konvergence $\hat{\tau}$ k τ^* závisí na tom, v kolika derivacích se shodují funkce $f_1(x, \boldsymbol{\theta}^*)$ a $f_2(x, \boldsymbol{\theta}^*)$ v bodě τ^* .

V případě modelu (1) s $\beta^* \neq 0$, $\gamma^* \neq 0$ a $\tau^* \in (0, 1)$ lze z přístupů Huškové (1998) i Federa (1975) odvodit asymptotickou normalitu $(\hat{\tau} - \tau^*, \hat{\beta} - \beta^*, \hat{\gamma} - \gamma^*)$. Speciálně platí

$$(3) \quad \sqrt{n} (\hat{\tau} - \tau^*) \sim N\left(0, \frac{9}{\beta^{*2}(1-\tau^*)}\right)$$

a $S_n(\tau^*, \tilde{\beta}_{\tau^*}, \tilde{\gamma}_{\tau^*}) - S_n(\hat{\tau}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})$ má asymptoticky χ^2 rozdělení o 1 stupni volnosti.

Všimněme si, že asymptotický rozptyl odhadu $\hat{\tau}$, viz (3), závisí na poloze τ^* , což je jakási globální vlastnost regresní funkce. Je přirozené, že parametr τ^* lépe

odhadneme, máme-li možnost pozorovat kvadratický trend delší dobu. Dále však je asymptotický rozptyl $\hat{\tau}$, a tedy i délka intervalu spolehlivosti typu 2 a), ovlivněna první derivací kvadratické funkce v bodě τ^* , což je lokální vlastnost regresní funkce.

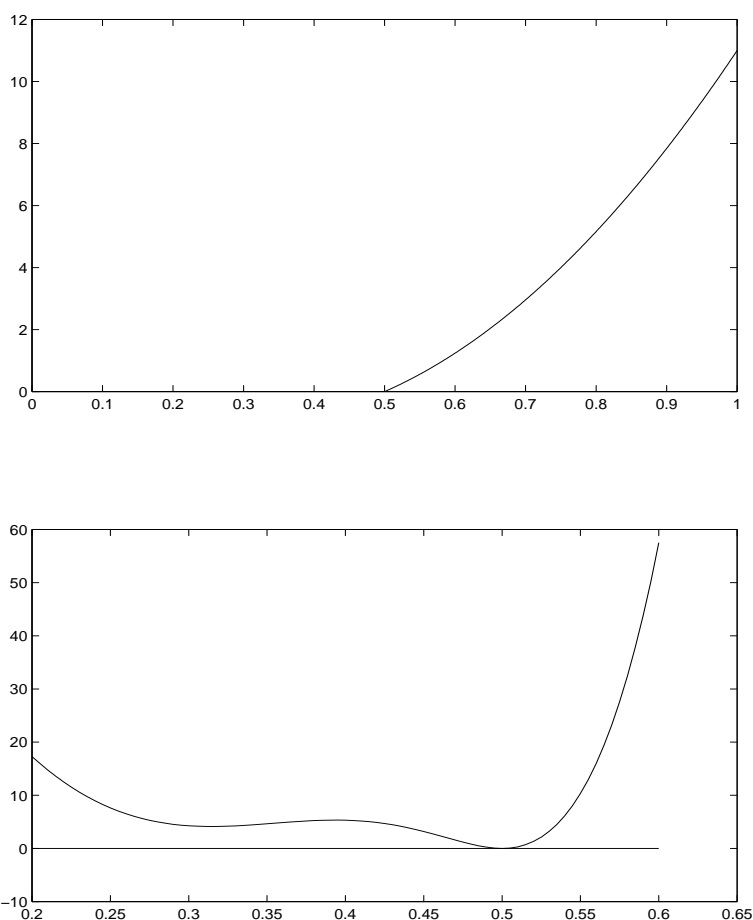
Je-li β^* malé, můžeme (použijeme-li postup 1 b)) dostat pro konečná n dokonce interval spolehlivosti, jehož krajní body leží mimo interval $(0, 1)$. V teorii nelineární regrese se tento jev nazývá špatná podmíněnost. Špatná podmíněnost je způsobena tvarem regresní funkce.

Horní část obrázku 1 představuje regresní funkci

$$(4) \quad f(x, \tau^*, \beta^*, \gamma^*) = \beta^*(x - \tau^*)_+ + \gamma^*(x - \tau^*)_+^2$$

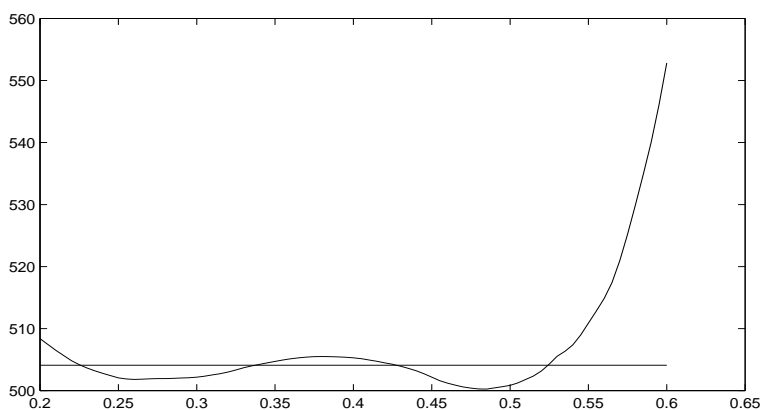
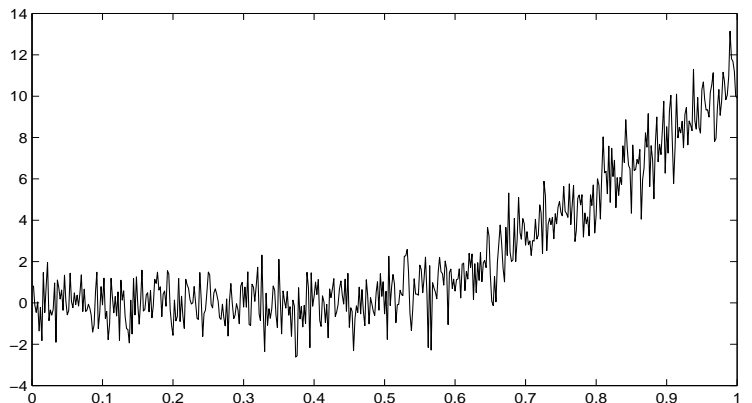
pro $\tau^* = 0.5$, $\beta^* = 10$ a $\gamma^* = 24$ a dolní část obrázku zobrazuje odpovídající funkci nejmenších čtverců $B_n(\tau, \tau^*)$ pro $n = 500$ a $\tau \in (0.2, 0.6)$ za předpokladu, že model neobsahuje žádné chyby, tj.

$$B_n(\tau, \tau^*) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(f\left(\frac{i}{n}, \tau, \tilde{\beta}_\tau, \tilde{\gamma}_\tau\right) - f\left(\frac{i}{n}, \tau^*, \tilde{\beta}_{\tau^*}, \tilde{\gamma}_{\tau^*}\right) \right)^2.$$



Obrázek 1

Jestliže uvažujeme model (1) s regresní funkcí (4) včetně náhodných chyb, pak může funkce nejmenších čtverců a 95% oblast spolehlivosti typu 2 b) vypadat například jako na obrázku 2.



Obrázek 2

Ačkoliv k tomu nemáme žádný teoretický důvod doporučujeme ze zkušeností používat spíše oblast spolehlivosti typu 2 b), kde K_2 je příslušný kvantil χ^2 - rozdělení o 1 stupni volnosti. V každém případě doporučujeme vždy při statistické analýze vykreslit průběh funkce $S_n(\tau, \tilde{\beta}_\tau, \tilde{\gamma}_\tau)$.

V krajním případě, kde $\beta^* = 0$, $\gamma^* \neq 0$ a $\tau^* \in (0, 1)$, lze ukázat, že v okolí bodu τ^* lze rozdíl funkcí čtverců

$$S_n(\tau, \tilde{\beta}_\tau, \tilde{\gamma}_\tau) - S_n(\tau^*, \tilde{\beta}_{\tau^*}, \tilde{\gamma}_{\tau^*})$$

aproximovat funkcí

$$-C n (\tau - \tau^*)^4 + 2 X \sqrt{n} (\tau - \tau^*)^2,$$

kde $X/C \sim N(0, 1/C)$ a $C = \gamma^{*2} (1 - \tau^*)/9$. Je zřejmé, že funkce

$$-C x^2 (x^2 - 2 X/C)$$

nabývá maxima v nule, pokud X je záporné, a hodnoty X/C , pokud X je kladné. Odtud vyplývá, že $\sqrt{n}(\hat{\tau} - \tau^*)^2$ má asymptoticky stejné rozdělení jako $\max(0, Z)$, kde veličina Z má normální rozdělení

$$(5) \quad Z \sim N\left(0, \frac{9}{\gamma^{*2}(1 - \tau^*)}\right).$$

Výsledek (5) lze použít pro konstrukci symetrického intervalu spolehlivosti 2 a). Můžeme též zkonstruovat oblast typu 2b) s využitím toho, že $S_n(\tau^*, \tilde{\beta}_{\tau^*}, \tilde{\gamma}_{\tau^*}) - S_n(\hat{\tau}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})$ má asymptoticky stejné rozdělení jako $(\max(0, Y))^2$, kde Y má standardní normální rozdělení.

Pro zajímavost uvedme, že pokud odhadujeme parametr τ^* v modelu

$$Y_i = \gamma^*(i/n - \tau^*)_+^2 + e_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

pak $\sqrt{n}(\hat{\tau} - \tau^*)$ má asymptoticky normální rozdělení $N\left(0, 12/(\gamma^{*2}(1 - \tau^*)^3)\right)$. Odtud je zřejmé, že informace, zda-li je první derivace v bodě změny nulová, je při odhadování tohoto bodu velmi velmi důležitá.

LITERATURA

- Feder P. J. (1975). *On asymptotic distribution theory in segmented regression problems - identified case*. The Annals of Statistics **3**, 49–63.
- Hušková M. (1998). *Estimators in the location model with gradual changes*. Comment. Math. Univ. Carolinae **39**, 147–157.
- Knowles M., Siegmund D. a Zhang H. (1991). *Confidence regions in semilinear regression*. Biometrika **78**, 1991, 15–31.
- Seber G. A. F. a Wild C. J. (1989). *Nonlinear regression*. J. Wiley, New York.

ČVUT v PRAZE, STAVEBNÍ FAKULTA, KATEDRA MATEMATIKY, THÁKUROVA 7, 166 29 PRAHA 6
E-MAIL: jarus@mat.fsv.cvut.cz

VYUŽITÍ DVOUROZMĚRNÉHO PŘÍMÉHO AGLOMERATIVNÍHO SHLUKOVÁNÍ PRO ANALÝZU IMUNITNÍ ODPOVĚDI REKOMBINANTNÍCH KONGENNÍCH KMENŮ

IGOR KÁRNÍK A MARIE LIPOLDOVÁ

ABSTRAKT. Various components of the immune response are controlled by multiple genes. We have used a special tool for genetic analysis of these multigenically-controlled biological traits: the Recombinant Congenic Strains (RCS). The series of RCS comprises homozygous mouse strains. Each RC strain of OcB / Dem Series contains a different, random, set of about 12.587.5 used at least 10 mice from each strain (total number 200 č 300 mice). One task of the statistical analysis was to establish whether RC strains statistically differ in immune response to different factors (e.g. alloantigens or infection by *Leishmania major*). We have used mainly MANOVA with mixed effects, in some cases we have also used MANCOVA. Another studied question was to find similarity between individual Recombinant Congenic Strains. We have used agglomerative methods of hierarchical cluster analysis (mainly complete linkage and Ward method) and the direct two-way cluster analysis. This paper describes this interesting method and gives examples of some practical applications. This work was supported by grants NM/28-3 and OK 394 from the Ministry of Health and the Ministry of Education of the Czech Republic, respectively. We have used programmes STATGRAPHICS PLUS 7, SPSS 8.01, and STATISTICA 4.3 (for two-way direct cluster).

Абстракт. В этой статье изучается кластер анализ для статистического контроля в генетике.

1. VĚCNÝ ÚVOD DO PROBLEMATIKY

Většina důležitých civilizačních chorob (hypertenze, diabet, alergie, duševní onemocnění) jsou polygenně kontrolovány, to znamená, že jejich vznik je ovlivněn mnoha různými geny. K jejich studiu používáme nový genetický model, speciálně připravený pro analýzu polygenně kontrolovaných biologických znaků, rekombinantní kongenní kmeny (RCS) (Demant and Hart, 1986). V tomto systému je křížením dvou rodičovských kmenů připravena série 20 homozygotních RCS. Jeden rodičovský kmen slouží jako kmen základní, druhý je dárce genetického materiálu. Každý z 20 různých RCS nese asi 12.5dárce a 87.5geny dárce, které se podílejí na multigenní kontrole vnímavosti k onemocnění, rozděleny mezi různé kmeny, kde mohou být studovány odděleně. Systém RCS tak převádí rozdíl v mnoha genech mezi dárce a základním kmenem na řadu rozdílů v jednom genu (nebo několika málo genech) mezi jednotlivými RCS a kmenem základním. Odlišnosti ve funkci jednoho genu pak mohou být předmětem vazebné analýzy a funkčních studií. Jednotlivé RCS jsou analogické s tzv. izolovanými populacemi, známými z lidských studií vazebného disekvilibria (Frankel and Schork, 1996). Tento systém je zvláště vhodný ke studiu infekcí, jak jsme ukázali na příkladu studia vnímavosti k parazitu *Leishmania major* (Demant et

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62P20.

Klíčová slova. Shluková analýza.

Práce na tomto článku byla financována z grantů IGA MZ ČR NM/28 č. 3 a MŠMT OK 394.

al., 1996; Lipoldová et al., 2000). Dále jsme sledovali produkci cytokinů, proliferační odpověď stimulovanou cytokiny, mitogeny a antigeny.

Jako příklad použití dvourozměrné shlukové analýzy jsme vybrali jeden z našich experimentů, v nichž byla sledována odpověď rekombinantních kongenních kmenů série OcB/Dem k lymfocytům myších kmenů DBA/1, CBA, BALB/c a C57BL/10. Každý kmen této série nese různou kombinaci 12.5genů kmene B10.O20 a 87.5analyzovali odpověď minimálně 10 myší. Rodičovské kmeny O20 a B10.O20 se v odpovědi k těmto antigenům neliší, zatímco RCS vykazovaly značnou heterogenitu odpovědi (Havelková et al., připravovaný manuskript).

2. STATISTICKÁ ANALÝZA SE ZVLÁŠTNÍM PŘIHLÉDNUTÍM K VYUŽITÍ DVOUROZMĚRNÉHO PŘÍMÉHO CLUSTEROVÉ ANALÝZY

Úvodem poznamenejme, že do každého experimentu vstupovalo 200 č 300 myší (v námi uváděném případě jich bylo konkrétně 230). Hlavním úkolem statistické analýzy pak bylo vytipovat jednotlivé faktory, resp. jejich interakce, statisticky významně působící na odlišnosti mezi jednotlivými kmeny. Pro tuto úlohu byla použita MANOVA se smíšenými efekty (některých případech i MANCOVA). Druhým hlavním úkolem statistické analýzy pak bylo určení podobnosti mezi jednotlivými kmeny. Pro tento účel byly použity aglomerativní metody hierarchické cluster analýzy (z interpretačního hlediska se pak jako nejvhodnější ukázala metoda nejvzdálenějšího souseda a metoda Wardova). Jako reprezentanty proměnných u jednotlivých kmenů jsme převážně uvažovali aritmetické průměry těchto proměnných (v některých případech i jejich mediány).

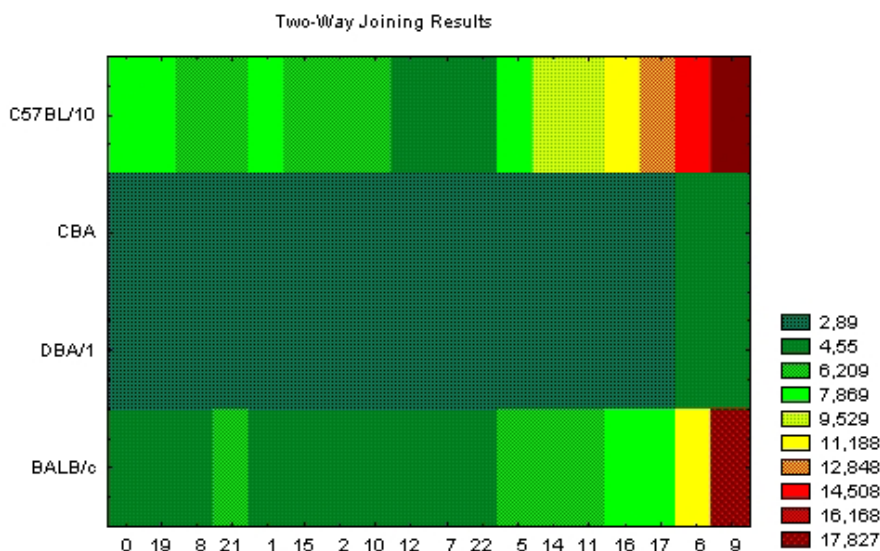
Pro clusterovou analýzu jsme používali program STATISTICA a při této příležitosti jsme se setkali s dvourozměrnou shlukovou analýzou (v originále Two č way Joining), která je popsána (pokud jsme zjistili) pouze v publikaci Hartigan (1975). Zvláštností této metody je fakt, že vytváří dvourozměrné shluky mezi řádky a sloupci datové matice. V citované práci jsou uvažovány jak divizní, tak i aglomerativní varianty této metody (autor však používá poněkud jiné terminologie). Program STATISTICA pak používá pouze aglomerativní metodu. S velmi podrobným popisem algoritmů jednotlivých metod a programů ve FORTRANu se čtenář může seznámit v citované práci na str. 251 č 298.

Uvedme však, že citovaná publikace byla vydána v roce 1975 a není orientována na grafický výstup, zatímco z interpretačního hlediska je zajímavý právě grafický výstup poskytovaný paketem STATISTICA.

Konkrétní interpretaci si ukážeme na námi uvedeném příkladě. Disponujeme výstupy jak pro všechny uvažované kmeny, tak i bez kmene OcB - 3. Interpretace je pro druhý případ. Grafický výstup je uveden v příloze. Datová matice byla uspořádána tak, že ve sloupcích byly uvedeny jednotlivé kmeny a v řádcích aritmetické průměry jednotlivých proměnných. V grafu pak jsou na ose x uvedeny čísla jednotlivých kmenů a na ose y jednotlivé proměnné. Uvažujme např. proměnnou BALB/c. Je zřejmé, že z hlediska této proměnné tvoří 1. shluk kmeny O20, OcB -19, OcB - 8, OcB - 1, OcB - 15, OcB - 2, OcB - 10, OcB - 12, OcB - 7, B10.O20. Druhý shluk je tvořen kmeny OcB - 21, OcB - 5, OcB - 14 a OcB - 11. Kmeny OcB-16 a OcB - 17 jsou sloučeny do třetího clusteru, zatímco kmeny OcB - 6 a OcB -9 tvoří samostatné shluky (tedy čtvrtý a pátý). Analogická interpretace by byla i u dalších dvourozměrných clusterů. Závěrem uvedme, že pořadí kmenů na ose x odpovídá přibližně shlukům hierarchického aglomerativního clustrování podle metody

nejvzdálenějšího souseda, či příbuzné Wardovy metody. Pro dobrou interpretaci je tedy vhodné použít hierarchického i dvourozměrného shlukování.

Tato metoda nám může podat první informaci o genetické podobnosti zkoumaných kmenů a na jejím základě můžeme lépe vybrat kmeny pro další studium. Protože kmen OcB č 9 od všech ostatních nejvíce lišil, použili jsme jej pro genetickou analýzu a identifikovali jsme lokus Alan2, který kontroluje odpověď aloantigenům C57BL/10, BALB/c a CBA (Havelková et al., v tisku).



3. ZÁVĚR

Samotným závěrem pouze poznamenejme, že přes zcela evidentní přednosti a značnou aplikabilitu, má námi předkládaná metoda i slabiny. Za největší z nich považujeme to, že de facto chybí její přesný matematický popis. Pokud je nám známo je totiž uvedena v námi citované práci Hartigan (1975), která je napsána ryze programátorským stylem. Obsahuje pouze sáhodlouhé algoritmy a programy. V Hartiganem citované literatuře k této metodě jsou uvedeny pouze odkazy na čtyři FORTRANovské subrutiny. Dále je nutno si uvědomit, že daná publikace byla vydána již v roce 1975, tedy v období velkých sálových počítačů, kdy byl rozvoj počítačové grafiky na samém počátku a neobsahuje byť i jen zmínku o grafickém výstupu zmiňované metody (viz Příloha), který je na ní beze sporu nejzajímavější. Úplným závěrem konstatujeme, že podobnou problematikou se zabývají např. práce Lefkovitch (1987), Bezdek (1987), Legendre (1987) a Pleszynska et al (1995) aj.

Příloha

Kmen 0 přitom značí kmen O20.

Kmen 22 přitom značí kmen B10.O20.

Ostatní kmeny pak OcB č Dem (kmen 19 jest identický se kmenem OcB č 19).

Pomocný slovníček

Leishmania major = parazitický prvok.

Cytokin = (růstový faktor) bílkoviny produkované buňkami, které působí na další buňky.

Mitogen = látka stimulující množení buněk.

Antigen = látka schopná vyzvat imunitní odpověď.

Proliferace = buněčný růst kdy dochází ke zmožení buněk.

Lymfocyt = typ bílých krvinek.

BALB/c, DBA, CBA, C57BL/10 = názvy myších kmenů.

Alan 2 (Alloantigen response 2) = gen, který kontroluje odpověď k aloantigenům (antigeny stejného živočišného druhu).

Literatura

- 1 Atkinson A. C. (1989). Plots, Transformations and Regression. Oxford .
- Bezdek, J. C (1987). Some non-standard Clustering Algorithms. NATO Asi Series, Vol. G14. Springer Verlag Berlin. 225 č 287
- 2 Demant P. and Hart A.A.M. (1986). Recombinat congenic strains: a new tool for analyzing genetic traits determined by more than one gene. Immunogenetics 24: 416-422.
- 3 Demant P., Lipoldová M., Svobodová M. (1996). Resistance to *Leishmania major* in mice (Technical Comment). Science 274: 1392.
- 4 Frankel W.N., Shork N.J (1996) Whos afraid of epistasis? Nature Genet. 14: 371-373.
- 5 Havelková H., Demant P., Lipoldová M. A new type of genetic regulation of alloresponse. A novel locus on mouse chromosome 4, Alan 2 controls MLC reactivity to three different alloantigens: C57BL/10, BALB/C and CBA. Genes and Immunity, 1: in press 2000.
- 6 Havelková H., Holář V., Kárník I., Demant P., Lipoldová M.: Separation of multiple non-MHC genes controlling proliferative response to alloantigens using recombinant congenic strains (připravovaný manuscript).
- 7 Hartigan J.A. (1975) Clusterig algorithms. Wiley and Sons, New York.
- 8 Hebák P., Hustopecký J., (1987): Vícerozměrné statistické metody s aplikacemi. SNTL/Alfa. Praha..
- 9 Lefkovich L.P. (1987). Species Associations and conditional clustering: clustering with or without pairwise resemblances. NATO ASI Series, Vol. G14. Springer Verlag Berlin. 309- 331.
- 10 Legendre P. (1987). Constrained Clustering. NATO ASI Series, Vol. G14. Verlag Berlin. 289 č 307.
- 11 Lipoldová M., Svobodová M., Krulová M., Havelková H., Badalová J., Nohýnková E., Holář V., Hart A.A.M., Volf P., Demant P. Susceptibility to *Leishmania major* infection in mice: multiple loci and heterogeneity of immunopathological phenotypes. Genes and Immunity 1: 200-206,2000.
- 12 Pleszczyńska E., Kowalczyk, T., Szczeny W., Cionk A. (1995). New tools Statistical Data Analysis. Biocybernetics and Biomedical engineering 15/95.

DVOUVÝBĚROVÉ PODMÍNĚNÉ POŘADOVÉ TESTY V ANALÝZE PŘEŽITÍ

LENKA KOBLÍŽKOVÁ

ABSTRAKT. The present paper deals with conditional rank tests in survival analysis for two sample problem with randomly censored data. Conditional rank tests are exact permutation tests under null hypothesis of randomness if equal censorship is included (restricted null hypothesis). Mainly their asymptotic properties are studied under this hypothesis.

Резюме. В статье изучаются условные ранговые критерии для двухвыборочной проблемы с цензурированием и даны их асимптотические свойства.

1. ÚVOD

Příspěvek pojednává o některých pořadových testech shody rozdělení dvou cenzorovaných výběrů, které se používají v analýze přežití.

Je zaměřen na testy podmíněné, které jsou založeny na vlastnostech podmíněného rozdělení příslušných statistik při pevné realizaci indikátorových veličin událostí sdruženého výběru. Na základě permutací lze určit přesné hodnoty kvantilů podmíněného rozdělení uvažovaných statistik. Dostáváme tak exaktní testové kritérium. Tento permutační test vyžaduje rovnost rozdělení dob do cenzorování obou uvažovaných výběrů.

Vážené logrankové statistiky patří do třídy zobecněných lineárních pořadových statistik a lze na ně použít již vybudovanou teorii pořadových testů pro necenzorovaná data. S ohledem na tuto skutečnost je odvozeno limitní chování podmíněného rozdělení těchto statistik za platnosti hypotézy náhodnosti a rovnosti rozdělení cenzorování (omezené nulové hypotézy). V tomto případě podmíněné rozdělení nezávisí na podmínce a testovanou hypotézu pak zamítáme nebo nezamítáme na základě kvantilů normovaného normálního rozdělení $N(0, 1)$.

2. FORMULACE PROBLÉMU A JEHO TESTOVÁNÍ

Předpokládejme dvouvýběrový model *náhodného cenzorování*, kde $T_{i1}, T_{i2}, \dots, T_{in_i}$ je náhodný výběr z nějakého rozdělení s absolutně spojitou distribuční funkcí F_i , $i = 1, 2$. Nechť oba tyto výběry *dob do selhání* jsou na sobě nezávislé.

Nechť $C_{i1}, C_{i2}, \dots, C_{in_i}$ je náhodný výběr z nějakého rozdělení s absolutně spojitou distribuční funkcí G_i , $i = 1, 2$. Nechť oba tyto výběry *dob do cenzorování* jsou na sobě nezávislé.

Dále předpokládejme, že náhodné veličiny T_{ij}, C_{ij} jsou nezávislé a $S_i = 1 - F_i$ je funkce přežití veličin T_{ij} , $j = 1, 2, \dots, n_i$, $i = 1, 2$.

Skutečnému pozorování pak odpovídá náhodný vektor $(X_{ij}, \delta_{ij})'$, $j = 1, 2, \dots, n_i$, $i = 1, 2$, kde

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62G10; Secondary 62N03.

Klíčová slova. Pořadové testy, analýza přežití, cenzorovaná data.

Tento příspěvek vznikl za přispění grantů GAČR 201/00/0769 a MSM 113200008.

$$X_{ij} = \min(T_{ij}, C_{ij}), \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & T_{ij} \leq C_{ij}, & X_{ij} \text{ necenzorováno,} \\ 0, & T_{ij} > C_{ij}, & X_{ij} \text{ cenzorováno.} \end{cases}$$

Označme $\tilde{X}_{(\cdot)} = (X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)})'$ vektor pořádkových statistik příslušný náhodnému vektoru $\tilde{X} = (X_1, X_2, \dots, X_n)' = (X_{11}, \dots, X_{1n_1}, X_{21}, \dots, X_{2n_2})'$ a necht $\tilde{\delta} = (\delta_{[1]}, \delta_{[2]}, \dots, \delta_{[n]})'$ je vektor odpovídajících indikátorových veličin událostí

$$\delta_{[j]} = \begin{cases} 1, & X_{(j)} \text{ necenzorováno,} \\ 0, & X_{(j)} \text{ cenzorováno.} \end{cases}$$

Vzhledem k tomu, že distribuční funkce F_1, F_2, G_1, G_2 jsou absolutně spojitě, nastává jev $X_{(1)} < X_{(2)} < \dots < X_{(n)}$ s pravděpodobností jedna.

Označme Y_{ij} počet objektů z i -té populace, které pozorujeme těsně před událostí v čase $X_{(j)}$, tzn. $Y_{ij} = \sum_{k=1}^{n_i} I(X_{ik} \geq X_{(j)})$. Položme $Y_j = Y_{1j} + Y_{2j} = n - j + 1$. Necht $Z_j = 1$ (0), jestliže náhodná veličina $X_{(j)}$, $j = 1, 2, \dots, n$, pochází z prvního (druhého) výběru. Položme $p_j = \frac{Y_{1j}}{Y_j}$ a $q_j = 1 - p_j$ pro $1 \leq j \leq n$.

Předmětem zájmu je testovat platnost *omezené nulové hypotézy*

$$(2.1) \quad \bar{H}_0 : F_1 = F_2 = F \text{ (neznámé), } G_1 = G_2 = G \text{ (neznámé)}$$

proti jednostranné alternativě *stochastického uspořádání*

$$(2.2) \quad K_1 : F_1(t) \geq F_2(t) \text{ pro } \forall t, \quad F_1 \neq F_2.$$

K testování výše formulované hypotézy (2.1) proti alternativě (2.2) užíváme váženou *logrankovou statistiku* T_n tvaru (viz [5], část 3, popř. viz [3], část 2)

$$(2.3) \quad T_n = T_n(\tilde{Z}, \tilde{\delta}) = \sum_{j=1}^n w_n(j) \delta_{[j]} (Z_j - p_j),$$

kde w_n je nezáporná stochastická váhová funkce. Přitom se omezíme na váhy tvaru

$$(2.4) \quad w_n(j) = \bar{w}_n(X_{(j)}) = \hat{S}^\rho(X_{(j)}-) \left(\frac{Y_j}{n}\right)^\kappa = \hat{S}^\rho(X_{(j)}-) \left(\frac{n-j+1}{n}\right)^\kappa.$$

Ve vzorci (2.4) jsou koeficienty $\rho, \kappa \geq 0$ a $\hat{S}(X_{(j)}-)$ značí tzv. *Kaplanův-Meierův odhad* (podrobněji viz [1], kapitola 3) funkce přežití $S(t)$ těsně před okamžikem $X_{(j)}$, tj.

$$(2.5) \quad \hat{S}(X_{(j)}-) = \prod_{k=1}^{j-1} \left(1 - \frac{\delta_{[k]}}{n-k+1}\right), \text{ kde } \hat{S}(X_{(1)}-) = 1.$$

V praxi se běžně používají statistiky *logranková* ($\rho = 0, \kappa = 0$), *Prenticeova-Wilcoxonova* ($\rho = 1, \kappa = 0$) a *Gehanovova-Wilcoxonova* ($\rho = 0, \kappa = 1$).

Poznámka 2.1. Volba vhodných vah je složitější problém a při jeho řešení se využívá informace o tom, z jakého rozdělení výběr pochází (podrobněji viz [1], oddíl 7.4).

Ze vztahů (2.4) a (2.5) vyplývá, že váhová funkce $w_n(j)$ závisí pouze na indikátorových veličinách $\delta_{[1]}, \delta_{[2]}, \dots, \delta_{[j-1]}$ a $p_j, q_j = 1 - p_j$ závisí pouze na Z_1, Z_2, \dots, Z_{j-1} :

$$(2.6) \quad p_j = \frac{Y_{1j}}{Y_j} = \frac{\sum_{k=1}^{n_1} I(X_{1k} \geq X_{(j)})}{n-j+1} = \frac{n_1 - \sum_{k=1}^{j-1} Z_k}{n-j+1}.$$

Tedy statistika T_n definovaná v (2.3) závisí pouze na vektoru $\tilde{Z} = (Z_1, Z_2, \dots, Z_n)'$ a vektoru $\tilde{\delta} = (\delta_{[1]}, \delta_{[2]}, \dots, \delta_{[n]})'$.

K myšlence podmíněných testů se dostáváme přes následující tvrzení.

Tvrzení 2.1. *Za platnosti omezené nulové hypotézy \bar{H}_0 jsou náhodné vektory $\tilde{\delta}$ a \tilde{Z} nezávislé a náhodný vektor \tilde{Z} má rozdělení jako náhodný výběr bez vracení z populace obsahující n_1 jedniček a n_2 nul.*

Důkaz. Tvrzení lze nalézt v [5], str. 1765, lemma 3.1. \square

Podmíněný test je sestaven ve dvou krocích:

- (1) Na základě pozorování $(x_1, \delta_1^o), \dots, (x_n, \delta_n^o)$ určíme $\tilde{\delta}^o = (\delta_{[1]}^o, \delta_{[2]}^o, \dots, \delta_{[n]}^o)'$.
- (2) Spočteme hodnotu statistiky T_n pro pozorovaná data podle vzorce (2.3) a uijeme rozhodovacího kritéria pro pevné $\tilde{\delta}^o$:

$$\varphi_{n, \tilde{\delta}^o}(\tilde{z}) = \begin{cases} 1, & T_n(\tilde{z}, \tilde{\delta}^o) > c_n(\alpha, \tilde{\delta}^o), \\ \gamma(\alpha, \tilde{\delta}^o), & T_n(\tilde{z}, \tilde{\delta}^o) = c_n(\alpha, \tilde{\delta}^o), \\ 0, & T_n(\tilde{z}, \tilde{\delta}^o) < c_n(\alpha, \tilde{\delta}^o), \end{cases} \quad \gamma(\alpha, \tilde{\delta}^o) \in [0, 1],$$

kde $c_n(\alpha, \tilde{\delta}^o)$ je $(1 - \alpha)$ -kvantil podmíněného rozdělení $\mathcal{L}(T_n(\tilde{Z}_g, \tilde{\delta}) | \tilde{\delta} = \tilde{\delta}^o)$.

Přičemž \tilde{Z}_g je náhodný vektor, který obsahuje právě n_1 jedniček a n_2 nul a nabývá každé permutace n_1 jedniček a n_2 nul se stejnou pravděpodobností $1/\binom{n}{n_1}$. Z tvrzení 2.1 dostáváme, že za platnosti \bar{H}_0 je $\mathcal{L}(\tilde{Z}) = \mathcal{L}(\tilde{Z}_g)$.

Při malých hodnotách n lze stanovit podmíněné rozdělení pravděpodobností statistiky T_n tak, že pro každou hodnotu $T_n = t$ stanovíme počet permutací k_t k ní vedoucích, tzn. $P_{\bar{H}_0}(T_n = t | \tilde{\delta} = \tilde{\delta}^o) = k_t / \binom{n}{n_1}$. Odtud určíme kvantil $c_n(\alpha, \tilde{\delta}^o)$.

Poznámka 2.2. Podmíněný test $\varphi_{n, \tilde{\delta}^o}$ patří mezi tzv. testy permutační (podrobněji viz [2], str. 42–45).

Výše zmíněný způsob výpočtu kvantilu $c_n(\alpha, \tilde{\delta}^o)$ se stává velmi pracným pro větší rozsahy n_1 a n_2 , proto v praxi využíváme simulací, kdy provedeme náhodný výběr ze všech možných permutací o rozsahu m (m dostatečně velké) a určíme kvantil $c_n(\alpha, \tilde{\delta}^o)$ z tohoto výběru. Jiná možnost je sestavit rozhodovací kritérium na základě limitního chování podmíněného rozdělení $\mathcal{L}(T_n(\tilde{Z}, \tilde{\delta}) | \tilde{\delta} = \tilde{\delta}^o)$. K tomu potřebujeme určit podmíněnou střední hodnotu a rozptyl statistiky T_n .

2.1. Podmíněná střední hodnota a rozptyl statistiky. Pro následující výpočet je třeba si uvědomit toto: $E(Z_j | Z_1, \dots, Z_{j-1}) = p_j$. Standardním výpočtem pak odvodíme (podrobněji viz [4], str. 31–32):

$$(2.7) \quad \begin{aligned} E(T_n | \tilde{\delta}) &= 0 \quad s. j., \\ \text{var}(T_n | \tilde{\delta}) &= \sum_{j=1}^n w_n^2(j) \delta_{[j]} \frac{n_1 n_2}{n(n-1)} \frac{n-j}{n-j+1} = \sum_{j=1}^n w_n^2(j) \delta_{[j]} E p_j q_j \quad s. j. \end{aligned}$$

Je užitečné si uvědomit souvislost s pořadovými statistikami pro necenzorovaná data. Statistiku $T_n(\tilde{Z}, \tilde{\delta}^o)$ definovanou vzorcem (2.3) lze upravit následovně

$$(2.8) \quad T_n(\tilde{Z}, \tilde{\delta}) = \sum_{j=1}^n w_n(j) \delta_{[j]} (Z_j - p_j) = \sum_{j=1}^n Z_j a_j^*,$$

kde skóry jsou určeny vztahem

$$(2.9) \quad a_j^* = w_n(j) \delta_{[j]} - \sum_{i=1}^j w_n(i) \frac{\delta_{[i]}}{n-i+1}, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Jedná se tedy o *zobecněnou lineární pořadovou statistiku*.

Poznámka 2.3. Výše definované skóry a_j^* závisejí na $\delta_{[1]}, \delta_{[2]}, \dots, \delta_{[j]}$, a tudíž jsou funkcí náhodného vektoru $\tilde{\delta}$, což kvůli zbytečně složitému značení nebudeme explicitně vyjadřovat.

Pro skóry typu (2.9) platí (viz [4], str. 35)

$$(2.10) \quad \sum_{j=1}^n a_j^* = 0, \quad \sum_{j=1}^n (a_j^*)^2 = \sum_{j=1}^n w_n^2(j) \delta_{[j]} \frac{n-j}{n-j+1} = \frac{n(n-1)}{n_1 n_2} \text{var}(T_n | \tilde{\delta}).$$

3. ASYMPTOTICKÉ VLASTNOSTI TESTU

Tvrzení 3.1. Nechť existuje limita $\lim_{n \rightarrow \infty} n_i/n = \eta_i \in (0, 1)$, $i = 1, 2$. Pak za platnosti omezené nulové hypotézy \bar{H}_0 skóry a_j^* definované v (2.9) s vahami tvaru (2.4) splňují podmínku

$$(3.1) \quad \frac{\max_{1 \leq j \leq n} (a_j^*)^2}{\sum_{j=1}^n (a_j^*)^2} \xrightarrow{\text{P}} 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Důkaz. Skóry a_j^* definované v (2.9) lze omezit s. j.:

$$\max_{1 \leq j \leq n} (a_j^*)^2 \leq \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} \right)^2 = s_n^2.$$

Odtud a z (2.10) obdržíme

$$(3.2) \quad 0 \leq \frac{\max_{1 \leq j \leq n} (a_j^*)^2}{\sum_{j=1}^n (a_j^*)^2} \leq \frac{\frac{n_1}{n} \frac{n_2}{n} \frac{s_n^2}{n-1}}{\frac{n_1}{n} \frac{n_2}{n} \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (a_j^*)^2} = \frac{\frac{n_1}{n} \frac{n_2}{n} \frac{s_n^2}{n-1}}{\frac{1}{n} \text{var}(T_n | \tilde{\delta})}.$$

Přičemž užijeme vlastnosti částečného součtu harmonické řady $s_n = \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}$ a vlastnosti přirozeného logaritmu $\ln(n)$ (viz [6], str. 331–332, bod 6, a str. 365–366, bod 7)

$$(3.3) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln^\alpha(n)}{n^\beta} = 0, \quad \alpha > 0, \beta > 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} (s_n - \ln(n)) = c,$$

kde $c \doteq 0,577215665$ je tzv. *Eulerova konstanta*. Opakovaným použitím (3.3) dostaneme, že $\lim_{n \rightarrow \infty} s_n^2/n = 0$. Tedy čítec výrazu na pravé straně v (3.2) konverguje k nule pro $n \rightarrow \infty$. Pokud jmenovatel uvažovaného zlomku bude konvergovat v pravděpodobnosti ke kladné konstantě pro $n \rightarrow \infty$, což nyní ověříme, podmínka (3.1) bude splněna. Jinak řečeno, chceme, aby za \bar{H}_0 platilo:

$$(3.4) \quad \frac{1}{n} \text{var}(T_n | \tilde{\delta}) \xrightarrow{\text{P}} \text{const} > 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Označme $V_n = \frac{n}{n_1 n_2} \sum_{j=1}^n w_n^2(j) \delta_{[j]} p_j q_j$. Pro V_n s vahami tvaru (2.4) za \bar{H}_0 platí (viz [5], oddíl 2.2, podrobněji viz [1], oddíl 7.2)

$$(3.5) \quad V_n \xrightarrow{\text{P}} \sigma^2, \quad n \rightarrow \infty,$$

kde σ^2 je asymptotický rozptyl statistiky $\left(\frac{n}{n_1 n_2}\right)^{1/2} T_n$. Pro naše potřeby stačí, že se jedná o kladnou konstantu.

Abychom ověřili (3.4), stačí dokázat tvrzení, že za hypotézy \bar{H}_0

$$(3.6) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{n} \left(\frac{n_1 n_2}{n} V_n - \text{var}(T_n | \bar{\delta}) \right) \xrightarrow{P} 0, \quad n \rightarrow \infty, \\ \text{tj. z (2.7)} \quad & \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n w_n^2(j) \delta_{[j]} (p_j q_j - \text{E}p_j q_j) \xrightarrow{P} 0, \quad n \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

neboť z (3.5) vyplývá, že $\frac{n_1 n_2}{n^2} V_n \xrightarrow{P} \eta_1 \eta_2 \sigma^2$ při $n \rightarrow \infty$.

Zvolme libovolně malé pevné $\varepsilon \in (0, 1)$ a využijme vlastnost vah $|w_n(j)| \leq 1$ pro $1 \leq j \leq n$, pak

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{1 \leq j < n\varepsilon} w_n^2(j) \delta_{[j]} (p_j q_j - \text{E}p_j q_j) \right| \leq \frac{1}{n} \sum_{1 \leq j < n\varepsilon} |p_j q_j - \text{E}p_j q_j| \leq \frac{1}{n} \sum_{1 \leq j < n\varepsilon} 1 < \varepsilon \text{ s. j.}$$

Stejnou nerovnost dostaneme i pro součet přes všechna j , $n(1-\varepsilon) < j \leq n$, poněvadž ho lze převést na předchozí případ úpravou $k = n - j$.

Z výše uvedeného vyplývá, že stačí vyšetřovat konvergenci podle pravděpodobnosti pro součet přes všechna j splňující nerovnost $n\varepsilon \leq j \leq (1-\varepsilon)n$:

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{n} \sum_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} w_n^2(j) \delta_{[j]} (p_j q_j - \text{E}p_j q_j) \right| \leq \frac{1}{n} \sum_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} |p_j q_j - \text{E}p_j q_j| \\ & \leq \frac{1}{n} \sum_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} (|p_j - \text{E}p_j| |1 - (p_j + \text{E}p_j)| + \text{var } p_j) \quad \text{s. j.} \end{aligned}$$

K dalšímu potřebujeme odhad rozptylu $\text{var } p_j$, $n\varepsilon \leq j \leq (1-\varepsilon)n$, (viz [4], str. 41):

$$(3.7) \quad 0 \leq \text{var } p_j \leq \frac{n_1 n_2}{n^2} \frac{1}{n-j+1} \leq \frac{n_1 n_2}{n^2} \frac{1}{n\varepsilon+1}.$$

Vezmeme-li v úvahu, že $|1 - (p_j + \text{E}p_j)| \leq 1$ s. j. pro $1 \leq j \leq n$ spolu s odhadem (3.7), pak

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} w_n^2(j) \delta_{[j]} (p_j q_j - \text{E}p_j q_j) \right| \leq \max_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} |p_j - \text{E}p_j| + \frac{n_1 n_2}{n^2} \frac{1}{n\varepsilon+1} \text{ s. j.}$$

Přičemž výraz na pravé straně bude konvergovat podle pravděpodobnosti k nule pro $n \rightarrow \infty$, pokud

$$(3.8) \quad \max_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} |p_j - \text{E}p_j| \xrightarrow{P} 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Tuto zbývající vlastnost dokážeme:

Pro p_j , viz (2.6), platí $p_j = \frac{n_1}{n-j+1} \left(1 - \hat{H}_{n_1}(X_{(j)}-) \right)$, kde $\hat{H}_{n_1}(x)$ je empirická distribuční funkce posloupnosti náhodných veličin X_1, X_2, \dots, X_{n_1} . Označme $\hat{H}_n(x)$ empirickou distribuční funkci posloupnosti náhodných veličin X_1, X_2, \dots, X_n . Dále necht' H_i značí distribuční funkci veličin X_{ij} , $j = 1, 2, \dots, n_i$, $i = 1, 2$. Za platnosti \bar{H}_0 je $H_1(x) = H_2(x) = H(x)$ pro $\forall x$.

K odvození vlastnosti (3.8) užitíme *Glivenkovu větu*, tedy za platnosti \bar{H}_0

$$(3.9) \quad \sup_{x \in \mathbb{R}} |\hat{H}_{n_1}(x) - H(x)| \xrightarrow{P} 0, \quad n_1 \rightarrow \infty,$$

$$(3.10) \quad \sup_{x \in \mathbb{R}} |\hat{H}_n(x) - H(x)| \xrightarrow{P} 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Dále využijeme

$$(3.11) \quad \frac{n_1}{n-j+1} \leq \frac{n_1}{n\varepsilon+1} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\eta_1}{\varepsilon} \quad \text{pro } n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon).$$

Rozdíl $p_j - \mathbb{E}p_j$ upravíme přičtením a odečtením vhodných výrazů

$$p_j - \mathbb{E}p_j = \frac{n_1}{n-j+1} \left\{ \left[1 - \hat{H}_{n_1}(X_{(j)}-) - (1 - H(X_{(j)}-)) \right] + \right. \\ \left. + \left[1 - H(X_{(j)}) - (1 - \hat{H}_n(X_{(j)})) \right] + \left[1 - \hat{H}_n(X_{(j)}) - \frac{n-j+1}{n_1} \mathbb{E}p_j \right] \right\}.$$

Vzhledem k tomu, že $\mathbb{E}p_j = \frac{n_1}{n}$ a $\hat{H}_n(X_{(j)}) = \frac{j}{n}$, máme

$$p_j - \mathbb{E}p_j = \frac{n_1}{n-j+1} \left\{ \left[H(X_{(j)}-) - \hat{H}_{n_1}(X_{(j)}-) \right] + \left[\hat{H}_n(X_{(j)}) - H(X_{(j)}) \right] - \frac{1}{n} \right\}.$$

Za platnosti \bar{H}_0 lze náhodnou veličinu $\max_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} |p_j - \mathbb{E}p_j|$ omezit s. j. následovně:

$$\max_{n\varepsilon \leq j \leq n(1-\varepsilon)} |p_j - \mathbb{E}p_j| \leq \frac{n_1}{n\varepsilon+1} \left(\sup_{x \in \mathbb{R}} \left| \hat{H}_{n_1}(x) - H(x) \right| + \sup_{x \in \mathbb{R}} \left| \hat{H}_n(x) - H(x) \right| + \frac{1}{n} \right).$$

Z vlastností (3.9), (3.10) a (3.11) plyne vlastnost (3.8). Tím jsme dokončili důkaz (3.6), a tedy i tvrzení 3.1. \square

Z tvrzení 3.1 vyplývá, že za platnosti omezené nulové hypotézy \bar{H}_0 standardizovaná statistika $\frac{T_n}{\sqrt{\text{var}(T_n|\tilde{\delta})}}$, kde T_n je tvaru (2.8), má asymptoticky podmíněně při daném $\tilde{\delta}$ normované normální rozdělení $N(0, 1)$ (viz [2], str. 194–195, dodatky 4 a 8), tj.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left\{ \sup_{x \in \mathbb{R}} \left| \mathbb{P} \left(\frac{T_n}{\sqrt{\text{var}(T_n|\tilde{\delta})}} \leq x \mid \tilde{\delta} \right) - \Phi(x) \right| > \varepsilon \right\} = 0, \quad \forall \varepsilon > 0.$$

Poznámka 3.1. Vzhledem k této vlastnosti standardizovaná statistika $\frac{T_n}{\sqrt{\text{var}(T_n|\tilde{\delta})}}$ má i asymptoticky (nepodmíněně) normované normální rozdělení $N(0, 1)$ (viz [2], str. 195, dodatek 5).

Na základě získaných poznatků stanovíme asymptotické kritérium podmíněného pořadového testu v případě velkých hodnot n_1 a n_2 :

$$\varphi_{n, \tilde{\delta}^o} = \begin{cases} 1, & T_n (\text{var}(T_n|\tilde{\delta} = \tilde{\delta}^o))^{-1/2} > u_{1-\alpha}, \quad \text{zamítáme hypotézu } \bar{H}_0, \\ 0, & T_n (\text{var}(T_n|\tilde{\delta} = \tilde{\delta}^o))^{-1/2} \leq u_{1-\alpha}, \quad \text{nezamítáme hypotézu } \bar{H}_0, \end{cases}$$

kde $u_{1-\alpha}$ je $(1-\alpha)$ -kvantil normovaného normálního rozdělení $N(0, 1)$.

LITERATURA

- [1] Fleming T. R., Harrington D. P. (1991): Counting Processes and Survival Analysis. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- [2] Hájek J., Šidák Z. (1967): Theory of Rank Tests. Academia, Praha.
- [3] Janssen A. (1991): Conditional Rank Tests for Randomly Censored Data. *The Annals of Statistics* **Vol. 19, No. 3**, 1434–1456.
- [4] Koblížková L. (2000): Pořadové testy a odhady v analýze přežití. Diplomová práce MFF UK.
- [5] Neuhaus G. (1993): Conditional Rank Tests for the Two-Sample Problem Under Random Censorship. *The Annals of Statistics* **Vol. 21, No. 4**, 1760–1779.
- [6] Rektorys K. a spolupracovníci (1995): Přehled užití matematiky I. Prometheus, Praha.

MATEMATIKA MEZI §...§ ANEB NĚCO MÁLO O DISKRIMINACI

ARNOŠT KOMÁREK

ABSTRAKT. If somebody wants to distinguish objects from two groups, he can use a statistical model to achieve this target. Three possible statistical models are discussed a bit in this paper. Models are as follows: normal discriminant analysis (NDA), logistic regression (LR) and mixture of normal distributions (MND). The sense of this article is to reveal for another author's paper where those models are discussed many more. One of the supposed models (MND) is used for analysis of the entrance examination at the Faculty of Law of the Charles University in Prague in 1999. We try to distinguish between honest and fraudulent candidates of studying at this college.

Абстракт. В этой статье изучается дискриминационный анализ для статистического обсуждения принимаемых экзаменов в Университет Карла.

Cílem příspěvku je upozornit na práci [1], jež se zabývá některými modely, pomocí nichž lze provádět diskriminaci. Konkrétně se jedná o modely normální diskriminační analýzy (NDA), logistické regrese (LR) a směsi normálních rozdělení (MND). Vždy máme za úkol zařadit dané objekty do jedné z dvou skupin na základě hodnot jistých znaků na nich naměřených. Znak naměřený na daném objektu můžeme reprezentovat pomocí hodnoty náhodného vektoru X a zařazení tohoto objektu pomocí hodnoty náhodné veličiny Y , jež nabývá hodnot 0 a 1, jelikož v naší práci rozlišujeme pouze mezi dvěma skupinami. Jednotlivé modely jsou potom definovány následovně.

(LR):

$$P(Y = 1|X = x) = [1 + \exp(-\beta_0 - \beta'x)]^{-1},$$

$$P(Y = 0|X = x) = [1 + \exp(\beta_0 + \beta'x)]^{-1},$$

kde β_0 a β jsou parametry modelu ($\beta_0 \in \mathcal{R}$, $\beta \in \mathcal{R}^p$).

(NDA):

$$P(Y = 1) = \lambda \in (0, 1),$$

$$\mathcal{L}(X|Y = 0) = N_p(\mu_0, \Sigma),$$

$$\mathcal{L}(X|Y = 1) = N_p(\mu_1, \Sigma).$$

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62H30; Secondary 62P25.

Klíčová slova. Diskriminační analýza.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR č. 201/00/0769 a grantu MSM 113200008.

Parametry jsou tentokrát λ , $\mu_1 \neq \mu_0$ a Σ .

(MND):

X má hustotu

$$f(x) = \lambda f_1(x) + (1 - \lambda)f_0(x),$$

kde f_1 je hustota $N_p(\mu_1, \Sigma)$ a f_0 hustota $N_p(\mu_0, \Sigma)$. Parametry jsou opět $\lambda \in (0, 1)$, $\mu_1 \neq \mu_0$ a Σ .

V práci [1] jsou jednotlivé modely podrobně popsány a porovnány. Jsou zde též uvedeny postupy pro odhadování neznámých parametrů v jednotlivých modelech v praktických situacích. Součástí je samozřejmě též odvození diskriminačních pravidel. Na přiložené disketě je možno nalézt procedury v MATLABU pro výpočet odhadů. Na tomto místě poznamenejme, že modely (LR) a (NDA) vyžadují k sestavení diskriminační procedury učící skupinu objektů, zatímco model (MND) nikoliv.

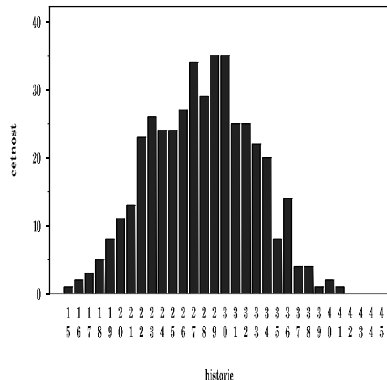
Část práce [1] je věnována následujícímu příkladu, který se pokouší analyzovat výsledky přijímacích zkoušek na Právnické fakultě UK v Praze v roce 1999. Tyto přijímací zkoušky jsou nechvalně známy možností, že někteří uchazeči o studium na zmíněné fakultě znali znění přijímacích testů před vlastní přijímací zkouškou. Pomocí studovaných modelů se pokusíme rozlišit studenty, kteří neznali zadání přijímacích testů (běžní studenti), a studenty, kteří mohli znát předem znění těchto testů (zvýhodnění studenti).

K dispozici jsou výsledky jednotlivých uchazečů v následující podobě: počet bodů za test z cizího jazyka (proměnná *jazyk*), z historie a všeobecného přehledu (proměnná *historie*) a za test z logiky (proměnná *logika*). Dále je u každého uchazeče uvedeno pořadové číslo termínu zkoušky, kterého se zúčastnil. Termínů bylo dohromady třináct, přitom ten třináctý byl náhradní za termín číslo dvanáct, který byl anulován kvůli podezření na podvodné jednání některých uchazečů. V analýze nebudeme tedy pracovat s daty z třináctého termínu, neboť se ho zúčastnili studenti, kteří již přijímací zkoušku absolvovali v termínu dvanáctém. Přidání dat ze třináctého termínu do celého souboru by mohlo způsobit porušení nezávislosti jednotlivých pozorování. Každého z prvních dvanácti termínů se zúčastnil přibližně stejný počet uchazečů v rozmezí od 426 do 488. Za test z jazyka bylo přitom možné získat maximálně patnáct bodů, za test z historie a všeobecného přehledu maximálně čtyřicet pět bodů a za test z logiky maximálně čtyřicet bodů.

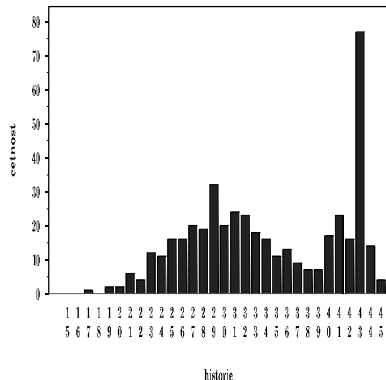
Veličina Y , jež indikuje zařazení jednotlivých uchazečů, bude nabývat hodnoty jedna pro zvýhodněné a hodnoty nula pro běžné uchazeče. Diskriminaci budeme provádět na základě vektoru X , jehož složky budou odpovídat po řadě proměnným *jazyk*, *historie*, *logika*. Skupinu pro výpočet odhadů tvoří v tomto případě všichni uchazeči, kteří se zúčastnili jednoho z prvních dvanácti termínů. U žádného z nich nevíme, zda ho zařadit mezi běžné nebo zvýhodněné studenty. K sestavení diskriminační funkce tedy musíme nyní použít model směsi normálních rozdělení. Pro podpoření domněnky, že zkoumaná data jsou skutečně směsí dvou normálních rozdělení, jsou v [1] uvedeny histogramy dosažených bodů u jednotlivých testů zvlášť pro první a dvanáctý termín. Výsledky uchazečů z prvního termínu by směs tvořit neměly, naopak výsledky dvanáctého termínu by měly tvořit směs z rozdělení, z něhož pocházejí data u ostatních termínů a rozdělení, z něhož pocházejí data zvýhodněných uchazečů. Histogramy pro druhý až jedenáctý termín se od toho pro termín číslo jedna příliš neliší a proto nejsou uvedeny. My zařazujeme histogramy

pro test z historie, jelikož zde se směs projevuje nejvíce a histogramy pro bodový součet.

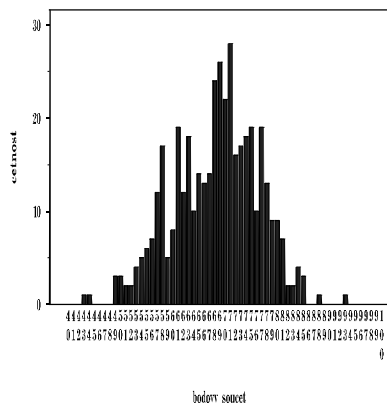
Historie
1. termin



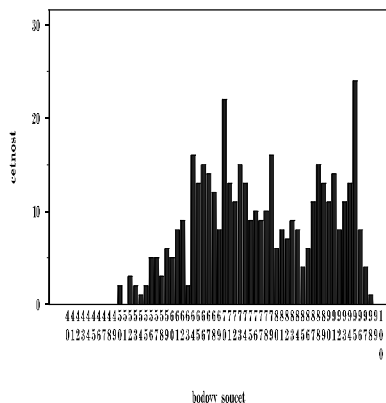
Historie
12. termin



Bodový součet
1. termin



Bodový součet
12. termin



Směs dvou rozdělení lze odhalit v podstatě na všech histogramech odpovídajících dvanáctému termínu, přitom nejvíce se promíchání dat ze dvou výběrů projevuje právě u testu z historie a všeobecného přehledu. Naproti tomu histogramy prvního termínu poměrně dobře odpovídají hustotě normálního rozdělení. Na závěr ještě uvádíme tabulku s průměry výsledků jednotlivých testů a celkového bodového součtu zvlášť pro prvních jedenáct termínů a pro termín dvanáctý.

Průměry získaných bodů

	1. - 11. termín (5110 studentů)	12. termín (440 studentů)
jazyk	10,11	10,95
historie	27,51	34,11
logika	28,64	32,05
bodový součet	66,27	77,11

Z tabulky vidíme, že průměry dosažených bodů jsou u dvanáctého termínu vždy vyšší. Přitom rozdíl je věcně zanedbatelný pro jazyk a nejvyšší pro historii. Avšak statistické testy indikují významný rozdíl u všech uvažovaných veličin. Jednostranný Wilcoxonův (Mannův-Whitneyův) test (s alternativou vyšších hodnot u dvanáctého termínu než u zbylých jedenácti termínů) dosahoval pro všechny uvažované veličiny hladiny nižší než 0,0001. Také tato zjištění nás utvrzují v domněnce, že máme co do činění se směsí dvou rozdělení.

Podrobněji se lze s důvody, jež vedou k předpokladu, že data jsou směsí dvou rozdělení, seznámit na síti Internet na adrese

<http://www.prf.cuni.cz/pr99/Komentar.html>,

kde je zveřejněn *Komentář ke statistickému zpracování výsledků přijímacích zkoušek na Právnické fakultě UK v Praze v roce 1999*.

Pro vlastní sestavení diskriminační funkce použijeme výsledky všech uchazečů, kteří se zúčastnili prvních dvanácti termínů. Takto získáme náhodný výběr ze směsí dvou rozdělení, přičemž nyní již promíchanost nevynikne tolik, jako v případě dvanáctého termínu. Prvních dvanácti termínů se zúčastnilo 5550 uchazečů. Odhady budeme počítat pomocí MATLABU. Po provedení výpočtů získáme následující výsledky:

$$\check{\lambda} = 0,062, \quad \check{\mu}_1 = \begin{pmatrix} 11,57 \\ 38,84 \\ 33,61 \end{pmatrix}, \quad \check{\mu}_0 = \begin{pmatrix} 10,09 \\ 27,32 \\ 28,60 \end{pmatrix}, \quad \check{\Sigma} = \begin{pmatrix} 7,07 & 2,48 & 2,31 \\ 2,48 & 20,84 & 3,61 \\ 2,31 & 3,61 & 15,70 \end{pmatrix}.$$

Vidíme, že odhad střední hodnoty bodových zisků běžných uchazečů je téměř shodný s průměry bodových zisků studentů, kteří se zúčastnili prvních jedenácti termínů. Odhad střední hodnoty bodových zisků zvýhodněných uchazečů je o něco vyšší než průměr bodových zisků dosažených v rámci dvanáctého termínu. Tento fakt je způsoben skutečností, že dvanáctého termínu se zúčastnili též běžní studenti. Vzhledem k uvedenému se zdá, že data odpovídají domněnce, že prvních jedenácti termínů se patrně nezúčastnil žádný zvýhodněný student.

Z uvedených odhadů spočítáme odhady koeficientů v diskriminační funkci:

$$\check{\beta}_0 = -25,92, \quad \check{\beta} = \begin{pmatrix} -0,04 \\ 0,52 \\ 0,20 \end{pmatrix}.$$

Tedy uchazeče, který u přijímací zkoušky dosáhl bodového zisku reprezentovaného vektorem $X = (\text{jazyk}, \text{historie}, \text{logika})'$, zařadíme mezi zvýhodněné, pokud

$$-0,04 \cdot \text{jazyk} + 0,52 \cdot \text{historie} + 0,20 \cdot \text{logika} > 25,92.$$

Pokud aplikujeme toto rozhodovací pravidlo na výsledky uvažovaných uchazečů, získáme následující odhady počtu běžných a zvýhodněných uchazečů na jednotlivých termínech přijímací zkoušky. Odhady počtu běžných uchazečů jsou ve sloupci označeném nulou, počtu zvýhodněných uchazečů ve sloupci označeném jedničkou.

Odhady počtu běžných a zvýhodněných uchazečů

termín	zařazení		součet	podíl
	0	1		zvýhodněných (%)
1.	420	6	426	1,4
2.	451	0	451	0
3.	468	13	481	2,7
4.	443	7	450	1,6
5.	467	2	469	0,4
6.	464	5	469	1,1
7.	458	7	465	1,5
8.	470	3	473	0,6
9.	460	3	463	0,6
10.	468	7	475	1,5
11.	478	10	488	2,0
12.	279	161	440	36,6
součet	5326	224	5550	4,0

Samozřejmě, že ne každý uchazeč, který je podle našeho diskriminačního pravidla označen za zvýhodněného, jím skutečně je. Diskriminační funkce musí totiž pomocí roviny rozdělit jednoznačně trojrozměrný eukleidovský prostor na dvě části. Takto se do části se zvýhodněnými uchazeči může dostat i ten, který přirozeným způsobem (vlastními vědomostmi) dosáhl vyššího bodového zisku. Proto se mezi „zvýhodněnými“ uchazeči objevují též studenti, kteří se zúčastnili jednoho z prvních jedenácti termínů, nikdy jich však není mnoho (maximálně 2,7 %). Naproti tomu v případě dvanáctého termínu bylo za zvýhodněné označeno 161 studentů, tj. 36,6 %, což podporuje domněnku, že někteří uchazeči, kteří se zúčastnili tohoto termínu přijímacích zkoušek, znali zadání testů předem.

Pro srovnání ještě spočítáme odhady neznámých parametrů pouze s využitím dat z kritického dvanáctého termínu. Po provedení výpočtů dostaneme následující odhady:

$$\check{\lambda}^{12} = 0,431, \quad \check{\mu}_1^{12} = \begin{pmatrix} 12,09 \\ 41,19 \\ 35,18 \end{pmatrix}, \quad \check{\mu}_0^{12} = \begin{pmatrix} 10,08 \\ 28,75 \\ 29,68 \end{pmatrix},$$

$$\check{\Sigma}^{12} = \begin{pmatrix} 6,83 & 1,47 & 1,64 \\ 1,47 & 12,12 & 2,74 \\ 1,64 & 2,74 & 14,92 \end{pmatrix}.$$

Odhady $\check{\mu}_1^{12}$, $\check{\mu}_0^{12}$ a $\check{\Sigma}^{12}$ jsou poměrně blízké odhadům $\check{\mu}_1$, $\check{\mu}_0$, $\check{\Sigma}$. Odhad $\check{\lambda}^{12}$ s odhadem $\check{\lambda}$ srovnávat nemůžeme, neboť se vztahuje k podílu zvýhodněných uchazečů v rámci dvanáctého termínu, který byl podstatně vyšší než v rámci celého přijímacího řízení. Odhady koeficientů v diskriminační funkci jsou následující:

$$\check{\beta}_0^{12} = -40,94, \quad \check{\beta}^{12} = \begin{pmatrix} 0,04 \\ 0,98 \\ 0,18 \end{pmatrix}.$$

Pokud pomocí této diskriminační procedury zařadíme uchazeče, kteří se zúčastnili dvanáctého termínu, bude jich 185 označeno za zvýhodněné, což je o 24 více, než při diskriminaci prováděné pomocí původní procedury. Přitom žádný z uchazečů, který byl původní procedurou označen za zvýhodněného, nebude nyní nezvýhodněný. Nová procedura tedy pouze k původním zvýhodněným studentům přidala

dalších 24 uchazečů. Tato skutečnost může být způsobena faktem, že nyní byl podíl zvýhodněných uchazečů v učicím souboru podstatně vyšší, než při sestavování původní procedury. Zařazovat uchazeče z ostatních termínů pomocí procedury určené koeficienty $\check{\beta}_0^{12}$ a $\check{\beta}^{12}$ nebude mít příliš velký smysl kvůli chybnému odhadu podílu zvýhodněných uchazečů v souboru všech studentů, kteří se zúčastnili přijímacích zkoušek. Upravíme-li tento odhad do tvaru

$$\check{\lambda}^{12,all} = \check{\lambda}^{12} \cdot \frac{\text{počet uchazečů v 12. termínu}}{\text{počet všech uchazečů}} = \frac{0,431 \cdot 440}{5550} = 0,034$$

a spočítáme pomocí $\check{\mu}_1^{12}$, $\check{\mu}_0^{12}$, $\check{\Sigma}^{12}$ a $\check{\lambda}^{12,all}$ koeficienty $\check{\beta}_0^{12,all}$, $\check{\beta}^{12,all}$, jež vyjdou

$$\check{\beta}_0^{12,all} = -44,00, \quad \check{\beta}^{12,all} = \begin{pmatrix} 0,04 \\ 0,98 \\ 0,18 \end{pmatrix},$$

získáme diskriminační proceduru, pomocí níž již můžeme zařazovat též studenty z ostatních termínů. Tato procedura označí studenta za zvýhodněného, pokud

$$0,04 \cdot \text{jazyk} + 0,98 \cdot \text{historie} + 0,18 \cdot \text{logika} > 44,00.$$

Toto rozhodovací pravidlo se na první pohled poměrně liší od původního pravidla založeného na $\check{\beta}_0$, $\check{\beta}$, ale pokud porovnáme rozhodnutí učiněná na základě těchto dvou procedur, zjistíme, že odlišnost není příliš velká, jak je možné se přesvědčit v následující tabulce, která obě procedury porovnává. Ve sloupci označeném 0 – 1 je počet uchazečů označených novou procedurou za zvýhodněné, ale starou za běžné, sloupec označený 1 – 0 obsahuje naopak počet uchazečů označených za zvýhodněné pouze původní procedurou. Sloupce původní a nová procedura přinášejí počty uchazečů, kteří byli označeni za zvýhodněné užitím příslušné diskriminační funkce.

Porovnání dvou procedur

termín	původní procedura	nová procedura	0 – 1	1 – 0	počet odlišně zařazených
1.	6	5	0	1	1
2.	0	0	0	0	0
3.	13	11	1	3	4
4.	7	7	1	1	2
5.	2	2	0	0	0
6.	5	4	0	1	1
7.	7	9	2	0	2
8.	3	3	0	0	0
9.	3	3	0	0	0
10.	7	8	1	0	1
11.	10	12	3	1	4
12.	161	160	1	2	3
součet	224	224	9	9	18

Literatura.

[1] Komárek A., *Porovnání tří modelů*, Diplomová práce MFF UK Praha, 2000

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSKÁ 83, 186 75 PRAHA
E-MAIL: komarek@karlin.mff.cuni.cz

ASYMPTOTICKÉ TESTY HYPOTÉZ V MODELECH S RUŠIVÝMI PARAMETRY

MICHAL KULICH

ABSTRAKT. We discuss likelihood ratio, Wald and Rao test statistics for testing several parameters in a finite-dimensional model with nuisance parameters. A proof of their asymptotic χ^2 distribution is presented. Three examples on the use of the Rao score statistic are included.

Резюме: Эта статья занимается критерием отношения правдоподобия, критерием Вальда и критерием Рао для проверки нескольких параметров в конечномерных моделях с мешающими параметрами. Показываеца доказательство ич предельного χ^2 распределения. Применение накопленној статистики Рао иллюстрировано тремя примерами.

1. ÚVOD

Uvažujme pozorování X_1, \dots, X_n , kde X_i jsou měřitelná zobrazení $(\Omega, \mathcal{A}) \rightarrow (\mathcal{X}, \mathcal{B})$. Pro jednoduchost zde budeme předpokládat, že pozorování jsou nezávislá a stejně rozdělená, ale tento předpoklad není obecně nutný. Nechť je dána množina pravděpodobnostních měř $\mathcal{P} = \{P_\theta; \theta \in \Theta\}$ na (Ω, \mathcal{A}) a nechť rozdělení každého X_i jest $P_0 = P_{\theta_0}$ pro nějaké $\theta_0 \in \Theta$. Množinu \mathcal{P} budeme nazývat *model* a budeme vyžadovat, aby pro libovolné parametry $\theta, \theta' \in \Theta$ takové, že $\theta \neq \theta'$, platilo $P_\theta \neq P_{\theta'}$. V tomto článku se omezíme na $\Theta \subset \mathbb{R}^d$, takže θ je vektor o d složkách.

Známe-li skutečný parametr θ_0 nebo umíme-li jej dobře odhadnout, víme vše o rozdělení každého X_i . V řadě praktických případů nás však nezajímá celé rozdělení každého pozorování, ale jen nějaký jeho aspekt. Představme si tedy, že každý parametr $\theta \in \Theta$ můžeme rozdělit na dvě části, θ_1 o m složkách a θ_2 o $d - m$ složkách, takže $\theta^\top = (\theta_1^\top, \theta_2^\top)$. Parametr θ_1 nechť obsahuje vše, co nás zajímá o rozdělení X_1, \dots, X_n (počet jeho složek m je obvykle malý), a parametr θ_2 nechť zahrnuje zbytek. Nazývávejme θ_1 *cílový parametr* a θ_2 *rušivý parametr*. Stejným způsobem rozdělíme skutečný parametr θ_0 na θ_{01} a θ_{02} . Chceme testovat hypotézu, že cílový parametr θ_{01} je roven nějaké hypotetické hodnotě θ_{H1} . Vzhledem k modelu, s nímž pracujeme, se vlastně jedná o test složené hypotézy

$$H_0^* : \theta_0 \in \Theta_H^*, \quad \text{kde} \quad \Theta_H^* = \{\theta \in \Theta; \theta_1 = \theta_{H1}\}$$

proti alternativě $H_1^* : \theta_0 \notin \Theta_H^*$.

Tento přehledový článek pojednává o testech takovýchto složených hypotéz a podává souhrn teoretických výsledků, na nichž jsou založeny. V kapitole 2 krátce shrneme teorii maximálně věrohodných odhadů parametru θ a zavedeme značení. V kapitole 3 definujeme testové statistiky pro testování hypotézy H_0^* a odvodíme jejich

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62F03.

Klíčová slova. Test Raovy, Waldovy a věrohodnostním poměrem, rušivé parametry.

Tento článek vznikl za podpory výzkumného záměru MSM 113200008 „Matematické metody ve stochastice“.

asymptotické rozdělení. Kapitola 4 bude věnována příkladům a kapitola 5 zobecní předchozí výklad na jiné než maximálně věrohodné odhady.

2. ODHADY METODOU MAXIMÁLNÍ VĚROHODNOSTI

Vzhledem k formulaci problému, jak jsme ji popsali v předchozí kapitole, se jako vhodný nástroj k řešení jeví teorie maximálně věrohodných odhadů. Proto si zde zavedeme vhodné značení a krátce shrneme její základní výsledky, které budeme potřebovat. Budeme odhadovat celý parametr θ na základě pozorování X_1, \dots, X_n za předpokladu, že platí model \mathcal{P} .

Nechť $p(x; \theta)$ je hustota rozdělení P_θ vzhledem k nějaké σ -konečné míře μ . Definujme

$$L_n(\theta) = \prod_{i=1}^n p(X_i; \theta), \quad \theta \in \Theta,$$

$$\ell_n(\theta) = \ln L_n(\theta) = \sum_{i=1}^n \ln p(X_i; \theta).$$

Funkci L_n nazýváme věrohodnostní funkce.

Definice. Vektor $\hat{\theta}_n \in \Theta$ se nazývá maximálně věrohodný odhad parametru θ v modelu \mathcal{P} , právě když $L_n(\hat{\theta}_n) \geq L_n(\theta) \quad \forall \theta \in \Theta$.

Nyní předpokládejme, že $p(x; \theta)$ je dostatečně hladká funkce θ v nějakém okolí θ_0 , a definujme následující vektory a matice (odborné termíny pro tyto objekty, existují-li, jsou uvedeny v závorkách).

Značení.

$$U(\theta | X_i) = \frac{\partial \ln p(X_i; \theta)}{\partial \theta} \quad (\text{skórová funkce}),$$

$$U_n(\theta) = \sum_{i=1}^n U(\theta | X_i) \quad (\text{skórová statistika}),$$

$$I(\theta | X_i) = -\frac{\partial^2 \ln p(X_i; \theta)}{\partial \theta \partial \theta^\top},$$

$$I_n(\theta) = \sum_{i=1}^n I(\theta | X_i) \quad (\text{výběrová informační matice}),$$

$$\mathbb{I}(\theta) = \mathbb{E}_\theta I(\theta | X_i) \quad (\text{Fisherova informační matice}).$$

O Fisherově informační matici předpokládáme, že existuje a je pozitivně definitní v okolí θ_0 . Původní definice maximálně věrohodného odhadu je z praktického hlediska poněkud nešikovná a proto budeme nadále pracovat s upravenou definicí.

Definice. Vektor $\hat{\theta}_n \in \Theta$ se nazývá maximálně věrohodný odhad parametru θ v modelu \mathcal{P} , právě když řeší věrohodnostní rovnici $U_n(\hat{\theta}_n) = \mathbf{0}$.

Pro platnost asymptotických výsledků teorie maximální věrohodnosti potřebujeme mít splněny podmínky regularity, které zaručují dostatečnou hladkost a „rozhodně“ chování věrohodnostní funkce v okolí θ_0 . Možnou formulaci těchto podmínek lze nalézt například v knize Lehmann (1983, kap. 6.4). Ať už jsou však tyto podmínky formulovány jakkoli, vždy zaručují, že platí

$$\mathbb{E}_{\theta_0} U(\theta_0 | X_i) = \mathbf{0} \quad \text{a}$$

$$\text{var}_{\theta_0} U(\theta_0 | X_i) = \mathbb{I}(\theta_0) > 0.$$

Za platnosti podmínek regularity lze dokázat větu o existenci a konsistenci maximálně věrohodného odhadu (viz Lehmann, 1983, věta 6.4.1) a také následující tvrzení.

Tvrzení. Nechť jsou splněny podmínky regularity a nechť $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n \xrightarrow{P} \boldsymbol{\theta}_0$. Pak

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \frac{1}{\sqrt{n}}U_n(\boldsymbol{\theta}_0) \xrightarrow{d} \mathbb{N}_d(\mathbf{0}, \mathbb{I}(\boldsymbol{\theta}_0)), \\ \text{(ii)} \quad & \sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_0) = \frac{1}{\sqrt{n}}\mathbb{I}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0)U_n(\boldsymbol{\theta}_0) + o_P(1) \xrightarrow{d} \mathbb{N}_d(\mathbf{0}, \mathbb{I}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0)). \end{aligned} \quad (1)$$

Uvažujme nyní jednoduchou hypotézu $H_0 : \boldsymbol{\theta}_0 = \boldsymbol{\theta}_H$ pro nějaké $\boldsymbol{\theta}_H \in \Theta$. Zavedme nejprve tři testové statistiky pro testování H_0 proti oboustranné alternativě.

Definice.

(i) Statistika

$$\lambda_n = \frac{L_n(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)}{L_n(\boldsymbol{\theta}_H)}$$

se nazývá věrohodnostní poměr (Neyman a Pearson, 1928).

(ii) Statistika

$$W_n = n(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_H)^T \widehat{\mathbb{I}}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n)(\hat{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_H)$$

se nazývá Waldova statistika (Wald, 1943).

(iii) Statistika

$$R_n = \frac{1}{n}U_n(\boldsymbol{\theta}_H)^T \widehat{\mathbb{I}}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_H)U_n(\boldsymbol{\theta}_H)$$

se nazývá Raova (skórová) statistika (Rao, 1947).

Matice $\widehat{\mathbb{I}}$, jež se vyskytuje v definici Raovy a Waldovy statistiky, představuje buď přímo Fisherovu informační matici \mathbb{I} anebo její jakýkoliv konsistentní odhad, například $n^{-1}I_n$.

Přibližné kritické hodnoty pro všechny tři statistiky lze získat z kvantilů χ^2 rozdělení o d stupních volnosti, neboť za platnosti H_0 máme

$$\left. \begin{array}{l} 2 \ln \lambda_n \\ W_n \\ R_n \end{array} \right\} \xrightarrow{d} \chi_d^2.$$

U W_n a R_n tento výsledek plyne rovnou z předchozího tvrzení, u $2 \ln \lambda_n$ je třeba vhodným způsobem rozvinout logaritmus věrohodnosti v Taylorovu řadu.

3. TESTY S RUŠIVÝMI PARAMETRY

Nyní se vraťme k problému testování složené hypotézy. Rozdělili jsme každý parametr na dvě části $\boldsymbol{\theta}^T = (\boldsymbol{\theta}_1^T, \boldsymbol{\theta}_2^T)$, kde první část má m složek. Podobně rozdělíme skutečný parametr $\boldsymbol{\theta}_0^T = (\boldsymbol{\theta}_{01}^T, \boldsymbol{\theta}_{02}^T)$, maximálně věrohodný odhad $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n^T = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1n}^T, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{2n}^T)$, skóre a informační matici

$$U_n(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} U_{1n}(\boldsymbol{\theta}) \\ U_{2n}(\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix}, \quad \mathbb{I}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{11}(\boldsymbol{\theta}) & \mathbb{I}_{12}(\boldsymbol{\theta}) \\ \mathbb{I}_{21}(\boldsymbol{\theta}) & \mathbb{I}_{22}(\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix}.$$

Zde \mathbb{I}_{11} je matice typu $m \times m$, \mathbb{I}_{12} je matice typu $m \times (d - m)$ atd.

Chceme testovat hypotézu $H_0^* : \boldsymbol{\theta}_0 \in \Theta_H^*$, kde $\Theta_H^* = \{\boldsymbol{\theta} \in \Theta; \boldsymbol{\theta}_1 = \boldsymbol{\theta}_{H1}\}$. Tato hypotéza se často nepřesně zapisuje jako $H_0^* : \boldsymbol{\theta}_{01} = \boldsymbol{\theta}_{H1}$, což svádí k následujícímu naivnímu přístupu, který ignoruje přítomnost rušivých parametrů. Jelikož neznáme $\boldsymbol{\theta}_{02}$, odhadneme jej maximálně věrohodným odhadem $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{2n}$, jenž jest konsistentní. Motivováni tímto faktem nadále předstíráme, že $\boldsymbol{\theta}_{02}$ je přesně rovno $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{2n}$ a fakticky

přejdeme k m -rozměrnému submodelu $\mathcal{P}^* = \{P_{\boldsymbol{\theta}}; \boldsymbol{\theta} \in \Theta, \boldsymbol{\theta}_{02} = \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{2n}\}$. Toto ovšem není korektní přístup, neboť $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{2n}$ je náhodná veličina. Dále používáme teorii maximální věrohodnosti, jak byla popsána výše, aplikovanou na submodel \mathcal{P}^* , tj. se skórovou statistikou U_{1n} a informační maticí \mathbb{I}_{11} . Označíme-li hodnotu parametru za hypotézy v submodelu \mathcal{P}^* jako

$$\boldsymbol{\theta}_{\text{H}}^* = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\theta}_{\text{H}1} \\ \widehat{\boldsymbol{\theta}}_{2n} \end{pmatrix},$$

dostaneme testové statistiky

(i)

$$\lambda_n = \frac{L_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)}{L_n(\boldsymbol{\theta}_{\text{H}}^*)},$$

(ii)

$$W_n = n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{1n} - \boldsymbol{\theta}_{\text{H}1})^{\text{T}} \widehat{\mathbb{I}}_{11}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{1n} - \boldsymbol{\theta}_{\text{H}1}),$$

(iii)

$$R_n = \frac{1}{n} U_n(\boldsymbol{\theta}_{\text{H}}^*)^{\text{T}} \widehat{\mathbb{I}}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_{\text{H}}^*) U_n(\boldsymbol{\theta}_{\text{H}}^*).$$

Bohužel, tyto statistiky za platnosti hypotézy obecně nemají očekávané χ_m^2 rozdělení. Testy s požadovanou hladinou takto dostaneme jen v některých speciálních případech. Například je-li hustota pozorování normální, testovaný parametr je střední hodnota a rušivý parametr je rozptyl, pak limitní rozdělení testových statistik vskutku nezávisí na tom, zda rozptyl je znám či nikoli. Tento fakt je všeobecně znám již z úvodních statistických přednášek, což v praxi může svádět k slepému používání naivního přístupu i tam, kde není oprávněný.

Jak tedy dostaneme správné testové statistiky v přítomnosti rušivých parametrů? Předpokládejme, že hypotéza H_0^* platí a zkoumejme submodel $\mathcal{P}_{\text{H}} = \{P_{\boldsymbol{\theta}}; \boldsymbol{\theta} \in \Theta, \boldsymbol{\theta}_1 = \boldsymbol{\theta}_{\text{H}1}\}$. Toto je na rozdíl od \mathcal{P}^* opravdu submodel modelu \mathcal{P} , a to $(d-m)$ -rozměrný. Označme $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n$ maximálně věrohodný odhad parametru $\boldsymbol{\theta}_0$ v submodelu \mathcal{P}_{H} . Platí

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\theta}_{\text{H}1} \\ \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{2n} \end{pmatrix}, \quad \text{kde } \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{2n} \text{ řeší } U_{2n} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\theta}_{\text{H}1} \\ \tilde{\boldsymbol{\theta}}_{2n} \end{pmatrix} = \mathbf{0}.$$

Odtud $U_{2n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n) = 0$, ale $U_{1n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n) \neq 0$. Platí-li submodel \mathcal{P}_{H} , tj. hypotéza H_0^* , dostaneme aplikací tvrzení z předchozí kapitoly

$$\frac{1}{\sqrt{n}} U_{2n}(\boldsymbol{\theta}_0) \xrightarrow{d} \mathbb{N}_{d-m}(\mathbf{0}, \mathbb{I}_{22}(\boldsymbol{\theta}_0)),$$

$$\sqrt{n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_0) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbb{I}_{22}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0) U_{2n}(\boldsymbol{\theta}_0) + o_P(1) \end{pmatrix} \xrightarrow{d} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbb{N}_{d-m}(\mathbf{0}, \mathbb{I}_{22}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0)) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Asymptotický rozptyl $\sqrt{n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_{2n} - \boldsymbol{\theta}_{02})$ v submodelu \mathcal{P}_{H} je tedy $\mathbb{I}_{22}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0)$. Co je však asymptotický rozptyl $\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{2n} - \boldsymbol{\theta}_{02})$ v modelu \mathcal{P} ? Použijme následující lemma, které se snadno dokáže roznásobením matic.

Lemma. *Nechť $\mathbb{I} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{11} & \mathbb{I}_{12} \\ \mathbb{I}_{21} & \mathbb{I}_{22} \end{pmatrix}$ je regulární bloková matice a blok \mathbb{I}_{11} je čtvercový.*

Potom

$$\mathbb{I}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}^{11} & \mathbb{I}^{12} \\ \mathbb{I}^{21} & \mathbb{I}^{22} \end{pmatrix},$$

kde

$$\begin{aligned} \mathbb{I}^{11} &= \mathbb{I}_{11.2}^{-1}, & \mathbb{I}^{12} &= -\mathbb{I}_{11.2}^{-1}\mathbb{I}_{12}\mathbb{I}_{22}^{-1}, & \mathbb{I}_{11.2} &= \mathbb{I}_{11} - \mathbb{I}_{12}\mathbb{I}_{22}^{-1}\mathbb{I}_{21}, \\ \mathbb{I}^{22} &= \mathbb{I}_{22.1}^{-1}, & \mathbb{I}^{21} &= -\mathbb{I}_{22.1}^{-1}\mathbb{I}_{21}\mathbb{I}_{11}^{-1}, & \mathbb{I}_{22.1} &= \mathbb{I}_{22} - \mathbb{I}_{21}\mathbb{I}_{11}^{-1}\mathbb{I}_{12}. \end{aligned}$$

Takže asymptotický rozptyl $\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{2n} - \boldsymbol{\theta}_{02})$ je $(\mathbb{I}_{22} - \mathbb{I}_{21}\mathbb{I}_{11}^{-1}\mathbb{I}_{12})^{-1} \geq \mathbb{I}_{22}^{-1}$. Odečtený součin tří matic je daň za neznalost parametru $\boldsymbol{\theta}_{01}$ v modelu \mathcal{P} . Tuto úvahu můžeme obrátit a vidíme, že asymptotický rozptyl $\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{1n} - \boldsymbol{\theta}_{01})$ za neznalosti rušivého parametru $\boldsymbol{\theta}_{02}$ je $(\mathbb{I}_{11} - \mathbb{I}_{12}\mathbb{I}_{22}^{-1}\mathbb{I}_{21})^{-1}$, zatímco kdybychom rušivý parametr znali přesně, rozptyl by byl \mathbb{I}_{11}^{-1} . Pokud matice \mathbb{I}_{12} není nulová, tyto rozptyly nejsou stejné a naivní přístup proto selhává.

Nyní můžeme definovat testové statistiky pro testování hypotézy H_0^* :

(i) Věrohodnostní poměr

$$\lambda_n^* = \frac{L_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)}{L_n(\boldsymbol{\theta}_n)},$$

(ii) Waldova statistika

$$W_n^* = n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{1n} - \boldsymbol{\theta}_{H1})^\top \widehat{\mathbb{I}}_{11.2}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{1n} - \boldsymbol{\theta}_{H1}),$$

(iii) Raova (skórová) statistika

$$R_n^* = \frac{1}{n}U_n(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n)^\top \widehat{\mathbb{I}}^{-1}(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n)U_n(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n) = \frac{1}{n}U_{1n}(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n)^\top \widehat{\mathbb{I}}_{11.2}^{-1}(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n)U_{1n}(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n).$$

Waldova statistika pro test $H_0^* : \theta_{01} = 0$ při $m = 1$ je vlastně druhou mocninou podílu odhadu parametru a jeho odhadnuté směrodatné odchylky. Vzhledem k tomu, že tyto podíly tisknou takřka všechny statistické programy, je Waldova statistika v praxi nejpoužívanější.

Nyní definované statistiky již mají očekávané limitní rozdělení:

Věta. Jsou-li splněny podmínky regularity, pak za platnosti H_0^*

$$\left. \begin{array}{l} (i) \quad 2 \ln \lambda_n^* \\ (ii) \quad W_n^* \\ (iii) \quad R_n^* \end{array} \right\} \xrightarrow{d} \chi_m^2.$$

Tvrzení (ii) je triviální, ale důkaz (i) a (iii) není jednoduché ve statistické literatuře najít. Tvrzení (i) je dokázáno například v knihách Rao (1978, oddíl 6e.3) a Serfling (1980, oddíl 4.4.4). Serflingův důkaz však obsahuje chybu. Proto zde tvrzení (i) a (iii) dokážeme.

Důkaz. Dokažme nejprve (i). Rozvojem $\ell_n(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n)$ v Taylorovu řadu kolem bodu $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n$ dostaneme

$$\ell_n(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n) = \ell_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n) + U_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)^\top (\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n) + \frac{1}{2}(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n)^\top [-I_n(\boldsymbol{\theta}_n^*)] (\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_n),$$

kde $\boldsymbol{\theta}_n^*$ leží na přímce mezi $\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n$ a $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n$. Za platnosti H_0^* tedy $n^{-1}I_n(\boldsymbol{\theta}_n^*) \xrightarrow{p} \mathbb{I}(\boldsymbol{\theta}_0)$. Jelikož $U_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n) = 0$, platí

$$2 \ln \lambda_n^* = 2[\ell_n(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n) - \ell_n(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n)] = \sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n - \widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n)^\top \mathbb{I}(\boldsymbol{\theta}_0) \sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n - \widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n) + o_P(1).$$

Z aproximací pro $\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_0)$ a $\sqrt{n}(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_0)$ uvedených v (1) a (2) ihned plyne, že

$$\sqrt{n}(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_n - \widetilde{\boldsymbol{\theta}}_n) = [\mathbb{I}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0) - \mathbb{B}(\boldsymbol{\theta}_0)] \frac{1}{\sqrt{n}}U_n(\boldsymbol{\theta}_0) + o_P(1),$$

kde

$$\mathbb{B}(\boldsymbol{\theta}_0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{I}_{22}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0) \end{pmatrix}$$

je matice $d \times d$. Limitní rozdění $2 \ln \lambda_n^*$ je tudíž totožné s rozdělením náhodné veličiny $\mathbf{Z}^T \mathbb{A} \mathbf{Z}$, kde $\mathbf{Z} \sim \mathbb{N}_d(\mathbf{0}, \mathbb{I})$ a

$$\mathbb{A} \equiv (\mathbb{I}^{-1} - \mathbb{B})\mathbb{I}(\mathbb{I}^{-1} - \mathbb{B}) = \mathbb{I}^{-1} - \mathbb{B}.$$

Argument $\boldsymbol{\theta}_0$ jsme u matic \mathbb{B} a \mathbb{I} pro zjednodušení přestali psát. Ježto $\mathbb{A} \mathbb{I}$ je idempotentní matice, $\mathbf{Z}^T \mathbb{A} \mathbf{Z} \sim \chi_{\text{tr}(\mathbb{A} \mathbb{I})}^2$. Zbývá určit $\text{tr}(\mathbb{A} \mathbb{I}) = r(\mathbb{A} \mathbb{I}) = r(\mathbb{I} \mathbb{A} \mathbb{I})$. Ale snadno se ověří, že

$$\mathbb{I} \mathbb{A} \mathbb{I} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{11.2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Takže hledaný počet stupňů volnosti je $r(\mathbb{I} \mathbb{A} \mathbb{I}) = m$.

Nyní přistupme k důkazu (iii). Za platnosti H_0^* máme $\hat{\mathbb{I}}^{-1}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n) \xrightarrow{p} \mathbb{I}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0)$. Víme, že $U_{2n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n) = 0$ a Taylorovým rozvojem dostaneme

$$\frac{1}{\sqrt{n}} U_{1n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n) = \frac{1}{\sqrt{n}} U_{1n}(\boldsymbol{\theta}_0) + \frac{1}{n} \frac{\partial U_{1n}(\boldsymbol{\theta}_n^*)}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \sqrt{n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_0),$$

kde $\boldsymbol{\theta}_n^* \xrightarrow{p} \boldsymbol{\theta}_0$ a $n^{-1} \frac{\partial U_{1n}(\boldsymbol{\theta}_n^*)}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \xrightarrow{p} -(\mathbb{I}_{11}(\boldsymbol{\theta}_0), \mathbb{I}_{12}(\boldsymbol{\theta}_0))$. Z aproximace (2) pro $\sqrt{n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n - \boldsymbol{\theta}_0)$ plyne

$$\frac{1}{\sqrt{n}} U_{1n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n) = \frac{1}{\sqrt{n}} U_{1n}(\boldsymbol{\theta}_0) + \mathbb{I}_{12}(\boldsymbol{\theta}_0) \mathbb{I}_{22}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0) \frac{1}{\sqrt{n}} U_{2n}(\boldsymbol{\theta}_0) + o_P(1).$$

Jelikož $n^{-1/2} U_n(\boldsymbol{\theta}_0) \xrightarrow{d} \mathbb{N}_d(\mathbf{0}, \mathbb{I}(\boldsymbol{\theta}_0))$, limitní rozdění $\frac{1}{\sqrt{n}} U_{1n}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_n)$ je m -rozměrné normální s nulovou střední hodnotou. Snadno se spočte, že asymptotický rozptyl je roven $\mathbb{I}_{11.2}(\boldsymbol{\theta}_0)$.

Označíme-li \mathbf{Z} libovolný náhodný vektor s rozdělením $\mathbb{N}_m(\mathbf{0}, \mathbb{I}_{11.2}(\boldsymbol{\theta}_0))$, hned vidíme, že limitní rozdění R_n^* je totožné s rozdělením náhodné veličiny

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Z} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}^T \mathbb{I}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0) \begin{pmatrix} \mathbf{Z} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \mathbf{Z}^T \mathbb{I}^{11}(\boldsymbol{\theta}_0) \mathbf{Z} = \mathbf{Z}^T \mathbb{I}_{11.2}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0) \mathbf{Z}$$

a $\mathbf{Z}^T \mathbb{I}_{11.2}^{-1}(\boldsymbol{\theta}_0) \mathbf{Z} \sim \chi_m^2$. □

Všechny tři testové statistiky tedy mají za hypotézy stejné limitní rozdění. Jsou však mezi nimi jiné rozdíly. Za prvé, k výpočtu Raovy skórové statistiky stačí odhadnout parametr jen za platnosti hypotézy, tedy v často mnohem jednodušším submodelu \mathcal{P}_H . Pro Waldovu statistiku potřebujeme odhad v obecném modelu \mathcal{P} a pro věrohodnostní poměr odhady oba. Tyto dvě statistiky jsou tedy výpočetně náročnější. Za druhé, je rozšířen názor, že Waldova statistika konverguje ke svému limitnímu rozdění mnohem pomaleji než skórová statistika nebo poměr věrohodností a proto při běžných rozsazích výběru testy založené na Waldově statistice často nedodržují požadovanou hladinu. Toto tvrzení vychází z praktických zkušeností odborníků, kteří tyto testy používají, je však obtížné najít pro ně teoretické zdůvodnění ve statistické literatuře.

4. PŘÍKLADY

V této kapitole uvedeme několik příkladů testových statistik, které lze odvodit jako Raovy skórové statistiky v modelech s rušivými parametry.

Příklad 1. Znaménkový test. Anděl (1999) ukazuje odvození testové statistiky pro znaménkový test doplněný testem na pořadí, kterou publikovali Rayner a Best (1997). Máme dvě ošetření A a B. První skupina n_1 osob vyzkouší nejprve A a pak B a zaznamená, kterému ošetření dává přednost. Druhá skupina složená z jiných n_2 osob testuje ošetření v opačném pořadí a také zaznamená své preference. Chceme rozhodnout, zda je mezi oběma ošetřeními nějaký rozdíl. Anděl (1999) předpokládá, že $n_1 = n_2$, ale my tuto podmínku klást nebudeme.

Označme N_{k1} počet lidí z k -té skupiny, kteří preferovali ošetření A a N_{k2} počet lidí z k -té skupiny, kteří preferovali B. Nechť dále $N_{1j} + N_{2j} = N_j$, $j = 1, 2$ a $n_1 + n_2 = n$. Situaci můžeme popsat následujícím modelem: Máme dva nezávislé binomické výběry, $N_{11} \sim \text{Bi}(n_1, p_1)$ a $N_{21} \sim \text{Bi}(n_2, p_2)$. Parametr p_k vyjadřuje pravděpodobnost, že člověk z k -té skupiny preferuje ošetření A. Chceme testovat hypotézy $H_0 : (p_1 + p_2)/2 = 1/2$ a $H'_0 : p_1 = p_2$. Hypotéza H_0 znamená, že není rozdíl mezi ošetřeními a hypotéza H'_0 znamená, že nezáleží na pořadí, v jakém byla ošetření testována. Vzhledem k těmto hypotézám zavedeme nové parametry ϕ a ξ tak, že $p_1 = 1/2 + \xi + \phi$ a $p_2 = 1/2 + \xi - \phi$. Hypotézy teď můžeme psát $H_0 : \xi = 0$ a $H'_0 : \phi = 0$.

Sestavme nyní skórový test hypotézy $H_0 : \xi = 0$. Máme parametr $\theta = (\xi, \phi)^T$ a parametrický prostor $\Theta = \{(\xi, \phi)^T \in (-1/2, 1/2)^2 : |\xi + \phi| < 1/2, |\xi - \phi| < 1/2\}$. Cílový parametr je ξ , jeho dimenze je $m = 1$ a rušivý parametr je ϕ .

Logaritmus věrohodnosti je, až na konstantu,

$$\ell_n(\theta) = N_{11} \ln\left(\frac{1}{2} + \xi + \phi\right) + N_{12} \ln\left(\frac{1}{2} - \xi - \phi\right) + N_{21} \ln\left(\frac{1}{2} + \xi - \phi\right) + N_{22} \ln\left(\frac{1}{2} - \xi + \phi\right).$$

Derivováním podle ξ a podle ϕ spočítáme skóre

$$U_{1n}(\theta) = \frac{N_{11}}{\frac{1}{2} + \xi + \phi} - \frac{N_{12}}{\frac{1}{2} - \xi - \phi} + \frac{N_{21}}{\frac{1}{2} + \xi - \phi} - \frac{N_{22}}{\frac{1}{2} - \xi + \phi},$$

$$U_{2n}(\theta) = \frac{N_{11}}{\frac{1}{2} + \xi + \phi} - \frac{N_{12}}{\frac{1}{2} - \xi - \phi} - \frac{N_{21}}{\frac{1}{2} + \xi - \phi} + \frac{N_{22}}{\frac{1}{2} - \xi + \phi}.$$

Odhadem Fisherovy informační matice je výběrová informace dělená n :

$$\hat{I}_{11}(\theta) = \hat{I}_{22}(\theta) = \frac{4n_1/n}{1 - 4(\xi + \phi)^2} + \frac{4n_2/n}{1 - 4(\xi - \phi)^2},$$

$$\hat{I}_{12}(\theta) = \hat{I}_{21}(\theta) = \frac{4n_1/n}{1 - 4(\xi + \phi)^2} - \frac{4n_2/n}{1 - 4(\xi - \phi)^2}.$$

Nyní potřebujeme odhad $\tilde{\phi}$ rušivého parametru ϕ za platnosti $H_0 : \xi = 0$. Víme, že $\tilde{\phi}$ řeší $U_{2n}(0, \tilde{\phi}) = 0$, což dává $\tilde{\phi} = (N_{11} + N_{22} - N_{12} - N_{21})/(2n)$. Zbývá spočítat $U_{1n}(0, \tilde{\phi})$ a $\hat{I}_{11.2}(0, \tilde{\phi})$. Po úpravě dostaneme

$$U_{1n}(0, \tilde{\phi}) = n \left(\frac{N_{11} - N_{22}}{N_{11} + N_{22}} + \frac{N_{21} - N_{12}}{N_{21} + N_{12}} \right)$$

a

$$\hat{I}_{11.2}(0, \tilde{\phi}) = \frac{4n_1.n_2/n}{(N_{11} + N_{22})(N_{12} + N_{21})}.$$

Všimněme si, že je-li $n_1 = n_2$, pak za platnosti hypotézy $I_{12} = I_{21} = 0$. V takovém případě $\hat{I}_{11.2}(0, \tilde{\phi}) = I_{11}(0, \tilde{\phi})$ a tudíž zde nezáleží na tom, zda rušivý parametr ϕ je znám či nikoli.

Raova skórová statistika po úpravě vyjde

$$R_n^* = \frac{U_{1n}^2(0, \tilde{\phi})}{n\hat{I}_{11,2}(0, \tilde{\phi})} = \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} \right) \frac{(N_{11}N_{21} - N_{12}N_{22})^2}{(N_{11} + N_{22})(N_{12} + N_{21})}.$$

Její limitní rozdělení je χ_1^2 a v případě $n_1 = n_2$ je totožná se statistikou, kterou uvádí Anděl (1999). Stejným způsobem se odvodí statistika pro test hypotézy $H'_0 : \phi = 0$.

Příklad 2. Test exponenciality proti weibullovské alternativě. Nechť jsou dána nezávislá a stejně rozdělená pozorování X_1, \dots, X_n . Chtěli bychom vědět, zda mají exponenciální rozdělení, a jako alternativu budeme uvažovat rozdělení Weibullovo. Každé X_i tedy má hustotu

$$p(x; \alpha, \beta) = \frac{\beta}{\alpha} \left(\frac{x}{\alpha} \right)^{\beta-1} \exp \left[- \left(\frac{x}{\alpha} \right)^\beta \right], \quad x > 0, \quad \alpha, \beta > 0.$$

Parametr je $\theta = (\alpha, \beta)^\top$ a parametrický prostor $\Theta = (\mathbb{R}^+)^2$.

Chceme testovat hypotézu $H_0 : \beta = 1$, neboť za její platnosti mají X_i rozdělení $\text{Exp}(1/\alpha)$ se střední hodnotou α . To je rušivý parametr. Skórový vektor má složky

$$U_1(\theta) = \sum_{i=1}^n \frac{\beta}{\alpha} \left[\left(\frac{X_i}{\alpha} \right)^\beta - 1 \right],$$

$$U_2(\theta) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\beta} \left[1 + \ln \left(\frac{X_i}{\alpha} \right)^\beta - \left(\frac{X_i}{\alpha} \right)^\beta \ln \left(\frac{X_i}{\alpha} \right)^\beta \right].$$

Fisherova informační matice má po úpravě tvar

$$\mathbb{I}(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{\beta^2}{\alpha^2} & \frac{\gamma-1}{\alpha} \\ \frac{\gamma-1}{\alpha} & \frac{1}{\beta^2} \left[\frac{\pi^2}{6} + (1-\gamma)^2 \right] \end{pmatrix},$$

kde $\gamma \doteq 0.5772$ je Eulerova konstanta.

Za platnosti $H_0 : \beta = 1$ snadno odhadneme α jako $\tilde{\alpha} = \bar{X}_n = n^{-1} \sum X_i$. Dále spočítáme

$$U_2(\tilde{\alpha}, 1) = n + \sum_{i=1}^n \ln X_i - \frac{1}{\bar{X}_n} \sum_{i=1}^n X_i \ln X_i$$

a

$$I_{22,1}(\tilde{\alpha}, 1) = \left[\frac{\pi^2}{6} + (1-\gamma)^2 \right] - \frac{(\gamma-1)^2/\tilde{\alpha}^2}{1/\tilde{\alpha}^2} = \frac{\pi^2}{6}.$$

Takže skórová statistika má tvar

$$R_n^* = \frac{U_{2n}^2(\tilde{\alpha}, 1)}{nI_{22,1}(\tilde{\alpha}, 1)} = \frac{6n}{\pi^2} \left[1 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln X_i - \frac{1}{n\bar{X}_n} \sum_{i=1}^n X_i \ln X_i \right]^2$$

a její limitní rozdělení je χ_1^2 . V tomto příkladě můžeme jen ocenit, že jsme nemuseli počítat odhady parametrů obecného Weibullova rozdělení.

TABULKA 1. Délky telefonních hovorů prof. X (min:sec)

0:18	3:42	0:48	0:48	0:54	0:18	1:48	3:24	1:42
0:12	0:36	1:12	2:00	0:42	4:06	3:42	2:00	0:30
2:54	3:42	12:06	0:36	2:12	3:36	1:06	2:30	
2:12	2:54	2:18	0:06	1:54	1:24	1:12	3:24	

V tabulce 1 jsou uvedeny délky výchozích telefonních hovorů nejmenovaného zaměstnance KPMS za jeden měsíc ($n = 34$). Přesvědčme se s pomocí naší skórové statistiky, zda tato data neodporují obecnému přesvědčení o exponenciálním rozdělení doby telefonního hovoru. Snadno spočítáme, že v tomto případě $R_n^* = 1,158$, což je mnohem menší než 3,842, 95% kvantil χ_1^2 rozdělení. Nemůžeme tedy zamítnout exponencialitu ve prospěch Weibullova rozdělení.

Příklad 3. Test exponenciality proti gama alternativě. Opět máme nezávislá a stejně rozdělená pozorování X_1, \dots, X_n a chceme testovat, zda mají exponenciální rozdělení. Za alternativu tentokrát vezmeme gama rozdělení. Hustota X_i má tedy tvar

$$f(x; a, p) = \frac{a^p}{\Gamma(p)} x^{p-1} e^{-ax}, \quad x > 0, \quad a, p > 0.$$

Parametr je $\theta = (a, p)^\top$ a parametrický prostor $\Theta = (\mathbb{R}^+)^2$.

Chceme testovat hypotézu $H_0 : p = 1$. Za platnosti H_0 mají X_i rozdělení $\text{Exp}(a)$ se střední hodnotou $1/a$. Rušivý parametr je a . Skórový vektor má složky

$$U_1(\theta) = \frac{np}{a} - \sum_{i=1}^n X_i,$$

$$U_2(\theta) = n \ln a - n \frac{\Gamma'(p)}{\Gamma(p)} + \sum_{i=1}^n \ln X_i.$$

a Fisherova informační matice jest

$$\mathbb{I}(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{p}{a^2} & -\frac{1}{a} \\ -\frac{1}{a} & \psi''\left(\frac{p}{a}\right) \end{pmatrix},$$

kde $\psi''(p) = \frac{d^2 \ln \Gamma(p)}{dp^2} = \frac{\Gamma''(p)}{\Gamma(p)} - \left[\frac{\Gamma'(p)}{\Gamma(p)} \right]^2$.

Za platnosti $H_0 : p = 1$ odhadneme a jako $\tilde{a} = 1/\bar{X}_n$. Jelikož $\Gamma(1) = 1$, $\Gamma'(1) = -\gamma$ a $\Gamma''(1) = \pi^2/6 + \gamma^2$, snadno zjistíme, že

$$U_2(\tilde{a}, 1) = n \left(\gamma + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln \frac{X_i}{\bar{X}_n} \right)$$

a $I_{22.1}(\tilde{a}, 1) = \frac{\pi^2}{6} - 1$. Raova skórová statistika má tvar

$$R_n^* = \frac{U_{2n}^2(\tilde{a}, 1)}{n I_{22.1}(\tilde{a}, 1)} = \frac{6n}{\pi^2 - 6} \left(\gamma + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln X_i - \ln \bar{X}_n \right)^2$$

a její limitní rozdělení je opět χ_1^2 .

Spočítáme-li tuto statistiku z dat uvedených v tabulce 1, dostaneme 1,509. I to je hluboko pod kritickou hodnotou a exponencialitu tedy nemůžeme zamítnout ani ve prospěch gama rozdělení.

5. ZOBECNĚNÍ

Maximálně věrohodný odhad samozřejmě není jediná možnost, jak odhadnout parametry modelu \mathcal{P} . Často se používají i jiné odhady, založené na kvazivěrohodnosti nebo obecněji na nějaké rovnici odhadu $U(\hat{\theta}_n) = \mathbf{0}$, kde $U(\theta) = \sum_{i=1}^n \psi(\theta | X_i)$ již není skóre odvozené z nějaké věrohodnostní funkce, ale obecná funkce parametrů a pozorování. Budeme ji nazývat pseudoskóre. Do této třídy odhadů spadá například mnohé M-odhady, parciálně věrohodný odhad zavedený Coxem (1972) pro model proporcionálního rizika, Wedderburnův (1974) kvazivěrohodnostní odhad pro

zobecněné lineární modely, zobecněné rovnice odhadu (GEE) Lianga a Zegera (1986) pro korelovaná data, pseudověrohodnostní odhad Breslowa a Claytona (1993) pro zobecněné lineární modely s náhodnými efekty a řada dalších důležitých odhadů.

Aby řešení $\hat{\theta}_n$ rovnice $U(\hat{\theta}_n) = \mathbf{0}$ mělo naději být konsistentním odhadem, musí platit $E_{\theta_0} \psi(\theta_0) = \mathbf{0}$. Na rozdíl od maximálně věrohodného odhadu však nyní obecně

$$\text{var}_{\theta_0} \psi(\theta_0) \neq -E_{\theta_0} \frac{\partial \psi(\theta_0)}{\partial \theta^\top}.$$

Označme tedy levou stranu této nerovnosti (rozptyl pseudoskóre) Σ a pravou stranu (minus derivace pseudoskóre) \mathbb{D} . Obě matice typu $d \times d$ rozdělíme na čtyři bloky odpovídající cílovým a rušivým parametrům. Budeme předpokládat, že odhad $\hat{\theta}_n$ je slabě konsistentní a že $n^{-1/2}U(\hat{\theta}_n)$ je asymptoticky normální s nulovou střední hodnotou a rozptylovou maticí Σ . Z toho již plyne, že $\sqrt{n}(\hat{\theta}_n - \theta_0) \xrightarrow{d} \mathbb{N}_d(\mathbf{0}, \mathbb{D}^{-1}\Sigma\mathbb{D}^{-1})$.

Jak je to s testováním složené hypotézy $H_0^* : \theta_{01} = \theta_{H1}$ v tomto případě? Je zřejmé, že test poměrem věrohodností není možné zavést zcela obecně. Waldův test je zato díky asymptotické normalitě $\hat{\theta}_n$ snadno aplikovatelný. Raovu skórovou statistiku je nutné upravit:

$$R_n = \frac{1}{n} U_1(\tilde{\theta}_n)^\top \mathbb{V}^{-1} U_1(\tilde{\theta}_n),$$

kde $\tilde{\theta}_n$ je odhad parametru za hypotézy,

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} I_m & -\mathbb{D}_{12}\mathbb{D}_{22}^{-1} \\ & \mathbb{D}_{22} \end{pmatrix} \Sigma \begin{pmatrix} I_m \\ -\mathbb{D}_{22}^{-1}\mathbb{D}_{12} \end{pmatrix}$$

a I_m zde představuje jednotkovou matici typu $m \times m$. Stejný postup, jakým jsme odvodili limitní rozdělení Raovy statistiky v předchozí kapitole, nám ukáže, že i tato statistika má asymptoticky rozdělení χ_m^2 .

LITERATURA

- Anděl, J. (1999) Asymptotické testy. *Informační Bulletin ČSS*, roč. **10**, č. 3, 10–21.
- Breslow, N. E. a Clayton, D. G. (1993) Approximate inference in generalized linear mixed models. *JASA*, **88**, 9–25.
- Cox, D. R. (1972) Regression models and life-tables (with Discussion). *JRSS B*, **34**, 187–220.
- Lehmann, E. L. (1983) *Theory of Point Estimation*. New York: Wiley.
- Liang, K.-Y. a Zeger, S. L. (1986) Longitudinal data analysis using generalized linear models. *Biometrika*, **73**, 13–22.
- Neyman, J. a Pearson, E. S. (1928) On the use and interpretation of certain test criteria for purposes of statistical inference. *Biometrika*, **20A**, 175–240 a 263–294.
- Rao, C. R. (1947) Large sample tests of statistical hypotheses concerning several parameters with applications to problems of estimation. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **44**, 50–57.
- Rao, C. R. (1978) *Lineární metody statistické indukce a jejich aplikace*. Praha: Academia.
- Rayner, J. C. W. a Best, D. J. (1997) How order affects the sign test. *Biometrics*, **53**, 1416–1421.
- Serfling, R. J. (1980) *Approximation Theorems of Mathematical Statistics*. New York: Wiley.
- Wald, A. (1943) Tests of statistical hypotheses concerning several parameters when the number of observations is large. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **54**, 426–482.
- Wedderburn, R. W. M. (1974) Quasi-likelihood functions, generalized linear models, and the Gauss-Newton method. *Biometrika*, **61**, 439–447.

KONFIDENČNÍ A PRAHOVÉ ELIPSOIDY V DEFORMAČNÍCH MĚŘENÍCH

PAVLA KUNDEROVÁ

ABSTRAKT. Confidence and joint confidence ellipsoids, threshold and joint threshold ellipsoids within a regular multiePOCH linear regression model with nuisance parameters are derived.

Резюме. В статье введены доверительные и совместные доверительные эллипсоиды, пороговые и совместные пороговые эллипсоиды в линейной регрессионной модели с мешающими параметрами.

1. ÚVOD, OZNAČENÍ

Ověření stability velkých inženýrských staveb (mostů, přehrad a pod.) resp. sledování jejich případných deformací v čase se provádí měřeními bodů určité geodetické sítě, která se opakuje ve vhodné zvolených časových okamžicích-epochách (viz [1], kap. 9).

Průběh deformací je modelován pomocí multiePOCHového lineárního regresního modelu. Existují dva základní typy multiePOCHových modelů (viz [1], str. 366):

a) Modely s pevnými a proměnnými parametry:

opakovaná měření, která slouží k popisu průběhu deformací určitého objektu se realizují na geodetické síti, která je speciálně navržena k tomuto účelu. Skládá se ze skupiny podpůrných bodů, jejichž polohu pokládáme za stabilní (tento předpoklad se ověřuje v průběhu měření) a ze skupiny pohyblivých (nestabilních) bodů, jejichž pozice vzhledem k pevným bodům jsou měřeny. Souřadnice pevných bodů jsou a priori neznámé. Po měření v každé epoše se určují (odhadují) jak souřadnice stabilních bodů tak souřadnice nestabilních bodů. Zjištěné souřadnice pevných bodů slouží k ověření hypotézy o jejich stabilitě.

b) Modely pouze s proměnnými parametry:

sledují se souřadnice nestabilních (pohyblivých bodů) vzhledem ke geodetické síti pevných bodů, jejichž souřadnice jsou v tomto modelu pokládány a priori za známé.

Uvažujme model prvního typu. Předpokládejme, že se deformační měření provádějí v m epochách, kdy sledujeme celkem k stabilních bodů a l nestabilních (pohyblivých) bodů. Body uvažované geodetické sítě jsou charakterizovány souřadnicemi, které mohou být z R^k , $k = 1, 2, 3, \dots$

V tomto článku budeme předpokládat, že souřadnice sledovaných bodů jsou z R^2 , tj. měření v j -té epoše ($j = 1, \dots, m$) charakterizuje $2k$ -rozměrný vektor β_1 tzv. rušivých parametrů (souřadnice pevných bodů) a $2l$ -rozměrný vektor $\beta_{2,j}$ tzv. užitečných parametrů (souřadnice pohyblivých bodů).

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62J05; Secondary 62P30.

Klíčová slova. Lineární regresní model, geodetické sítě, konfidenční a prahové elipsoidy.

Při hodnocení stability resp. nestability objektu v čase jsou velmi užitečné *konfidenční elipsoidy*. *Prahové elipsoidy* umožňují ocenit spolehlivost tvrzení: “poloha stejných bodů se ve dvou různých epochách měření nezměnila” (viz [2], str. 157).

Budeme užívat název elipsoid i když v některých případech jde o intervaly nebo o elipsy.

V dalším textu budeme užívat následující označení

R^n	prostor všech n -rozměrných reálných vektorů;
$u_p, A_{m,n}$	reálný sloupcový p -rozměrný vektor, reálná $m \times n$ matice;
$A', R(A)$,	transpozice matice, prostor generovaný sloupci matice A ;
$N(A), r(A)$,	nulový prostor a hodnota matice A ;
$A \otimes B$	Kroneckerův (tensorový) součin matic A, B ;
A^-	pseudoinverzní matice k matici A (splňující $AA^-A = A$);
A^+	Moore-Penroseova pseudoinverzní matice k matici A (splňující $AA^+A = A, A^+AA^+ = A^+, (AA^+)' = AA^+, (A^+A)' = A^+A$);
P_A	ortogonální projektor na $R(A)$;
$M_A = I - P_A$	ortogonální projektor na $R^\perp(A) = N(A')$;
I_k	$k \times k$ jednotková matice;
$1_k = (1, \dots, 1)' \in R^k$,	
$0_{m,n}$	$m \times n$ nulová matice;
$\chi_r^2(0)$	centrální χ^2 -rozdělení o r stupních volnosti;
$\chi_r^2(\delta)$	necentrální χ^2 -rozdělení o r stupních volnosti s parametrem necentrality δ ;
$\chi_r^2(0, 1 - \alpha)$	$(1 - \alpha)$ -kvantil příslušného rozdělení.

2. MULTIEPOCHOVÝ LINEÁRNÍ REGRESNÍ MODEL

Uvažujme následující model měření prováděného v m epochách

$$(1) \quad Y^{(m)} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & 0 & \dots & 0 \\ X_1 & 0 & X_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ X_1 & 0 & 0 & \dots & X_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_{2,1} \\ \vdots \\ \beta_{2,m} \end{pmatrix} + \varepsilon^{(m)},$$

kde

$Y^{(m)} = (Y_1', \dots, Y_m)'$ je mn -rozměrný vektor pozorování,

$\text{var}(Y^{(m)}) = \Sigma^{(m)} = I_m \otimes \Sigma$, kde Σ je známá, pozitivně definitní matice,

Y_j je n -rozměrný vektor hodnot naměřených v j -té epoše, $j = 1, \dots, m$,

$n \times 2k$ matice X_1 je matice plánu příslušná vektoru rušivých parametrů $\beta_1 \in R^{2k}$,

$n \times 2l$ matice X_2 je matice plánu odpovídající vektoru užitečných parametrů

$\beta_{2,j} \in R^{2l}$, $j = 1, \dots, m$.

Model (1) lze zapsat ve tvaru

$$Y^{(m)} = (\mathbf{X}_1^{(m)}, \mathbf{X}_2^{(m)}) \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \varepsilon^{(m)},$$

kde

$$\mathbf{X}_1^{(m)} = 1_m \otimes X_1, \quad \mathbf{X}_2^{(m)} = I_m \otimes X_2,$$

$$\boldsymbol{\beta}_2 = \begin{pmatrix} \beta_{2,1} \\ \beta_{2,2} \\ \vdots \\ \beta_{2,m} \end{pmatrix}, \text{ souřadnice pohyblivých bodů ve všech epochách.}$$

Věta *Nechť jsou v modelu (1) měření po m -té epoše splněny tyto předpoklady: $r(\mathbf{X}_1) = 2k < n$, $r(\mathbf{X}_2) = 2l < n$, $r(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) = 2k + 2l$. Potom pro globálně nejlepší lineární nestranné odhady (BLUE) parametrů β_1 a $\boldsymbol{\beta}_2$, $\beta_{2,j}$, $j = 1, \dots, m$, platí*

$$(2) \quad \widehat{\beta}_1 = [m\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\mathbf{X}_1]^{-1}\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\left(\sum_{i=1}^m \mathbf{Y}_i\right),$$

$$(3) \quad \text{var}[\widehat{\beta}_1] = [m\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\mathbf{X}_1]^{-1},$$

$$(4) \quad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \{[\mathbf{I}_m \otimes (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}] - [\mathbf{1}_m\mathbf{1}'_m \otimes (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_1[m\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\mathbf{X}_1]^{-1}\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+]\} \mathbf{Y}^{(m)},$$

$$(5) \quad \mathbf{V} = \text{var}[\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2] = [\mathbf{I}_m \otimes (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}] + [\mathbf{1}_m\mathbf{1}'_m \otimes (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_1[m\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\mathbf{X}_1]^{-1}\mathbf{X}'_1\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2(\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}],$$

$$(6) \quad \widehat{\beta}_{2,j} = (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1} \cdot \left[\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_1[m\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\mathbf{X}_1]^{-1}\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\left[\sum_{i=1}^m \mathbf{Y}_i\right] \right], \quad j = 1, \dots, m,$$

$$(7) \quad \mathbf{V}_{jj} = \text{var}[\widehat{\beta}_{2,j}] = (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1} + (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_1[m\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\mathbf{X}_1]^{-1}\mathbf{X}'_1\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2(\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}, \quad j = 1, \dots, m,$$

$$(8) \quad \mathbf{V}_{r,s} = \text{cov}[\widehat{\beta}_{2,r}, \widehat{\beta}_{2,s}] = (\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_1[m\mathbf{X}'_1(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+\mathbf{X}_1]^{-1}\mathbf{X}'_1\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2(\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}, \quad \forall r, s = 1, \dots, m, \quad r \neq s.$$

kde

$$(\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2}\Sigma\mathbf{M}_{\mathbf{X}_2})^+ = \Sigma^{-1} - \Sigma^{-1}\mathbf{X}_2(\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}\mathbf{X}_2)^{-1}\mathbf{X}'_2\Sigma^{-1}.$$

Důkaz: [5], Theorem 1.

Předpoklad

Dále budeme předpokládat, že $\mathbf{Y}^{(m)} \sim N_{nm} \left[(\mathbf{X}_1^{(m)}, \mathbf{X}_2^{(m)}) \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \boldsymbol{\beta}_2 \end{pmatrix}, \mathbf{I}_m \otimes \Sigma \right]$.

Potom

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 \sim N_{2lm}(\boldsymbol{\beta}_2, \mathbf{V}).$$

3. KONFIDENČNÍ ELIPSOIDY

Nejprve uvedeme obecnou definici konfidenční oblasti. Mějme lineární regresní model $Y = X\beta + \varepsilon$, $\beta \in \underline{\beta} \subset R^k$, nechť B_k označuje třídu borelovských množin v prostoru R^k .

Definice 1 (viz [4], str. 87)

Nechť zobrazení $C(\cdot) : R^n \rightarrow B_k$ má následující vlastnost

$$\forall \{\beta \in \underline{\beta}\} \quad P_\beta[\beta \in C(Y)] = 1 - \alpha, \quad \alpha \in (0, 1).$$

Náhodná množina $C(Y)$ se nazývá $(1 - \alpha)$ -konfidenční oblast pro parametr β .

(V praxi se užívá výraz konfidenční oblast pro realizaci $C(y)$ náhodné množiny $C(Y)$).

Vraťme se k multiepochovému regresnímu modelu (1). Označme

$$\beta_{2,j} = \begin{pmatrix} \beta_{2,j}^{(1)} \\ \vdots \\ \beta_{2,j}^{(l)} \end{pmatrix}, \text{ souřadnice } l \text{ pohyblivých bodů v } j\text{-té epoše měření, } j = 1, \dots, m.$$

Z předpokladu víme, že

$$\widehat{\beta}_{2,j} \sim N_{2l}(\beta_{2,j}, V_{jj}), \quad j = 1, \dots, m.$$

a) Zajímáme se nejprve o souřadnice i -tého pohyblivého bodu v j -té epoše.

Zvolme blokovou matici $H_i = (0_{2,2}, \dots, I_2, \dots, 0_{2,2})$, kde i -tý blok ($i = 1, \dots, l$), je tvořen jednotkovou maticí, ostatní bloky jsou nulové. Potom

$$\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} = H_i \widehat{\beta}_{2,j} \sim N_2(\beta_{2,j}^{(i)}, H_i V_{jj} H_i').$$

Podle Pearsonova lematu [$\eta \sim N_s(O, W) \Rightarrow \eta' W^{-1} \eta \sim \chi_{r(W)}^2(0)$] platí, že

$$(\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j}^{(i)})' [H_i V_{jj} H_i']^{-1} (\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j}^{(i)}) \sim \chi_2^2(0),$$

a proto $(1 - \alpha)$ -konfidenční elipsoid pro souřadnice i -tého bodu v j -té epoše, $i = 1, \dots, l$, $j = 1, \dots, m$, má tvar

$$E(\beta_{2,j}^{(i)}) = \left\{ u \in R^2 : (u - \widehat{\beta}_{2,j}^{(i)})' [H_i V_{jj} H_i']^{-1} (u - \widehat{\beta}_{2,j}^{(i)}) \leq \chi_2^2(0, 1 - \alpha) \right\}.$$

b) Uvažujme odhad souřadnic r -tého a s -tého bodu ve stejné (j -té) epoše, $r, s = 1, \dots, l$, $j = 1, \dots, m$, tj. náhodný vektor

$$\begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,j}^{(r)} \\ \widehat{\beta}_{2,j}^{(s)} \end{pmatrix} = H_{rs} \widehat{\beta}_{2,j} \sim N_4 \left(\begin{pmatrix} \beta_{2,j}^{(r)} \\ \beta_{2,j}^{(s)} \end{pmatrix}, H_{rs} V_{jj} H_{rs}' \right),$$

kde

$$H_{rs} = \begin{pmatrix} 0_{2,2} & \dots & I_2 & \dots & \dots & 0_{2,2} \\ 0_{2,2} & \dots & \dots & I_2 & \dots & 0_{2,2} \end{pmatrix},$$

je bloková matice o dvou řádcích a l sloupcích tvořená bloky o rozměru 2×2 , v prvním řádku je matice I_2 na r -tém místě, ostatní bloky jsou nulové, ve druhém řádku je matice I_2 na s -tém místě, ostatní bloky jsou nulové.

Opět užitím Pearsonova lematu dostaneme, že

$$\begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,j}^{(r)} - \beta_{2,j}^{(r)} \\ \widehat{\beta}_{2,j}^{(s)} - \beta_{2,j}^{(s)} \end{pmatrix}' [H_{rs} V_{jj} H_{rs}']^{-1} \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,j}^{(r)} - \beta_{2,j}^{(r)} \\ \widehat{\beta}_{2,j}^{(s)} - \beta_{2,j}^{(s)} \end{pmatrix} \sim \chi_4^2(0),$$

a tedy pro $(1 - \alpha)$ -konfidenční elipsoid pro souřadnice r -tého a s -tého bodu v j -té epoše měření platí

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \left[\begin{pmatrix} \beta_{2,j}^{(r)} \\ \beta_{2,j}^{(s)} \end{pmatrix} \right] \\ & = \left\{ u \in R^4 : \left[u - \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,j}^{(r)} \\ \widehat{\beta}_{2,j}^{(s)} \end{pmatrix} \right]' [\mathbf{H}_{rs} \mathbf{V}_{jj} \mathbf{H}'_{rs}]^{-1} \left[u - \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,j}^{(r)} \\ \widehat{\beta}_{2,j}^{(s)} \end{pmatrix} \right] \leq \chi_4^2(0, 1 - \alpha) \right\}. \end{aligned}$$

c) Stabilitu i -tého bodu posoudíme pomocí konfidenčního elipsoidu rozdílu souřadnic tohoto bodu v sousedních epochách měření, tj. určíme-li tzv. *relativní konfidenční elipsoid*.

Uvažujme rozdíl odhadů

$$\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,j+1}^{(i)} = \mathbf{C}_j^{(i)} \widehat{\beta}_2,$$

kde

$$(9) \quad \mathbf{C}_j^{(i)} = (\mathbf{0}_{2,2}, \dots, \mathbf{0}_{2,2}, \mathbf{I}_2, \mathbf{0}_{2,2}, \dots, \mathbf{0}_{2,2}, -\mathbf{I}_2, \mathbf{0}_{2,2}, \dots, \mathbf{0}_{2,2}),$$

je bloková matice s ml bloky o rozměru 2×2 , ve které je matice \mathbf{I}_2 na $[i + (j-1)l]$ -tém místě, matice $-\mathbf{I}_2$ na $[i + jl]$ -tém místě, ostatní bloky jsou nulové.

Obdobně jako v bodech a), b) odvodíme, že

$$P \left[(\beta_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j+1}^{(i)}) \in \mathbb{E}(\beta_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j+1}^{(i)}) \right] = 1 - \alpha,$$

kde

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(\beta_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j+1}^{(i)}) = \\ & \left\{ u \in R^2 : (u - [\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,j+1}^{(i)}])' [\mathbf{C}_j^{(i)} \mathbf{V}(\mathbf{C}_j^{(i)})']^{-1} (u - [\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,j+1}^{(i)}]) \leq \chi_2^2(0, 1 - \alpha) \right\}. \end{aligned}$$

4. SDRUŽENÉ KONFIDENČNÍ ELIPSOIDY

Mějme opět obecný lineární regresní model $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon$, $\beta \in R^k$, nechť $\alpha \in (0, 1)$ je předem zvolené číslo.

Definice 2 (viz [2], str.158)

Náhodné elipsoidy $\mathbb{E}_{1-\alpha}(\beta_i)$, $i = 1, \dots, k$, takové, že

$$P[\forall \{i = 1, \dots, k\} \quad \beta_i \in \mathbb{E}_{1-\alpha}(\beta_i)] \geq 1 - \alpha,$$

se nazývají $(1 - \alpha)$ -sdružené konfidenční elipsoidy založené na observačním vektoru \mathbf{Y} .

a) Odvodíme nejprve sdružené elipsoidy pro souřadnice jednoho (pevně zvoleného) bodu ve všech epochách měření. Uvažujme odhady souřadnic i -tého bodu ve všech epochách měření

$$\widehat{\beta}_2^{(i)} = \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,1}^{(i)} \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(i)} \\ \vdots \\ \widehat{\beta}_{2,m}^{(i)} \end{pmatrix} = \mathbf{G}_i \widehat{\beta}_2 \sim N_{2m} \left[\begin{pmatrix} \beta_{2,1}^{(i)} \\ \beta_{2,2}^{(i)} \\ \vdots \\ \beta_{2,m}^{(i)} \end{pmatrix}, \mathbf{G}_i \mathbf{V} \mathbf{G}_i' \right],$$

kde

$$G_i = \begin{pmatrix} 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2}, & I_2, 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2}, & \dots & 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2} \\ 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2}, & 0_{2,2}, 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2}, & I_2, 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2} & 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2} & 0_{2,2}, 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2}, & \dots & I_2, 0_{2,2}, \dots, 0_{2,2} \end{pmatrix},$$

je bloková matice typu $m \times lm$ taková, že v 1. řádku je matice I_2 v i -tém sloupci, ve 2. řádku je matice I_2 v $(l+i)$ -tém sloupci, atd., v m -tém řádku je matice I_2 v $[(m-1)l+i]$ -tém sloupci, ostatní bloky jsou nulové.

Užitím Pearsonova lematu

$$(10) \quad P \left[(\widehat{\beta}_2^{(i)} - \beta_2^{(i)})' [G_i V G_i']^{-1} (\widehat{\beta}_2^{(i)} - \beta_2^{(i)}) \leq \chi_{2m}^2(0, 1 - \alpha) \right] = 1 - \alpha.$$

V dalších úvahách uijeme zobecněnou Scheffého větu.

Zobecněná Scheffého věta Nechť $\eta \sim N_s(\mu, V)$, kde V je pozitivně definitní matice. Nechť A je třída všech $t \times s$ matic A takových, že $r(A) = t < s$. Potom

$$P[(\eta - \mu)' V^{-1} (\eta - \mu) \leq \chi_s^2(0, 1 - \alpha)] = 1 - \alpha$$

$$(11) \quad \Leftrightarrow P[\forall \{A \in \mathcal{A}\} : [A(\eta - \mu)]' (A V A')^{-1} A(\eta - \mu) \leq \chi_s^2(0, 1 - \alpha)] = 1 - \alpha.$$

Důkaz: [3], Theorem 2.2

Označme $A_j = (0_{2,2}, \dots, 0_{2,2}, I_2, \dots, 0_{2,2})$ blokovou matici složenou z m bloků rozměrů 2×2 takovou, že j -tý blok tvoří jednotková matice I_2 , ostatní bloky jsou nulové, $j = 1, \dots, m$. Potom

$$\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} = A_j \widehat{\beta}_2^{(i)}, \quad j = 1, \dots, m.$$

Podle uvedené zobecněné Scheffého věty plyne ze vztahů (10), (11), že

$$P \left\{ \forall \{j = 1, \dots, m\} [A_j (\widehat{\beta}_2^{(i)} - \beta_2^{(i)})]' (A_j G_i V G_i' A_j')^{-1} A_j (\widehat{\beta}_2^{(i)} - \beta_2^{(i)}) \leq \chi_{2m}^2(0, 1 - \alpha) \right\} \geq 1 - \alpha, \text{ tj.}$$

$$P \left\{ \forall \{j = 1, \dots, m\} (\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j}^{(i)})' [\text{var}(\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)})]^{-1} (\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j}^{(i)}) \leq \chi_{2m}^2(0, 1 - \alpha) \right\} \geq 1 - \alpha.$$

Elipsoidy

$$E_{1-\alpha}^s(\beta_{2,j}^{(i)}) = \{u \in R^2 : (u - \widehat{\beta}_{2,j}^{(i)})' [\text{var}(\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)})]^{-1} (u - \widehat{\beta}_{2,j}^{(i)}) \leq \chi_{2m}^2(0, 1 - \alpha)\},$$

tvoří $(1 - \alpha)$ -sdružené konfidenční elipsoidy pro souřadnice pevně zvoleného i -tého bodu ($i = 1, \dots, l$) ve všech j epochách ($j = 1, \dots, m$).

b) Stejným postupem jako v odstavci a) odvodíme sdružené elipsoidy pro rozdíly souřadnic pevně zvoleného i -tého bodu ($i = 1, \dots, l$) ve všech sousedních epochách.

Uvažujme blokovou matici

$$D^{(i)} = \begin{pmatrix} C_1^{(i)} \\ C_2^{(i)} \\ \vdots \\ C_{m-1}^{(i)} \end{pmatrix}, \text{ kde matice } C_j^{(i)} \text{ jsou dané vztahem (9).}$$

$$D^{(i)}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 = \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,1}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,2}^{(i)} \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,3}^{(i)} \\ \vdots \\ \widehat{\beta}_{2,m-1}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,m}^{(i)} \end{pmatrix} \sim N_{2(m-1)} \left[\begin{pmatrix} \beta_{2,1}^{(i)} - \beta_{2,2}^{(i)} \\ \beta_{2,2}^{(i)} - \beta_{2,3}^{(i)} \\ \vdots \\ \beta_{2,m-1}^{(i)} - \beta_{2,m}^{(i)} \end{pmatrix}, D^{(i)}V(D^{(i)})' \right].$$

Užijeme-li opět Pearsonovo lemma a zobecněnou Scheffého větu pro blokové matice

$$B_j = (0_{2,2}, \dots, I_2, \dots, 0_{2,2}),$$

o $m - 1$ blocích rozměru 2×2 , ve kterých je jednotková matice na j -tém místě, ostatní bloky jsou nulové, $j = 1, \dots, m - 1$, dokážeme toto tvrzení:

$$E_{1-\alpha}^s(\beta_{2,j}^{(i)} - \beta_{2,j+1}^{(i)}) =$$

$$\{u \in R^2 : [u - (\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,j+1}^{(i)})]' (var[\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,j+1}^{(i)}])^{-1} [u - (\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,j+1}^{(i)})] \leq \chi_{2(m-1)}^2(0, 1-\alpha)\},$$

tvorí $(1 - \alpha)$ -sdružené konfidenční elipsoidy pro rozdíl souřadnic pevně zvoleného i -tého bodu ($i = 1, \dots, l$), ve všech sousedních epochách měření [j -té a $(j + 1)$ -ní, $\forall j = 1, \dots, m - 1$].

5. PRAHOVÉ ELIPSOIDY

$(1 - \alpha)$ -konfidenční elipsoid $E(\boldsymbol{\beta})$ pokrývá skutečnou hodnotu parametru $\boldsymbol{\beta}^*$ s pravděpodobností $1 - \alpha$. Je to pojem, který přímo souvisí s přesností určení odhadu neznámého parametru.

Pojem prahového elipsoidu souvisí s testováním hypotéz o parametrech. Vyjádříme pro zjednodušení zápisů model (1) ve tvaru

$$(12) \quad Y^{(m)} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}^{(m)} \sim N_{nm}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \Sigma^{(m)}),$$

kde

$$\mathbf{X} = (\mathbf{X}_1^{(m)}, \mathbf{X}_2^{(m)}), \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \boldsymbol{\beta}_2 \end{pmatrix} \in R^{2k+2lm}.$$

Pomocná věta 1

Nechť $Y^{(m)}$ splňuje předpoklady regularity z věty 1. Potom platí

1.

$$R_0^2 = \min \left\{ (Y^{(m)} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' [\Sigma^{(m)}]^{-1} (Y^{(m)} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) : \boldsymbol{\beta} \in R^{2k+2lm} \right\}$$

$$= (Y^{(m)} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})' [\Sigma^{(m)}]^{-1} (Y^{(m)} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \sim \chi_{mn-(2k+2lm)}^2(0),$$

kde

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}' [\Sigma^{(m)}]^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' [\Sigma^{(m)}]^{-1} Y^{(m)}.$$

2. Jsou-li dány matice $H_{q,(2k+2lm)}$ a vektor h_{2k+2lm} takové, že $r(H) = q \leq 2k + 2lm$, potom

$$R_1^2 = \min \left\{ (Y^{(m)} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})' [\Sigma^{(m)}]^{-1} (Y^{(m)} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) : \boldsymbol{\beta} \in R^{2k+2lm}, H\boldsymbol{\beta} + h = 0 \right\}$$

$$= R_0^2 + (H\hat{\boldsymbol{\beta}} + h)' [H(\mathbf{X}' [\Sigma^{(m)}]^{-1} \mathbf{X})^{-1} H']^{-1} (H\hat{\boldsymbol{\beta}} + h).$$

Důkaz: [4], důkaz věty IV.1.4.

Nechť nulová hypotéza o parametru $\boldsymbol{\beta}$ má tvar

$$H_0 : H\boldsymbol{\beta} + h = 0,$$

a alternativní hypotéza

$$H_a : \mathbf{H}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{h} = \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}.$$

Tuto hypotézu testujeme pomocí testovacího kritéria $T(Y^{(m)}) = R_1^2 - R_0^2$.

Pomocná věta 2

$$T(Y^{(m)}) = R_1^2 - R_0^2 \sim \chi_q^2(0), \text{ platí-li nulová hypotéza } H_0,$$

$$T(Y^{(m)}) = R_1^2 - R_0^2 \sim \chi_q^2(\delta), \text{ platí-li alternativní hypotéza } H_a.$$

Pro parametr necentrality platí

$$\delta = (\mathbf{H}\boldsymbol{\beta}^* + \mathbf{h})'[\mathbf{H}(\mathbf{X}'[\boldsymbol{\Sigma}^{(m)}]^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{H}']^{-1}(\mathbf{H}\boldsymbol{\beta}^* + \mathbf{h}),$$

kde $\boldsymbol{\beta}^*$ je skutečná hodnota parametru $\boldsymbol{\beta}$.

Důkaz: [4], věta IV.1.4.

Síla testu v alternativě H_a je rovna

$$P[\text{zamítnutí } H_0 | \text{platí } H_a] = P[\chi_q^2(\delta) \geq \chi_q^2(0, 1 - \alpha)].$$

Je-li $\delta = 0$, tj. jestliže H_0 platí, potom se síla testu rovná riziku zamítnutí pravdivé nulové hypotézy

$$P[\text{zamítnutí } H_0 | \text{platí } H_0] = P[\chi_q^2(0) \geq \chi_q^2(0, 1 - \alpha)] = \alpha.$$

V dalším textu určíme v parametrickém prostoru hranici takové množiny (hranici tzv. prahové oblasti), na které dosáhne síla testu hodnoty κ_α , kde κ_α je číslo dost blízké číslu 1. Uvnitř prahové oblasti je síla testu menší než κ_α .

Definice 3 (viz [2], str. 158)

V modelu (12) nazveme κ_α -*prahovým elipsoidem pro parametr $\boldsymbol{\beta}$* oblast

$$T_{\kappa_\alpha}(\boldsymbol{\beta}) = \{u \in R^{2k+2lm} : (u - \boldsymbol{\beta}_0)'T(u - \boldsymbol{\beta}_0) \leq c^2\}, c \in R^1,$$

kde symetrická matice T a číslo c jsou zvoleny tak, že $T_{\kappa_\alpha}(\boldsymbol{\beta})$ splňuje následující požadavky:

a) $\boldsymbol{\beta}_0$ je hodnota parametru $\boldsymbol{\beta}$ určená nulovou hypotézou

$$H_0 : \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_0,$$

kterou testujeme proti alternativní hypotéze $H_a : \boldsymbol{\beta} \neq \boldsymbol{\beta}_0$ za rizika α ,

b) leží-li skutečná hodnota $\boldsymbol{\beta}^*$ parametru $\boldsymbol{\beta}$ na hranici $T_{\kappa_\alpha}(\boldsymbol{\beta})$, je hodnota síly testu pro alternativu H_a právě rovna κ_α .

Poznámka Z definice je zřejmé, že jakékoliv vybočení $\boldsymbol{\beta}^*$ z elipsoidu T_{κ_α} zjistí testovací procedura s pravděpodobností nejméně rovnou κ_α .

Určení prahového elipsoidu pro parametr $\boldsymbol{\beta}_2$

V modelu (1) budeme testovat hypotézu o užitečných parametrech

$$H_0 : \boldsymbol{\beta}_2 = \boldsymbol{\beta}_2^0 \text{ proti } H_a : \boldsymbol{\beta}_2 \neq \boldsymbol{\beta}_2^0.$$

Užijeme Pomocnou větu 2, ve které zvolíme $\mathbf{H}_{2lm, (2k+2lm)} = (0_{2lm, 2k}, \mathbf{I}_{2lm})$, $\mathbf{h} = -\boldsymbol{\beta}_2^0$.

Pro testové kritérium

$$T(Y^{(m)}) = (\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 - \boldsymbol{\beta}_2^0)'[(0, \mathbf{I})(\mathbf{X}'[\boldsymbol{\Sigma}^{(m)}]^{-1}\mathbf{X})^{-1}(0, \mathbf{I})']^{-1}(\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2 - \boldsymbol{\beta}_2^0)$$

platí

$$T(Y^{(m)}) \sim \chi_{2lm}^2(0), \text{ je-li } H_0 \text{ správná,}$$

nebo

$$T(Y^{(m)}) \sim \chi_{2lm}^2(\delta), \text{ je-li správná } H_a,$$

kde

$$\delta = (\beta_2^* - \beta_2^0)'[(0, I)(\mathbf{X}'[\Sigma^{(m)}]^{-1}\mathbf{X})^{-1}(0, I)']^{-1}(\beta_2^* - \beta_2^0),$$

a kde β^* je skutečná hodnota β .

Síla testu je konstantní na množině těch vektorů β_2 , pro které

$$(\beta_2 - \beta_2^0)'[(0, I)(\mathbf{X}'[\Sigma^{(m)}]^{-1}\mathbf{X})^{-1}(0, I)']^{-1}(\beta_2 - \beta_2^0) = \delta.$$

Pro zvolenou sílu testu (úroveň spolehlivosti) κ_α určíme kritickou hodnotu parametru necentrality $\delta_{krit}(\kappa_\alpha)$ ze vztahu

$$(13) \quad P[\chi_{2lm}^2(\delta_{krit}(\kappa_\alpha)) \geq \chi_{2lm}^2(0, 1 - \alpha)] = \kappa_\alpha.$$

Poznámka Při řešení této rovnice se užívá aproximace náhodné veličiny s necentrálním χ^2 -rozdělením náhodnou veličinou, která má centrální χ^2 -rozdělení. $\delta(\kappa_\alpha)$ dostaneme řešením rovnice

$$P \left[\frac{2lm + 2\delta}{2lm + \delta} \chi_{\frac{(2lm+\delta)^2}{2lm+2\delta}}^2(0) \geq \chi_{2lm}^2(0, 1 - \alpha) \right] = \kappa_\alpha,$$

interpolací v tabulkách kvantilů χ^2 -rozdělení (viz [4], str.106).

Z předchozích úvah plyne

Tvrzení 1 κ_α -prahovým elipsoidem pro parametr β_2 v modelu (1) je

(14)

$$T_{\kappa_\alpha}(\beta_2) = \left\{ u \in R^{2lm} : (u - \beta_2^0)'[(0, I)(\mathbf{X}'[\Sigma^{(m)}]^{-1}\mathbf{X})^{-1}(0, I)']^{-1}(u - \beta_2^0) \leq \delta_{krit}(\kappa_\alpha) \right\},$$

kde $\delta_{krit}(\kappa_\alpha)$ je parametr necentrálního χ^2 -rozdělení s $2lm$ stupni volnosti určený vztahem (13).

6. SDRUŽENÉ PRAHOVÉ ELIPSOIDY

Definice 4 (viz [2], str. 159)

V modelu (1) nazveme κ_α -sruženými prahovými elipsoidy pro parametry $\beta_{2,j}^{(i)}$, $i = 1, \dots, l$, $j = 1, \dots, m$, takové množiny

$$T_{\kappa_\alpha}(\beta_{2,j}^{(i)}) = \{ u \in R^2 : (u - \beta_{2,j}^{(i),0})' T_i (u - \beta_{2,j}^{(i),0}) \leq c^2 \}, \quad c \in R_1,$$

$i = 1, \dots, l$, $j = 1, \dots, m$,

ve kterých jsou 2×2 rozměrné symetrické matice T_i a číslo c zvolené tak, že $T_{\kappa_\alpha}(\beta_{2,j}^{(i)})$ vyhovují následujícím požadavkům

a) $\beta_{2,j}^{(i),0}$, ($j = 1, \dots, l$, $j = 1, \dots, m$), jsou hodnoty určené nulovou hypotézou

$$H_0 : \beta_{2,1}^{(1)} = \beta_{2,1}^{(1),0} \quad \& \quad \beta_{2,1}^{(2)} = \beta_{2,1}^{(2),0} \quad \& \quad \dots \quad \& \quad \beta_{2,m}^{(l)} = \beta_{2,m}^{(l),0},$$

kterou testujeme (za rizika α) proti alternativě

$$H_a : \text{existuje aspoň jedna dvojice indexů } i, j \text{ taková, že } \beta_{2,j}^{(i)} \neq \beta_{2,j}^{(i),0};$$

b) leží-li skutečná hodnota $\beta_{2,j}^{(i)*}$ libovolného subvektoru $\beta_{2,j}^{(i)}$ vektoru β_2 vně elipsoidu $T_{\kappa_\alpha}(\beta_{2,j}^{(i)})$, nulová hypotéza se zamítá s pravděpodobností aspoň κ_α .

Tvrzení 2

V modelu (1) jsou *sdužené prahové elipsoidy pro parametry* $\beta_{2,j}^{(i)}$, $i = 1, \dots, l$, $j = 1, \dots, m$, dány vztahy

$$T_{\kappa_\alpha}^s(\beta_{2,j}^{(i)}) = \{u \in R^2 : (u - \beta_{2,j}^{(i),0})'(\widehat{\text{var}[\beta_{2,j}^{(i)}]})^{-1}(u - \beta_{2,j}^{(i),0}) \leq \delta_{krit}(\kappa_\alpha)\},$$

kde $\delta_{krit}(\kappa_\alpha)$ je definována vztahem (13).

Toto tvrzení plyne z výrazu (14) pro prahový elipsoid $T_{\kappa_\alpha}(\beta_2)$ a ze vztahu pro sdužené elipsoidy pro parametry $\beta_{2,j}^{(i)}$ (viz odst. 4, bod a)).

Příklad (zadání formuloval prof. Kubáček, DrSc.)

V článku jsme předpokládali, že souřadnice sledovaných bodů jsou z R^2 , v tomto příkladu se pro jednoduchost výkladu omezíme na případ jednorozměrný, kdy se budou měřit výšky sledovaných bodů. V geodetické praxi je totiž při sledování plošných souřadnic nutno do měření zahrnout i měření vzdáleností a úhlů a to vede ke složitým modelům. Metodika zpracování naměřených dat v jednorozměrné situaci je stejná s metodikou užívanou ve vícerozměrných situacích.

Představme si, že na staveništi velké stavby sledujeme (po provedených zemních úpravách) jeden pevný bod a tři pohyblivé body ve třech epochách. Pro potřeby simulace zvolíme “skutečnou” počáteční výšku pevného bodu 105.032 m, “skutečné” počáteční výšky pohyblivých bodů: 107.061 m; 106.968 m; 107.210 m.

Předpokládejme, že pokles podloží lze modelovat funkcí

$$(15) \quad \beta_{2,2}^{(i)} = \beta_{2,1}^{(i)} - 0.5(1 - e^{-\gamma_i \cdot 14}), \quad \gamma_i > 0, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$(16) \quad \beta_{2,3}^{(i)} = \beta_{2,2}^{(i)} - 0.5(1 - e^{-\gamma_i \cdot 28}), \quad \gamma_i > 0, \quad i = 1, 2, 3,$$

tj. čas měříme ve dnech, první měření proběhne v čase 0, druhé měření za 14 dnů a poslední měření za dalších 14 dnů.

Předpokládejme, že $\gamma_1 = \gamma_3$, tj. že chování podloží je v těchto dvou bodech stejné, odlišné je ve druhém bodě. Se stavbou na upraveném terénu se může začít v době, kdy je pokles podloží již zanedbatelný, např. bude-li pokles mezi druhou a třetí epochou měření v 1. a 3. bodě 1 cm, resp. ve 2. bodě 0.5 cm. Z tohoto požadavku pro naši simulaci dostaneme

$$\gamma_1 = \gamma_3 = 0.277956, \quad \gamma_2 = 0.328215.$$

Dosazením do funkcí (15),(16) vypočteme “skutečné” hodnoty parametrů ve 2. a 3. epoše, výsledky v Tabulce 1.

Tabulka 1

	$\beta_{2,j}^{(1)}$	$\beta_{2,j}^{(2)}$	$\beta_{2,j}^{(3)}$
$j = 1$	107.0610	106.9680	107.2100
$j = 2$	106.5712	106.4731	106.7202
$j = 3$	106.5612	106.4681	106.7102

Experiment lze popsat nejjednodušším modelem měření

$$Y_j = \begin{pmatrix} Y_{j1} \\ Y_{j2} \\ Y_{j3} \\ Y_{j4} \\ Y_{j5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_{2,j}^{(1)} \\ \beta_{2,j}^{(2)} \\ \beta_{2,j}^{(3)} \end{pmatrix} + \varepsilon_j, \quad j = 1, 2, 3.$$

Předpokládáme $\text{var}(Y_j) = \Sigma = \sigma^2 I$, $\sigma = 0.001m$.

Hodnoty vektorů Y_1 , Y_2 , Y_3 nasimulujeme pomocí náhodných čísel z normálního rozdělení, např. hodnotu Y_{11} pro $\mu = 105.032$, hodnotu Y_{12} pro $\mu = 2.029$, hodnotu Y_{13} pro $\mu = -0.093$, Y_{14} pro $\mu = 0.242$, Y_{15} pro $\mu = -0.149$ atd., vždy pro $\sigma = 0.001$.

Výsledky simulací

$$Y_1 = (105.031; 2.02933; -0.092810; 0.241155; -0.148574)',$$

$$Y_2 = (105.033; 1.53815; -0.097792; 0.246624; -0.148653)',$$

$$Y_3 = (105.032; 1.52894; -0.092345; 0.242152; -0.148996)'$$

Užitím vzorců (2), (3) vypočteme

$$\hat{\beta}_1 = 105.0320, \quad \text{var}(\hat{\beta}_1) = 0.33333 \cdot 10^{-6},$$

podle vztahů (4), (5)

$$\hat{\beta}_2 = (\hat{\beta}_{2,1}^{(1)}, \hat{\beta}_{2,1}^{(2)}, \hat{\beta}_{2,1}^{(3)}, \hat{\beta}_{2,2}^{(1)}, \hat{\beta}_{2,2}^{(2)}, \hat{\beta}_{2,2}^{(3)}, \hat{\beta}_{2,3}^{(1)}, \hat{\beta}_{2,3}^{(2)}, \hat{\beta}_{2,3}^{(3)})'$$

(107.0613; 106.9686; 107.2098; 106.5701; 106.4723; 106.7189; 106.5609; 106.4683; 106.7102)',

$$\text{var}(\hat{\beta}_2) = \begin{pmatrix} A, & B, & B \\ B, & A, & B \\ B, & B, & A \end{pmatrix},$$

kde

$$A = 10^{-5} \begin{pmatrix} 0.1333 & 0.1333 & 0.1333 \\ 0.1333 & 0.2000 & 0.1667 \\ 0.1333 & 0.1667 & 0.2000 \end{pmatrix}, \quad B = 10^{-5} \begin{pmatrix} 0.0333 & 0.0333 & 0.0333 \\ 0.0333 & 0.0333 & 0.0333 \\ 0.0333 & 0.0333 & 0.0333 \end{pmatrix}.$$

i) Konfidenční intervaly pro jednotlivé parametry

Protože máme parametry v R_1 , konfidenční elipsoidy pro jednotlivé parametry, které byly odvozeny v odstavci 3.a, budou konfidenčními intervaly, např. pro první bod v první epoše měření a pro $\alpha = 0.05$

$$\begin{aligned} E(\beta_{2,1}^{(1)}) &= \{u \in R^1 : (u - \hat{\beta}_{2,1}^{(1)})[\text{var}\hat{\beta}_{2,1}^{(1)}]^{-1}(u - \hat{\beta}_{2,1}^{(1)}) \leq \chi_1^2(0, 1 - \alpha)\} \\ &= \{u \in R^1 : |u - 107.0613| \leq \sqrt{3.8415 \times 0.1333 \times 10^{-5}}\}. \end{aligned}$$

Intervalové odhady všech parametrů uvedeme v následující tabulce

Tabulka 2

$\beta_{2,1}^{(1)}$	$107.0613 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0022629$	$< 107.05904; 107.063562 >$
$\beta_{2,1}^{(2)}$	$106.9686 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0027718$	$< 106.96583; 106.97137 >$
$\beta_{2,1}^{(3)}$	$107.2098 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0027718$	$< 107.20703; 107.21257 >$
$\beta_{2,2}^{(1)}$	$106.5701 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0022629$	$< 106.56784; 106.57236 >$
$\beta_{2,2}^{(2)}$	$106.4723 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0027718$	$< 106.46953; 106.47507 >$
$\beta_{2,2}^{(3)}$	$106.7189 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0027718$	$< 106.71613; 106.72167 >$
$\beta_{2,3}^{(1)}$	$106.5609 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0022629$	$< 106.55864; 106.56316 >$
$\beta_{2,3}^{(2)}$	$106.4683 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0027718$	$< 106.46553; 106.47107 >$
$\beta_{2,3}^{(3)}$	$106.7102 \begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 0.0027718$	$< 106.70743; 106.71297 >$

Je vidět, že všechny nalezené intervalové odhady pokrývají “skutečné” hodnoty parametrů (viz Tabulka 1).

ii) Konfidenční elipsa pro rozdíly výšek 1. a 2. bodu mezi druhou a první epochou

Předpokládáme opět $\widehat{\beta}_2 \sim N(\beta_2, \text{var}(\widehat{\beta}_2))$, označíme-li

$$C = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

platí

$$C\widehat{\beta}_2 = \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,2}^{(1)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)} \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(2)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(2)} \end{pmatrix} \sim N_2 \left[\begin{pmatrix} \beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)} \\ \beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)} \end{pmatrix}, C[\text{var}\widehat{\beta}_2]C' \right].$$

Užitím Pearsonova lematu odvodíme, že konfidenční elipsoid pro rozdíly uvedených souřadnic je tvaru

$$\begin{aligned} & E \begin{pmatrix} \beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)} \\ \beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)} \end{pmatrix} \\ = \{u \in R^2 : & \left[u - \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,2}^{(1)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)} \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(2)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(2)} \end{pmatrix} \right]' (C[\text{var}\widehat{\beta}_2]C')^{-1} \left[u - \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,2}^{(1)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)} \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(2)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(2)} \end{pmatrix} \right] \leq \chi_2^2(0, 1-\alpha)\}. \end{aligned}$$

Po dosazení (pro $\alpha = 0.05$) obdržíme

$$E \begin{pmatrix} \beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)} \\ \beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)} \end{pmatrix} = \{u = (u_1, u_2)' \in R^2 :$$

$$(u_1 + 0.4912; u_2 + 0.4963) \left[10^6 \begin{pmatrix} 1.2500 & -0.7500 \\ -0.7500 & 0.7500 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} u_1 + 0.4912 \\ u_2 + 0.4963 \end{pmatrix} \leq 5.9915\}.$$

Pomocí této elipsy můžeme testovat nulovou hypotézu

$$H_0 : \beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)} = \beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)} \text{ proti alternativě } \beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)} \neq \beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)}.$$

Protože elipsa neobsahuje žádný bod přímky $y = x$, nulovou hypotézu zamítneme.

iii) Konfidenční elipsoid pro rozdíly výšek všech tří pohyblivých bodů mezi druhou a první epochou

Zcela stejným postupem jako v odstavci ii) dostaneme následující konfidenční elipsoid (opět pro $\alpha = 0.05$)

$$E \begin{pmatrix} \beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)} \\ \beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)} \\ \beta_{2,2}^{(3)} - \beta_{2,1}^{(3)} \end{pmatrix} = \{u = (u_1, u_2, u_3)' \in R^3 :$$

$$\begin{pmatrix} u_1 + 0.4912 \\ u_2 + 0.4963 \\ u_3 + 0.4909 \end{pmatrix}' \left[10^6 \begin{pmatrix} 1.5000 & -0.5000 & -0.5000 \\ -0.5000 & 1.0000 & -0.5000 \\ -0.5000 & -0.5000 & 1.0000 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} u_1 + 0.4912 \\ u_2 + 0.4963 \\ u_3 + 0.4909 \end{pmatrix} \leq 7.8147\}.$$

iv) Sdružené konfidenční intervaly

Uveďme pro ilustraci sdružené konfidenční intervaly pro 1. bod ve všech třech epochách. Na základě teorie uvedené v odstavci 4a ($\alpha = 0.05$)

$$E^{(s)}(\beta_{2,1}^{(1)}) = \{u \in R^1 : (u - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)})^2 [\text{var}\widehat{\beta}_{2,1}^{(1)}]^{-1} \leq \chi_3^2(0, 1-\alpha)\}$$

$$= \{u \in R^1 : |u - 107.0613| \leq \sqrt{7.8147 \times 10^{-5} \times 0.1333}\} = \langle 107.05808; 107.06452 \rangle .$$

Obdobně vypočteme

$$E^{(s)}(\beta_{2,2}^{(1)}) = \langle 106.56688; 106.57332 \rangle, \quad E^{(s)}(\beta_{2,3}^{(1)}) = \langle 106.55768; 106.56412 \rangle .$$

Tyto intervaly současně pokrývají parametry $\beta_{2,1}^{(1)}, \beta_{2,2}^{(1)}, \beta_{2,3}^{(1)}$ (výšky 1. bodu ve všech třech epochách měření) se spolehlivostí alespoň 95%.

v) Sdružené konfidenční intervaly pro rozdíly výšek všech tří bodů mezi druhou a první epochou

Uvažujme matici

$$D = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

kteřá z vektoru β_2 vytvoří rozdíly zmíněné v názvu odstavce. Z předpokladu normality užitím Pearsonova lematu odvodíme, že platí rovnost

$$P \left[\begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,2}^{(1)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)} - (\beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)}) \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(2)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(2)} - (\beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)}) \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(3)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(3)} - (\beta_{2,2}^{(3)} - \beta_{2,1}^{(3)}) \end{pmatrix}' [D(\text{var}(\widehat{\beta}_2)D')]^{-1} \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_{2,2}^{(1)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)} - (\beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)}) \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(2)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(2)} - (\beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)}) \\ \widehat{\beta}_{2,2}^{(3)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(3)} - (\beta_{2,2}^{(3)} - \beta_{2,1}^{(3)}) \end{pmatrix} \leq \chi_3^2(0, 1 - \alpha) \right] = 1 - \alpha.$$

Označme

$$A_1 = (1; 0; 0), \quad A_2 = (0; 1; 0), \quad A_3 = (0; 0; 1).$$

Podle zobecněné Scheffého věty

$$P[\forall i = 1, 2, 3 : [\widehat{\beta}_{2,2}^{(i)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(i)} - (\beta_{2,2}^{(i)} - \beta_{2,1}^{(i)})]^2 [A_i D(\text{var}(\widehat{\beta}_2) D' A_i')^{-1}] \leq \chi_3^2(0, 1 - \alpha)] \geq 1 - \alpha.$$

Proto 95%-ní sdružené konfidenční intervaly pro rozdíly výšek všech tří bodů mezi druhou a první epochou jsou následující

$$E^{(s)}(\beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)}) = \{u \in R^1 : |u + 0.4912| \leq \sqrt{7.8147 \times (5.10^5)^{-1}}\} = \langle -0.4951531; -0.4872466 \rangle,$$

$$E^{(s)}(\beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)}) = \{u \in R^1 : |u + 0.4963| \leq \sqrt{7.8147 \times (3.10^5)^{-1}}\} = \langle -0.5014038; -0.4911962 \rangle,$$

$$E^{(s)}(\beta_{2,2}^{(3)} - \beta_{2,1}^{(3)}) = \{u \in R^1 : |u + 0.4909| \leq \sqrt{7.8147 \times (3.10^5)^{-1}}\} = \langle -0.4960038; -0.4857962 \rangle .$$

Poznámka Pro srovnání uvedme “obyčejné” konfidenční intervaly pro uvedené rozdíly.

$$E(\beta_{2,2}^{(1)} - \beta_{2,1}^{(1)}) = \{u \in R^1 : (u - [\widehat{\beta}_{2,2}^{(1)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)}])^2 [\text{var}(\widehat{\beta}_{2,2}^{(1)} - \widehat{\beta}_{2,1}^{(1)})]^{-1} \leq \chi_1^2(0, 1 - \alpha)\} = \{u \in R^1 : |u + 0.4912| \leq \sqrt{3.8415 \times (5.10^5)^{-1}}\} = \langle -0.4939718; -0.4884282 \rangle .$$

Obdobně

$$E(\beta_{2,2}^{(2)} - \beta_{2,1}^{(2)}) = \langle -0.4998784; -0.4927216 \rangle,$$

$$E(\beta_{2,2}^{(3)} - \beta_{2,1}^{(3)}) = \langle -0.4944784; -0.4873216 \rangle.$$

vi) Prahové elipsoidy

Podle *Tvrzení 1* je 95%-ním prahovým elipsoidem pro parametr β_2 množina

$$T_{0.95}(\beta_2) = \{u \in R^9 : (u - \widehat{\beta}_2)'[\widehat{var}\widehat{\beta}_2]^{-1}(u - \widehat{\beta}_2) \leq 24\}.$$

Číslo $\delta_{krit}(0.95) = 24$ jsme určili interpolací ze vztahu

$$P\left[\frac{9+2\delta}{9+\delta}\chi_{\frac{(9+\delta)^2}{9+2\delta}}^2 \geq \chi_9^2(0; 0.95)\right] = 0.95.$$

Podle *Tvrzení 2* jsou množiny

$$T_{0.95}(\beta_{2,j}^{(i)}) = \{u \in R^1 : (u - \beta_{2,j}^{(i),0})^2[\widehat{var}\widehat{\beta}_{2,j}^{(i)}]^{-1} \leq 24\}, \quad i = 1, 2, 3, \quad j = 1, 2, 3,$$

sduženými prahovými elipsoidy pro parametry $\beta_{2,j}^{(i)}$, $i = 1, 2, 3$, $j = 1, 2, 3$.

Jsou-li $\beta_{2,j}^{(i),0}$ projektované hodnoty parametrů $\beta_{2,j}^{(i)}$, (tj. hodnoty zadané projektantem), lze s pravděpodobností větší než 0.95 pomocí experimentu zjistit, zda se skutečné hodnoty těchto parametrů odlišují od projektovaných hodnot o víc než 5.6 mm pro 1. bod a o víc než 6.9 mm pro 2. a 3. bod.

Literatura

- [1] Kubáček, L., Kubáčková, L., Volaufová, J.: *Statistical models with linear structures*. Veda, Publishing house of the Slovak Academy of Sciences, Bratislava, 1995.
- [2] Kubáčková, L.: *Joint confidence and threshold ellipsoids in regression models*. Tatra Mountains Math. Publ. 7 (1996), 157 - 160.
- [3] Kubáček, L., Kubáčková, L.: *Testing Statistical Hypotheses in Deformation Measurement; One Generalization of the Scheffé Theorem*. Acta Univ. Palacki. Olomuc., Mathematica **37** (1998), 81 - 88.
- [4] Kubáček, L., Kubáčková, L.: *Statistika a metrologie*. Univerzita Palackého v Olomouci - vydavatelství, Olomouc, 2000.
- [5] Kunderová, P.: *Linear models with nuisance parameters and deformation measurement*. Acta Univ. Palacki. Olomuc., Mathematica **39** (2000), 95 - 105.

UNIVERZITA PALACKÉHO, PŘF, KMA&AM, TOMKOVA 40, 779 00 OLOMOUČ
E-MAIL: kunderov@matnw.upol.cz

PROCES ODHADOVÁNÍ PARAMETRŮ MODELU

PETR LACHOUT

ABSTRACT. Tento příspěvek souhrn rekapituluje a diskutuje proces odhadovni parametr modelu. Nejdve je vysvleno, co se mysl modelem njak reln situace a co jsou jeho parametry. Pak je zaveden pojem odhadu parametr, lpe eeno, odhad t sti parametr, kter je pro chovn modelu podstatn. Diskutuje se kvalita tchto odhad a jejich optimln volba. Je pipomenuta metoda maximln vrohodnosti a zbyl kapitoly pinej konstrukce odhad zaloen na minimalizaci empirick chyby modelu linearn regrese. V prci je teoreticky diskutovn M-odhad a jsou zmny jeho speciln volby, jako je OLS-odhad a L_1 -odhad. V zvrn kapitole je zmnn LMS-odhad.

Abstract: The paper presents an overview on parameter estimation process. An explanation of the concept of mathematical models and model parameters starts the discussion. After that, the idea of parameter estimation is presented together with a discussion of convenient and optimal properties an estimator should fulfill. Hence, we proceed to constructions of estimators. We present maximal likelihood estimator and estimators based on minimization of empirical errors. The last section considers a linear regression model. M-estimators are treated as a generalization of OLS- and L_1 -estimator. The text finishes with a note on LMS-estimator.

Резюме:Статья подытоживает и дискутирует процесс оценки параметров модели. С начала понятие модели, параметров модели и оценки параметров пояснены. После этого введения дискутирована проблематика выбора оценки имеющей полезные или оптимальные свойства. Другие главы посвящённы возможностям построения оценок. Представлен метод максимальной вероятности и метод минимализации эмпирической ошибки, каторый показан на модели линейной регрессии. Теоретически дискутирована М-оценка и её частные случаи, как ОЛС-оценка и L_1 -оценка. Последняя глава посвящённая ЛМС-оценке.

1. POZOROVÁNÍ, MODEL, ODHAD PARAMETRŮ

Představme si, že studujeme nějaký konkrétní systém, např. pražskou burzu, ekonomiku nějakého průmyslového odvětví, rodinný rozpočet, atd. U tohoto systému jsme schopni opakovaně měřit nějaké veličiny, které jsou tímto procesem ovlivněny, vstupují do něj nebo jsou systémem plně určeny. Na burze sledujeme ceny akcií, objem jejich obchodování atd. V průmyslovém odvětví máme informaci o zásobách výrobních surovin, o kapitálu uloženém v budovách a strojích, o výrobních nákladech, o nákladech na změnu výroby, atd. V rodině známe příjmy jednotlivých členů, jejich stáří, výdaje a celkové úspory. Označme tato opakovaná pozorování X_1, X_2, \dots, X_n a množinu, kde se nacházejí všechny možné hodnoty měření, označme \mathbb{X} . Aby bylo možno studovat stochastické chování, musí být množina \mathbb{X} opatřena σ -algebrou, označme ji \mathcal{A} . Poznamenejme zde, že na základě samotných pozorování nedokážeme určit nebo popsat chování pozorovaného systému. Tento problém je principiální, zjednodušeně řečeno „nemáme se oč opřít“.

1991 *Mathematics Subject Classification.* 62F10, 62J99.

Key words and phrases. Odhady, regrese.

Vzniklo za podpory grantu MSM 113200008

Na pomoc musí přijít znalost mechaniky sledované situace, zkušenost a také intuice. Na jejich základě navrhne matematický model sledovaného systému, který teoreticky vysvětluje vznik a vnitřní strukturu pozorování X_1, X_2, \dots, X_n , to znamená, že známe rozdělení $\mathcal{L}(X_1, X_2, \dots, X_n) = \mu_n(\cdot; \theta_o)$. Tento model obsahuje neznámý parametr θ_o , o kterém máme apriorní informaci $\theta_o \in \Theta$. Prostor parametrů Θ musí být také opatřen σ -algebrou, budeme ji označovat \mathcal{Q} . Takovým parametrem mohou být technické koeficienty, koeficienty ve vztazích mezi proměnnými, rozptyly náhodných chyb obsažených v modelu. Mohou to však také být polynomy do řádu 5, spliny 3 stupně, nebo i funkce mající 3. derivaci nebo nějakou jinou předepsanou vlastnost, např. v modelu obecné regrese, při odhadu hustoty. Parametrem však může být i celé rozdělení náhodných vlivů. Pokud je dimenze Θ konečná, pak se často mluví o parametrickém modelu. V opačném případě se mluví o modelu semiparametrickém.

Model sice závisí na parametru $\theta_o \in \Theta$, ale z praktického hlediska nebo ze zadání úlohy nás nemusí nezajímat přímo parametr θ_o . Často je důležitá pouze jeho „část“ nebo, lépe řečeno, nějaká jeho transformace. Dobře je toto členění vidět na modelu lineární regrese $Y_i = X_i \beta_o + e_i$, kde (X_i, e_i) jsou i.i.d., X_i je nezávislé s e_i a chyby e_i mají nulovou střední hodnotu a konečný nenulový rozptyl. Zde jsou parametrem regresní koeficienty $\beta_o \in \mathbb{R}^k$, rozdělení regresorů $G_o \in \mathcal{G}$ a rozdělení chyb $F_o \in \mathcal{F}$. Pro praktické účely nás však zajímá pouze odhad regresních koeficientů a pro odhad kvality jejich odhadu ještě potřebujeme odhadnout rozptyl chyby. Místo parametru $\theta_o = (\beta_o, G_o, F_o) \in \mathbb{R}^k \times \mathcal{G} \times \mathcal{F}$ nás proto zajímá pouze jeho transformace $\iota(\theta_o) = (\beta_o, \int_{\mathbb{R}} e^2 dF_o(e)) \in \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}_+$.

Uvažujme tedy dále, že je dána funkce $\iota : \Theta \rightarrow \Psi$ a pro každé $n \in \mathbb{N}$ hledáme měřitelné zobrazení $\tau_n : \mathbb{X}^n \rightarrow \Psi$, které budeme nazývat odhad parametru $\iota(\theta)$. Naším cílem je nalézt odhad tak, aby byl „rozumný“ a případně i v nějakém smyslu „optimální“. Základním požadavkem je, aby odhad v limitě konvergoval ke správné hodnotě parametru modelu, t.j. buď

$$\text{slabá konzistence} \sim \forall \theta \in \Theta : \tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{P_\theta} \iota(\theta),$$

nebo

$$\text{(silná) konzistence} \sim \forall \theta \in \Theta : \tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{P_\theta - s.j.} \iota(\theta).$$

Pokud chceme testovat nějaké vlastnosti parametru θ_o , například nulovost některých složek, pak musíme ještě pro každé $\theta \in \Theta$ znát (alespoň vhodný odhad) rozdělení $\mathcal{L}_\theta(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) - \iota(\theta))$. Pokud toto neumíme nebo je to nevyčíslitelné, využíváme k testování asymptotické rozdělení tohoto rozdílu, t.j.

$$\text{existují } 0 < \eta_n \nearrow +\infty \text{ tak, že } \forall \theta \in \Theta : \eta_n (\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) - \iota(\theta)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{d} \xi(\theta),$$

kde rozdělení $\mathcal{L}_\theta(\xi(\theta))$ je známo a závisí pouze na parametru modelu. Často se jedná o regulární normální rozdělení. Normalizační konstanty η_n se nazývají řád konzistence odhadu a je známo, že závisí na mohutnosti množiny Ψ . Přesný vztah i teorie kolem něho nejsou jednoduché; viz ??? , ??? .

Odhady často hledáme pouze mezi funkcemi splňujícími nějakou speciální vlastnost. Budeme tedy uvažovat pouze odhady $\tau_n \in \Gamma_n$, kde $\Gamma_n \subset \{T : \mathbb{X}^n \rightarrow \Psi\}$, například uvažujeme pouze lineární kombinace pozorování, nebo pouze nestranné odhady, t.j.

$$\text{nestrannost} \sim \forall \theta \in \Theta : \mathbf{E}_\theta[T(X_1, X_2, \dots, X_n)] = \iota(\theta).$$

2. ODHAD MINIMALIZUJÍCÍ RIZIKO

Naší snahou je nalézt odhad tak, aby byl v nějakém smyslu optimální. V této kapitole vyložíme teorii odhadů minimalizujících riziko. Budeme při tom vycházet ze skript ???, kde je potřebná teorie pěkně a přehledně vysvětlena. Tuto teorii však aplikujeme na odhad transformovaného parametru.

Kvalitu odhadu měříme ztrátovou funkcí $L : \Psi \times \Psi \rightarrow \mathbb{R}_+$, což je vlastně zadaná „vzdálenost“ na Ψ . Od ztrátové funkce kromě nezápornosti ještě vyžadujeme, aby rozlišovala body z Ψ , t.j.

$$\forall \psi, \varphi \in \Psi : L(\psi, \varphi) = 0 \iff \psi = \varphi.$$

Naším úkolem je v nějakém smyslu minimalizovat ztrátu $L(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n), \iota(\theta))$. Po odstranění vlivu náhody tedy minimalizujeme rizikovou funkci

$$R(\tau_n, \theta) = \mathbb{E}_\theta[L(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n), \iota(\theta))] = \int_{\mathbb{X}^n} L(\tau_n(x_1, x_2, \dots, x_n), \iota(\theta)) \, d\mu_n(x_1, x_2, \dots, x_n; \theta).$$

V případě i.i.d. pozorování bude riziková funkce mít tvar

$$R(\tau_n, \theta) = \int_{\mathbb{X}^n} L(\tau_n(x_1, x_2, \dots, x_n), \iota(\theta)) \, d\mu_1(x_1; \theta) \cdot d\mu_1(x_2; \theta) \cdot \dots \cdot d\mu_1(x_n; \theta).$$

Chtěli bychom nalézt odhad $\tau_n \in \Gamma_n$ tak, aby pro každé $\theta \in \Theta$ minimalizoval riziko $R(T, \theta)$ přes všechny $T \in \Gamma_n$. Takovému odhadu říkáme stejněměrně eficientní odhad v třídě odhadů Γ_n . Takový odhad však obecně nemusí existovat. Je tomu tak například, když Γ_n obsahuje supereficientní odhady, t.j. odhady, které mají pro nějakou hodnotu parametru nulové riziko. Nejjednodušším příkladem supereficientních odhadů jsou konstantní odhady $T_\psi \equiv \psi$ pro $\psi \in \Psi$. Následující tvrzení ukazuje, že stačí, aby Γ_n obsahovala dva konstantní odhady, a již se můžeme s existencí stejněměrně eficientního odhadu rozloučit.

Tvrzení 1: *Nechť $\mathbb{X} = \mathbb{R}^q$ a $\xi, \eta \in \Theta$ jsou takové, že $\iota(\xi) \neq \iota(\eta)$ a $T_{\iota(\xi)}, T_{\iota(\eta)} \in \Gamma_n$. Když pro každé $A \in \mathcal{X}^n$, $\mathbb{P}_\xi((X_1, X_2, \dots, X_n) \in A) = 1$ je $\mathbb{P}_\eta((X_1, X_2, \dots, X_n) \in A) > 0$, pak stejněměrně eficientní odhad v třídě odhadů Γ_n neexistuje.*

Důkaz: Předpokládejme, že odhad $\tau_n \in \Gamma_n$ je stejněměrně eficientní v třídě odhadů Γ_n . Pak ovšem musí platit $R(\tau_n, \xi) \leq R(T_{\iota(\xi)}, \xi) = 0$ a $R(\tau_n, \eta) \leq R(T_{\iota(\eta)}, \eta) = 0$.

Odtud $\mathbb{P}_\xi(L(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n), \iota(\xi)) = 0) = 1$ a

$\mathbb{P}_\eta(L(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n), \iota(\eta)) = 0) = 1$.

Ztrátová funkce rozlišuje body z Ψ a tak $\mathbb{P}_\xi(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) = \iota(\xi)) = 1$ a zároveň také

$\mathbb{P}_\eta(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) = \iota(\eta)) = 1$.

To však ale není možné neboť $\iota(\xi) \neq \iota(\eta)$ a $\tau_n : \mathbb{X}^n \rightarrow \Psi$ je měřitelné zobrazení.

Předpokládaná vlastnost pak totiž implikuje, že

$$\mathbb{P}_\eta(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) \neq \iota(\eta)) \geq \mathbb{P}_\eta(\tau_n(X_1, X_2, \dots, X_n) = \iota(\xi)) > 0.$$

Stejněměrně eficientní odhad tedy nemůže v této třídě existovat.

Q.E.D.

Tento problém se odráží i v lidové slovesnosti:

Otázka: Které hodiny jdou nejpřesněji?

Odpověď: Ty které stojí.

Zdůvodnění: Takové hodiny ukazují dvakrát denně přesný čas!

Máme v podstatě dvě možnosti jak tento nedostatek odstranit. První možností je uvažovat jen takové třídy odhadů, pro které stejnoměrně eficientní odhad existuje. Například třídu lineárních nestranných odhadů při odhadování střední hodnoty i.i.d. posloupnosti, viz ??? .

Druhou možností je zjistit, nebo přibližně odhadnout, frekvenci výskytu parametrů v praxi. To znamená mít k dispozici míru Q na (Θ, \mathcal{Q}) a minimalizovat průměrné riziko $\int_{\Theta} R(T, \theta) dQ(\theta)$.

3. EXTRAKCE INFORMACE UKRYTÉ V POZOROVÁNÍCH

V pozorováních X_1, X_2, \dots, X_n je skryta „informace“ o skutečné hodnotě parametru. Otázkou je, jak tuto „informaci“ z výběru extrahovat a jak ji využít pro odhadování.

Cílem je vlastně zredukovat rozměrnost pozorování a místo nich používat pouze nějakou statistiku $T_n : \mathbb{X}^n \rightarrow \mathbb{Y}_n$, která by obsahovala stejnou informaci o parametru jako vlastní pozorování a byla, co „nejmenší“. Matematicky je tento požadavek vyjádřen pojmy postačující statistika a úplná statistika.

Statistiku $T_n : \mathbb{X}^n \rightarrow \mathbb{Y}_n$ nazveme postačující, jestliže pro každou dvojici parametrů $\theta, \eta \in \Theta$ platí

$$\mathcal{L}_{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n | T_n(X_1, X_2, \dots, X_n)) = \mathcal{L}_{\eta}(X_1, X_2, \dots, X_n | T_n(X_1, \dots, X_n))$$

Statistiku $T_n : \mathbb{X}^n \rightarrow \mathbb{Y}_n$ nazveme úplnou, jestliže pro každou měřitelnou funkci $h : \mathbb{Y}_n \rightarrow \mathbb{R}$ vlastnost $\forall \theta \in \Theta$ je $E_{\theta}[h(T_n(X_1, X_2, \dots, X_n))] = 0$ implikuje $\forall \theta \in \Theta$ je $P_{\theta}(h(T_n(X_1, X_2, \dots, X_n)) = 0) = 1$.

Pro každý problém existuje postačující statistika, např. $T_n(X_1, X_2, \dots, X_n) = (X_1, X_2, \dots, X_n)$, a také vždy existuje úplná statistika, např. $T_n(X_1, X_2, \dots, X_n) \equiv \psi$ pro nějaké $\psi \in \Psi$. Pro odhadování je však důležité nalézt statistiku, která má obě tyto vlastnosti. Její důležitost ukazuje následující věta.

Věta 2: *Když $\Psi \subset \mathbb{R}^k$ a pro studovaný problém existuje postačující úplná statistika T_n a nestranný odhad η_n pro $\iota(\theta)$, pak podmíněná střední hodnota*

$$\tau_n(X_1, \dots, X_n) = E_{\theta}[\eta_n(X_1, \dots, X_n) | T_n(X_1, \dots, X_n)]$$

nezávisí na parametru $\theta \in \Theta$ a je stejnoměrně eficientním odhadem pro $\iota(\theta)$ ve třídě všech nestranných odhadů při ztrátové funkci $L(\theta, \rho) = \|\theta - \rho\|^2$.

Důkaz: Obecně je podmíněná střední hodnota funkcí podmínky a tak

$$\tau_n(X_1, \dots, X_n; \theta) = E_{\theta}[\eta_n(X_1, \dots, X_n) | T_n(X_1, \dots, X_n)].$$

Statistika T_n je postačující a proto $\tau_n(X_1, \dots, X_n; \theta)$ nezávisí na parametru $\theta \in \Theta$ a můžeme psát pouze $\tau_n(X_1, \dots, X_n)$. Tudíž τ_n je odhad pro $\iota(\theta)$ a je nestranným odhadem neboť je podmíněnou střední hodnotou nestranného odhadu.

Uvažujme t_n nějaký jiný nestranný odhad pro $\iota(\theta)$. Při kvadratické ztrátové funkci pro něj dostáváme rizikovou funkci

$$R(t_n, \theta) = E_{\theta}[\|t_n(X_1, \dots, X_n) - \iota(\theta)\|^2].$$

Z Jensenovy nerovnosti pro podmíněnou střední hodnotu dostáváme

$$\begin{aligned} R(t_n, \theta) &= \mathbb{E}_\theta \left[\mathbb{E}_\theta \left[\|t_n(X_1, \dots, X_n) - \iota(\theta)\|^2 \mid T_n \right] \right] \geq \\ &\geq \mathbb{E}_\theta \left[\|\mathbb{E}_\theta [t_n(X_1, \dots, X_n) \mid T_n] - \iota(\theta)\|^2 \right] = R(\mathbb{E}_\theta [t_n \mid T_n], \theta). \end{aligned}$$

Postačitelost statistiky T_n říká, že existuje funkce

$$h(T_n(X_1, \dots, X_n)) = \tau_n(X_1, \dots, X_n) - \mathbb{E}_\theta [t_n(X_1, \dots, X_n) \mid T_n(X_1, \dots, X_n)].$$

Z nestrannosti odhadů η_n, t_n plyne

$$\mathbb{E}_\theta [h(T_n(X_1, \dots, X_n))] = 0 \quad \forall \theta \in \Theta.$$

Úplnost statistiky T_n proto dává

$$\tau_n(X_1, \dots, X_n) = \mathbb{E}_\theta [t_n(X_1, \dots, X_n) \mid T_n(X_1, \dots, X_n)] \quad \text{s.j.} \quad \forall \theta \in \Theta.$$

Tudíž zjišťujeme, že $\forall \theta \in \Theta \quad R(t_n, \theta) \geq R(\tau_n, \theta)$.

Jinými slovy, odhad τ_n je stejnoměrně eficientní v třídě všech nestranných odhadů.
Q.E.D.

Pokud existuje dominující σ -konečná míra pro sledovanou úlohu, pak lze z tvaru hustoty vyčíst některé postačující statistiky.

Tvrzení 3: *Nechť μ_n je σ -konečná míra na \mathcal{X}^n a (X_1, \dots, X_n) má hustotu $f_n(x_1, \dots, x_n; \theta)$ vzhledem k μ_n . Když $f_n(x_1, \dots, x_n; \theta) = g_n(T_n(x_1, \dots, x_n); \theta)h_n(x_1, \dots, x_n)$, kde $g_n(\cdot; \theta) : \mathbb{Y}_n \rightarrow \mathbb{R}_+$, $T_n : \mathbb{X}^n \rightarrow \mathbb{Y}_n$ a $h_n : \mathbb{X}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$ jsou měřitelné funkce, a $\int_{\mathbb{X}} h_n(x) d\mu_n(x) < +\infty$, potom T_n je postačující statistika.*

Důkaz: Pro každé $A \in \mathcal{X}^n$, $B \in \mathcal{Y}_n$ definujeme

$$\rho(B, A) = \int_{[T_n(x) \in B, x \in A]} h_n(x) d\mu_n(x).$$

Díky předpokladu $\int_{\mathbb{X}} h_n(x) d\mu_n(x) < +\infty$ jsou $\rho(\cdot, A)$ konečné míry.

Evidentně pro každé $A \in \mathcal{X}^n$ je míra $\rho(\cdot, A)$ absolutně spojitá vzhledem k míře $\rho(\cdot, \mathbb{X})$.

Tudíž podle Radon-Nikodýmovi věty existuje $s : \mathbb{Y}_n \times \mathcal{X}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$ tak, že pro každé $A \in \mathcal{X}^n$, $B \in \mathcal{Y}_n$ platí $\rho(B, A) = \int_B s(y, A) \rho(dy, \mathbb{X})$.

Pro $A \in \mathcal{X}^n$, $B \in \mathcal{Y}_n$ platí

$$\begin{aligned} \int_{[T_n(X) \in B]} s(T_n(X), A) d\mathbb{P}_\theta &= \int_{[T_n(x) \in B]} s(T_n(x), A) g_n(T_n(x); \theta) h_n(x) d\mu_n(x) = \\ &= \int_{[y \in B]} s(y, A) g_n(y; \theta) \rho(dy, \mathbb{X}) = \int_{[y \in B]} g_n(y; \theta) \rho(dy, A) = \int_{[T_n(X) \in B]} \mathbb{I}_{[X \in A]} d\mathbb{P}_\theta. \end{aligned}$$

Ověřili jsme, že $\mathbb{P}_\theta(X \in A \mid T_n(X)) = s(T_n(X), A)$.

Tudíž rozdělení vektoru pozorování podmíněné statistikou T_n nezávisí na parametru $\theta \in \Theta$ a T_n je postačující statistikou.

Q.E.D.

Ještě si uveďme příklad.

Příklad 1: Necht X_i , $i = 1, 2, \dots, n$ jsou i.i.d. n.v. s normálním rozdělením $\Phi(\cdot; \mu, \sigma^2)$, $\mu \in \mathbb{R}$, $\sigma^2 > 0$.

Pak vektor (X_1, \dots, X_n) má sdruženou hustotu

$$\begin{aligned} f_n(x; \mu, \sigma^2) &= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right\} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 - 2\mu \sum_{i=1}^n x_i + n\mu^2\right)\right\}. \end{aligned}$$

Podle předchozího tvrzení je statistika $(\sum_{i=1}^n x_i, \sum_{i=1}^n x_i^2)$ postačující. Zároveň lze také dokázat, že je tato statistika úplná.

Snadno se přesvědčíme, že $(X_1, \frac{(X_1 - X_2)^2}{4})$ je nestranný odhad parametru (μ, σ^2) .

Tudíž

$$\begin{aligned} E_{\mu, \sigma^2} \left[\left(X_1, \frac{(X_1 - X_2)^2}{4} \right) \middle| \sum_{i=1}^n X_i, \sum_{i=1}^n X_i^2 \right] &= \\ = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i, \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(X_i - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_j \right)^2 \right) & \text{ s.j.} \end{aligned}$$

je stejnoměrně eficientní odhad parametru (μ, σ^2) ve třídě nestranných odhadů a při ztrátové funkci $L((\mu_1, \sigma_1^2), (\mu_2, \sigma_2^2)) = (\mu_1 - \mu_2)^2 + (\sigma_1^2 - \sigma_2^2)^2$.

△

Teorie postačujících a úplných statistik je vyložena také v kapitole XV.5, ??? .

4. MAXIMÁLNĚ VĚROHODNÉ ODHADY

Nyní již přistupujeme k obecným návodům pro hledání odhadů. Zde již není obecné kritérium, které chceme minimalizovat. Zde přistupujeme rovnou k datům a naším cílem je minimalizovat nějakou ztrátu rovnou pro ně.

Metoda maximální věrohodnosti je založena na rozdělení pozorovaných veličin na část s rozdělením spojitým vzhledem k Lebesguevě míře a na zbytek nabývající pouze spočetně hodnot. V jiných případech tuto ideu nelze aplikovat.

Předpokládejme, že pozorování lze zapsat ve tvaru $X_i = (Z_i, D_i)$, $i \in \{1, \dots, n\}$, kde $Z_i \in \mathbb{R}^k$ a $D_i \in \mathcal{D}$ pro nějakou nejvýše spočetně množinu \mathcal{D} . Dále pro každý parametr $\theta \in \Theta$ předpokládáme existenci hustoty $f_n(z_1, d_1; z_2, d_2; \dots; z_n, d_n; \theta)$ vzhledem k součinové míře $(\lambda_k \otimes \check{c}_{\mathcal{D}})^{\otimes n}$. Poznamenejme, že čítací míra \check{c}_A je definována pro každou množinu $B \subset A$, jako počet bodů obsažených v množině B , t.j. $\check{c}_A(B) = \text{card}(B)$.

Principem ML-odhadu (Maximal Likelihood) je „maximalizace“ věrohodnosti $f_n(X_1, X_2, \dots, X_n; \theta)$. Odhad konstruujeme následovně.

Odhadneme původní parametr

$$\hat{\theta}_n \in \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} f_n(X_1, X_2, \dots, X_n; \theta) = \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} f_n(Z_1, D_1; Z_2, D_2; \dots; Z_n, D_n; \theta)$$

a položíme $\tau_n = \iota(\hat{\theta}_n)$.

Tento postup však není vždy výpočetně realizovatelný. Často se proto volí modifikace tohoto postupu využívající odhadu části parametrů, t.j. máme k dispozici informaci (odhad), že hledaný parametr leží v množině $\widehat{\Theta}_n \subset \Theta$. V tomto případě odhadneme původní parametr

$$\widehat{\theta}_n \in \operatorname{argmax}_{\theta \in \widehat{\Theta}_n} f_n(X_1, X_2, \dots, X_n; \theta) = \operatorname{argmax}_{\theta \in \widehat{\Theta}_n} f_n(Z_1, D_1; Z_2, D_2; \dots; Z_n, D_n; \theta)$$

a položíme $\tau_n = \iota(\widehat{\theta}_n)$.

Na závěr kapitoly uvedme ještě příklady.

Příklad 2: Nechť X_i , $i = 1, 2, \dots, n$ jsou i.i.d. n.v. s normálním rozdělením $\Phi(\cdot; \mu, \sigma^2)$, $\mu \in \mathbb{R}$, $\sigma^2 > 0$.

Pak vektor (X_1, \dots, X_n) má sdruženou hustotu

$$\begin{aligned} f_n(x_1, x_2, \dots, x_n; \mu, \sigma^2) &= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right\} = \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left(\sum_{i=1}^n \left(x_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i\right)^2 + n \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \mu\right)^2\right)\right\}. \end{aligned}$$

Při hledání ML-odhadu budeme maximalizovat věrohodnostní funkci

$$\begin{aligned} f_n(X_1, X_2, \dots, X_n; \mu, \sigma^2) &= \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left(\sum_{i=1}^n \left(X_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i\right)^2 + n \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i - \mu\right)^2\right)\right\}. \end{aligned}$$

Nejprve budeme odhadovat oba parametry naráz. To znamená $\Theta = \Psi = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$, $\iota(\mu, \sigma^2) = (\mu, \sigma^2)$. Minimalizací věrohodnostní funkce získáme ML-odhad

$$\widehat{\mu}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i, \quad \widehat{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(X_i - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_j\right)^2.$$

Povšimněme si, že $\widehat{\mu}_n$ je stejnoměrně eficientní odhad parametru μ ve třídě nestranných odhadů při L_2 -kritériu, jak je ukázáno v předchozí kapitole. Ale $\widehat{\sigma}_n^2$ není nestranným odhadem pro parametr σ^2 . Víme, že $\frac{n}{n-1} \widehat{\sigma}_n^2$ je stejnoměrně eficientní odhad parametru σ^2 ve třídě nestranných odhadů při L_2 -kritériu, jak je ukázáno v předchozí kapitole.

Odhadujme nyní pouze střední hodnotu μ .

- Když je rozptyl σ^2 známý, pak $\Theta = \Psi = \mathbb{R}$, $\iota(\mu) = \mu$ a ML-odhad vyjde $\widehat{\mu}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$.
- Když je rozptyl σ^2 neznámý, pak $\Theta = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$, $\Psi = \mathbb{R}$, $\iota(\mu, \sigma^2) = \mu$ a ML-odhad opět vyjde $\widehat{\mu}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$.
- Když je rozptyl σ^2 neznámý, ale máme jeho odhad s_n^2 , pak $\Theta = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$, $\Psi = \mathbb{R}$ a $\iota(\mu, \sigma^2) = \mu$. Použijeme modifikovaný postup s $\widehat{\Theta}_n = \mathbb{R} \times \{s_n^2\}$ a ML-odhad vyjde opět $\widehat{\mu}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$.

Odhadujeme pouze rozptyl σ^2 .

- Když je střední hodnota μ známá, pak $\Theta = \Psi = \mathbb{R}_+$, $\iota(\sigma^2) = \sigma^2$ a ML-odhad vyjde

$$\widehat{\sigma^2}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2.$$

- Když je střední hodnota μ neznámá, pak $\Theta = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$, $\Psi = \mathbb{R}_+$, $\iota(\mu, \sigma^2) = \sigma^2$ a ML-odhad vyjde

$$\widehat{\sigma^2}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(X_i - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_j \right)^2.$$

- Když je střední hodnota μ neznámá, ale máme k dispozici její odhad m_n , pak $\Theta = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$, $\Psi = \mathbb{R}_+$ a $\iota(\mu, \sigma^2) = \sigma^2$. Použijeme modifikovaný postup s $\widehat{\Theta}_n = \{m_n\} \times \mathbb{R}_+$ a ML-odhad vyjde

$$\widehat{\sigma^2}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - m_n)^2.$$

△

Příklad 3: Regrese 0-1 náhodných veličin

Pozorujeme dvojice (Y_i, x_i) , $i \in \mathbb{N}$ svázané 0-1 regresí

$$Y_i = F(x_i^T \beta) + e_i, \quad i \in \mathbb{N},$$

kde $Y_i \in \{0, 1\}$, $i \in \mathbb{N}$ jsou náhodné veličiny, $x_i \in \mathbb{R}^k$, $i \in \mathbb{N}$ jsou nenáhodné vektory, $e_i \in \mathbb{R}^k$, $i \in \mathbb{N}$ jsou náhodné chyby, které jsou nezávislé a mají nulovou střední hodnotu, $\beta \in \mathbb{R}^k$ neznámé parametry a F je známá d.f. Pokud $F = \Phi$, pak mluvíme o probit modelu. Pokud F je d.f. logistického rozdělení, t.j. $F(t) = \frac{1}{1+e^{-t}} \forall t \in \mathbb{R}$, pak mluvíme o logit modelu.

Tento model má jediný parametr a to $\beta \in \mathbb{R}^k$. Na základě n pozorování sestavíme věrohodnostní funkci

$$L(\beta) = \prod_{i=1}^n (1 - F(x_i^T \beta))^{(1-Y_i)} F(x_i^T \beta)^{Y_i}.$$

Maximalizací věrohodnostní funkce L získáme ML-odhad pro parametr β . Diskusi o jeho výpočtu a vlastnostech můžeme nalézt v kapitole 16.4 v ???

△

Příklad 4: Tobit model

Povšimněme si nyní modelu z článku ??? a navrženého odhadu z článků ???, ??? . Pozorujeme trojice (Y_i, x_i, δ_i) svázané modelem cenzorované regrese:

$$Y_i = x_i^T \beta + e_i \text{ když } x_i^T \beta + e_i \geq 0, \quad \delta_i = \mathbb{I}_{[x_i^T \beta + e_i \geq 0]}, \quad i \in \mathbb{N}, \\ = 0 \quad \text{jinak,}$$

kde $x_i \in \mathbb{R}^k$, $i \in \mathbb{N}$ jsou nenáhodná a e_i , $i \in \mathbb{N}$ jsou i.i.d. s rozdělením $F(\cdot; \theta)$, $\theta \in \Theta$, $E[e_i] = 0$.

Tento model má parametr $(\beta, \theta) \in \mathbb{R}^k \times \Theta$. Máme-li k dispozici n pozorování, můžeme se pokusit odhadnout parametr β pouze na základě těch pozorování, u nichž víme, že jsme regresi skutečně pozorovali. Máme tedy náhodnou množinu indexů $N^* = \{i \in \{1, 2, \dots, n\} : \delta_i = 1\}$ a regresi

$$Y_i = x_i' \beta + e_i \text{ pro } i \in N^*.$$

Když pro odhad parametru β použijeme nějaký odhad, který je nestranný (případně asymptoticky nestranný) v běžném modelu regrese, získáme vychýlený odhad. Je to proto, že střední hodnota Y_i za podmínky, že pozorujeme regresi, není regresní přímka $x_i^T \beta$. Spočtěme si tuto podmíněnou střední hodnotu při pevném $\theta \in \Theta$ přesně:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[Y_i | \delta_i = 1] &= \mathbb{E}[(x_i' \beta + e_i) \mathbb{I}_{[x_i' \beta + e_i \geq 0]} | x_i' \beta + e_i \geq 0] = \\ &= \mathbb{E}[(x_i' \beta + e_i) | x_i' \beta + e_i \geq 0] \mathbb{I}_{[x_i' \beta + e_i \geq 0]} = \\ &= \left(x_i' \beta + \frac{1}{\mathbb{P}(x_i' \beta + e_i \geq 0)} \int_{-x_i \beta}^{+\infty} e \, dF(e; \theta) \right) \mathbb{I}_{[x_i' \beta + e_i \geq 0]} = \\ &= \left(x_i' \beta + \frac{1}{1 - F(-x_i' \beta; \theta)} \int_{-x_i \beta}^{+\infty} e \, dF(e; \theta) \right) \mathbb{I}_{[x_i' \beta + e_i \geq 0]}. \end{aligned}$$

Pokud by pro každé $i \in \mathbb{N}$ bylo $\int_{-x_i \beta}^{+\infty} e \, dF(e; \theta) = 0$, pak by odhad založený pouze na očištěném výběru byl konzistentní. To však je možné pouze v případě $F(-x_i' \beta; \theta) = \mathbb{P}(x_i' \beta + e_i < 0) = 0$ pro všechna $i \in \mathbb{N}$. To znamená, k cenzorování s.j. nedojde a my stále pozorujeme regresi.

Pro odhad regrese založeného na očištěném souboru musíme mít k dispozici odhad druhého členu v podmíněné střední hodnotě. Pro normální rozdělení s neznámým rozptylem je situace jednodušší, ale hlavně názornější.

Uvažujme tedy $\Theta = \mathbb{R}_+$ a $F(e; \sigma) = \Phi\left(\frac{e}{\sigma}\right)$, kde Φ označuje d.f. standardního normálního rozdělení a φ je jeho hustota. V tomto případě dostáváme

$$\begin{aligned} \int_{-x_i \beta}^{+\infty} e \, dF(e; \sigma) &= \sigma \int_{\frac{-x_i \beta}{\sigma}}^{+\infty} e \, d\Phi(e) = \sigma \int_{\frac{-x_i \beta}{\sigma}}^{+\infty} e \varphi(e) \, de = \sigma \varphi\left(\frac{-x_i \beta}{\sigma}\right) = \sigma \varphi\left(\frac{x_i \beta}{\sigma}\right) \\ 1 - F(-x_i' \beta; \theta) &= 1 - \Phi\left(\frac{-x_i' \beta}{\sigma}\right) = \Phi\left(\frac{x_i' \beta}{\sigma}\right). \end{aligned}$$

Tudíž

$$\mathbb{E}[Y_i | x_i' \beta + e_i \geq 0] = \left(x_i' \beta + \sigma \frac{\varphi\left(\frac{x_i' \beta}{\sigma}\right)}{\Phi\left(\frac{x_i' \beta}{\sigma}\right)} \mathbb{I}_{[x_i' \beta + e_i \geq 0]} \right).$$

Pokud by jsme znali podíly $\frac{\varphi\left(\frac{x_i' \beta}{\sigma}\right)}{\Phi\left(\frac{x_i' \beta}{\sigma}\right)}$, nebo měli alespoň konzistentní odhady, pak by jsme dokázali konzistentně odhadnout oba parametry modelu, t.j. β , $\sigma > 0$, třeba pomocí OLS-odhadu.

Pozorování δ_i , $i = 1, 2, \dots, n$ nabývají pouze hodnot 0 nebo 1 a splňují

$$\mathbb{E}[\delta_i] = \mathbb{P}(x_i' \beta + e_i \geq 0) = 1 - \Phi\left(\frac{-x_i' \beta}{\sigma}\right) = \Phi\left(\frac{x_i' \beta}{\sigma}\right).$$

Jsou tedy řízeny probit modelem. Na základě teorie probit modelu získáme konzistentní odhad $\hat{\lambda}_n$ pro podíl $\frac{\beta}{\sigma}$; třeba ML-odhadem viz předchozí příklad, jiné možnosti jsou uvedeny v kapitole 16 v ??? .

Dosazením do předchozího získáme

$$E[Y_i | x_i' \beta + e_i \geq 0] = \left(x_i' \beta + \sigma \frac{\varphi(x_i' \hat{\lambda}_n)}{\Phi(x_i' \hat{\lambda}_n)} \right) \mathbb{I}_{[x_i' \beta + e_i \geq 0]}.$$

Nyní z očištěného výběru spočteme odhad (třeba OLS-odhad) pro parametry regrese

$$Y_i = x_i' \beta + \sigma \frac{\varphi(x_i' \hat{\lambda}_n)}{\Phi(x_i' \hat{\lambda}_n)} + e_i, \quad i \in N^*.$$

Konzistence a asymptotická normalita je ukázána v článcích ??? , ??? .

Druhou možností je sestavit věrohodnostní funkci

$$L(\beta, \sigma) = \prod_{i=1}^n \left(1 - \Phi\left(\frac{x_i' \beta}{\sigma}\right) \right)^{1-\delta_i} \varphi\left(Y_i - \frac{x_i' \beta}{\sigma}\right)^{\delta_i}.$$

Odhad parametrů pak získáme metodou maximální věrohodnosti, t.j. maximalizací věrohodnostní funkce L . Konzistence a asymptotická normalita tohoto odhadu je ukázána v článku ??? .

Tento postup je tedy teoreticky dobře zdůvodněn. Potíže jsou však s nalezením maxima věrohodnostní funkce. Funkce je velmi nelineární a dělá problémy při numerickém řešení. V článku ??? je proto navržen jiný odhad a je zde také ukázána jeho konzistence a asymptotická linearita. Tento odhad se dá zlepšit jedním, případně více, kroky Newtonovy metody. Konstrukce tohoto odhadu je také uvedena v kapitole 16.6.2 v ??? .

△

5. ODHADY V MODELU LINEÁRNÍ REGRESE

Věnujme se nyní odhadování parametrů v modelu lineární regrese. Zde pozorujeme dvojice

$$(Y_1, X_1), (Y_2, X_2), \dots, (Y_n, X_n), \quad Y_i \in \mathbb{R}, X_i \in \mathbb{R}^k,$$

které jsou svázány předpisem

$$Y_i = X_i \beta_o + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \in \mathbb{R}, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n.$$

Parametry modelu jsou $\beta_o \in \mathbb{R}^k$ a sdružené rozdělení $\mathcal{L}((X_1, \varepsilon_1), \dots, (X_n, \varepsilon_n))$.

Označíme-li $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)'$, $X = (X_1', X_2', \dots, X_n')'$ a $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)'$, pak lze model zkráceně zapsat

$$Y = X \beta_o + \varepsilon.$$

Aby byl model dobře určen musíme učinit některé předpoklady.

Předpoklad: Matice X má plnou sloupcovou hodnost.

Jinak by existovalo $\delta \in \mathbb{R}^k$ tak, že $X\delta = 0$. Pak ovšem regresní koeficienty nejsou určeny jednoznačně, neboť $Y = X\beta_o + \varepsilon = X(\beta_o + \delta) + \varepsilon$.

Předpoklad: Chyby musí být nějakým způsobem „centrovány“.

V opačném případě by parametry modelu nebyly jednoznačně určeny. K chybám by se jinak dal přičíst libovolný vektor z lineárního obalu řádků matice X a dostali bychom stejný model se změněnými parametry: $Y = X\beta_o + \varepsilon = X(\beta_o - v) + (\varepsilon + Xv)$. Jak takové „centrování“ vypadá, uvidíme později u jednotlivých odhadů.

Předpoklad: Chyby mají nesingulární rozdělení; t.j. neexistuje $a \in \mathbb{R}^n$, $a \neq \mathbf{0}$ takové, aby $a^T \varepsilon$ byla nenáhodná konstanta.

Singulárnost rozdělení znamená, že soustava obsahuje deterministickou závislost. Tuto je třeba nalézt a používat jako omezující podmínku na regresní koeficienty.

Předpoklad: Chyby nejsou ovlivněny regresory. To znamená ε a X jsou nezávislé nebo alespoň nekorelované.

Matice X bývá často nenáhodná a při některých experimentech lze její hodnoty předem nastavit, nebo řídit.

Naším cílem je odhadnout parametr β_o . Popřípadě ještě odhadnout nějakou charakteristiku rozdělení tohoto odhadu, například varianční matici.

Odhad založíme na reziduiích $e_i(b) = Y_i - X_i b$ pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, $b \in \mathbb{R}^k$. Rezidua můžeme vyjádřit také jako $e_i(b) = \varepsilon_i + X_i(\beta_o - b)$, což je výhodné pro teoretické vyšetření asymptotického chování.

Proberme nyní několik nejpoužívanějších postupů odvození odhadů.

5.1. OLS-ODHAD (ORDINARY LEAST SQUARES)

OLS-odhad je založen na minimalizaci součtu čtverců reziduí, t.j. hledá se minimum

$$\hat{\beta}_n \in \operatorname{argmin}_{b \in \mathbb{R}^k} \sum_{i=1}^n e_i(b)^2 = \operatorname{argmin}_{b \in \mathbb{R}^k} \sum_{i=1}^n (Y_i - X_i b)^2.$$

Pokud je matice X plně hodnosti dostaneme $\hat{\beta}_n = (X^T X)^{-1} X^T Y$. OLS-odhad je pak možno zapsat ve tvaru

$$\hat{\beta}_n = (X^T X)^{-1} X^T Y = (X^T X)^{-1} X^T (X\beta_o + \varepsilon) = \beta_o + (X^T X)^{-1} X^T \varepsilon.$$

Z tohoto rozpisu okamžitě vyplývá nestrannost a silná i slabá konzistence.

Věta 4: *Když X , ε jsou nezávislé, $E[\varepsilon] = \mathbf{0}$ a $E[(X^T X)^{-1} X^T]$ existuje, pak $\hat{\beta}_n$ je nestranným odhadem parametru β_o .*

Věta 5: *Když $\frac{1}{n} X^T X \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{s.j.} Q$, kde Q je regulární matice, a $\frac{1}{n} X^T \varepsilon \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{s.j.} \mathbf{0}$, potom*

$$\hat{\beta}_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{s.j.} \beta_o.$$

Věta 6: *Když $\frac{1}{n} X^T X \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p} Q$, kde Q je regulární matice, a $\frac{1}{n} X^T \varepsilon \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p} \mathbf{0}$, potom*

$$\hat{\beta}_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{p} \beta_o.$$

Pro OLS-odhad je tedy přirozené chtít, aby chyby měli nulovou střední hodnotu. To je vlastně to avizované „centrování“ chyb modelu.

5.2. M-ODHADY V MODELU LINEÁRNÍ REGRESE

V této kapitole si stručně vysvětlíme, co je to M-odhad. Uvedeme také jeho základní vlastnosti. Podrobnou informaci o M-odhadech je možno nalézt v monografii ??? .

Je dána funkce $\rho : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$. Pro každé $b \in \mathbb{R}^k$ definujeme

$$M_n(\beta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \rho(e_i(b))$$

. Pak M -odhadem nazveme každé řešení minimalizace této funkce, t.j.

$$\hat{\beta}_n \in \underset{b \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} M_n(\beta).$$

Aby byl odhad „rozumný“ musí být splněny některé předpoklady.

Předpoklad: Existuje nenáhodná funkce $M : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}_+$ taková, že pro každé $b \in \mathbb{R}^k$ platí

$$\mathbb{E}[M_n(b) - M_n(\beta_0)] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[\rho(e_i(b)) - \rho(\varepsilon_i)] \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{s.j.} M(b),$$

a pro každé $D \in \mathbb{R}$ platí

$$\sup_{\|b\| \leq D} |M_n(b) - M_n(\beta_0) - M(b)| \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{s.j.} 0.$$

Funkce M má jediné globální minimum v bodě $\tilde{\beta} \in \mathbb{R}^k$, t.j. $\{\tilde{\beta}\} = \underset{b \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} M(b)$.

Za celkem mírných předpokladů lze dokázat konvergenci M -odhadu k bodu $\tilde{\beta}$.

Věta 7: *Když ρ je spojitá funkce na \mathbb{R}^k a existuje kompaktní $K \subset \mathbb{R}^k$, $\Delta > 0$ a $n_o \in \mathbb{N}$ tak, že pro každé $n \geq n_o$ je $\inf_{b \notin K} M_n(b) - M_n(\beta_0) \geq M(\tilde{\beta}) + \Delta$, potom pro každé $n \geq n_o$ odhad $\hat{\beta}_n$ existuje a platí $\hat{\beta}_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{s.j.} \tilde{\beta}$.*

Tudíž, aby jsme odhadovali správně, musí být $\beta_0 = \tilde{\beta}$. V jiném případě bude náš odhad systematicky vychýlen. Připojme proto další dva předpoklady, které nám tuto rovnost zaručí.

Předpoklad: Náhodné veličiny X a ε jsou nezávislé.

Předpoklad: Pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ a pro každé $u \in \mathbb{R}$ platí $\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)] \geq 0$.

Pak totiž platí

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[M_n(b) - M_n(\beta_0)] &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + X_i(\beta_0 - b)) - \rho(\varepsilon_i)] = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + X_i(\beta_0 - b)) - \rho(\varepsilon_i) | X_i]] = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[R_i(X_i(\beta_0 - b))] \geq 0, \end{aligned}$$

kde $R_i(u) = \mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)]$.

Limitním přechodem zjistíme, že β_o je globálním minimem funkce M . Z předpokládané jednoznačnosti tohoto minima okamžitě plyne, že $\beta_o = \tilde{\beta}$.

Uvědomme si, že druhá podmínka je vlastně tím „centrováním“ chyb, které jsme inzerovali na začátku kapitoly o modelu lineární regrese.

Nyní si povšimněme, co tato podmínka znamená pro některé konkrétní volby funkce ρ .

Lemma 8: *Nechť existuje $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ taková, že pro každé $u, v \in \mathbb{R}$ platí $\rho(u) - \rho(v) = \int_v^u \psi(t) dt$ a necht' existuje $\delta > 0$ tak, že $\sup_{|t| \leq \delta} \mathbb{E}[|\psi(\varepsilon + t)|] < +\infty$. Potom*

$$\begin{aligned} \limsup_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)]) &\leq \limsup_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i + u)], \\ \liminf_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)]) &\geq \liminf_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i + u)], \\ \limsup_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i - u) - \rho(\varepsilon_i)]) &\leq -\liminf_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i - u)], \\ \liminf_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i - u) - \rho(\varepsilon_i)]) &\geq -\limsup_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i - u)]. \end{aligned}$$

Důkaz: Pro $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ máme rozpis

$$\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)] = \mathbb{E}\left[\int_0^u \psi(\varepsilon_i + t) dt\right].$$

Předpoklad $\sup_{|t| \leq \delta} \mathbb{E}[|\psi(\varepsilon + t)|] < +\infty$ umožňuje pro $|u| \leq \delta$ zaměnit pořadí integrace:

$$\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)] = \int_0^u \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i + t)] dt.$$

Limitní přechodem pro integrál vydělený délkou u dostáváme

$$\limsup_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)]) = \limsup_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} \int_0^u \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i + t)] dt \leq \limsup_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i + u)]$$

Obdobně získáme i zbylé nerovnosti

$$\begin{aligned} \liminf_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)]) &\geq \liminf_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i + u)], \\ \limsup_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i - u) - \rho(\varepsilon_i)]) &\leq -\liminf_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i - u)], \\ \liminf_{u \rightarrow 0+} \frac{1}{u} (\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i - u) - \rho(\varepsilon_i)]) &\geq -\limsup_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i - u)] \end{aligned}$$

Q.E.D.

Tvrzení 9: *Nechť jsou splněny předpoklady lemmatu ??? a necht' pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ a pro každé $u \in \mathbb{R}$ platí $\mathbb{E}[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)] \geq 0$, potom pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ je*

$$\limsup_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i + u)] \geq 0, \quad \liminf_{u \rightarrow 0+} \mathbb{E}[\psi(\varepsilon_i - u)] \leq 0.$$

Důkaz: Tvrzení je přímým důsledkem lemmatu ??? .

Q.E.D.

Tvrzení 10: *Nechť jsou splněny předpoklady lemmatu ??? , funkce ρ je konvexní a nechť pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ je*

$$\liminf_{u \rightarrow 0^+} E[\psi(\varepsilon_i + u)] \geq 0, \quad \limsup_{u \rightarrow 0^+} E[\psi(\varepsilon_i - u)] \leq 0$$

potom pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ a pro každé $u \in \mathbb{R}$ platí $E[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)] \geq 0$.

Důkaz: Když ρ je konvexní, pak je konvexní i střední hodnota $E[\rho(\varepsilon_i + u) - \rho(\varepsilon_i)]$, jako funkce proměnné u . Z této konvexity a z lemmatu ??? již plyne vlastní tvrzení.

Q.E.D.

1) OLS-odhad

OLS-odhad je speciálním případem M-odhadu při volbě $\rho(t) = t^2$. Tato funkce je konvexní a má hustotu $\psi(t) = 2t$. Pak podle tvrzení ??? , je vhodné předpokládat $E[\varepsilon_i] = 0$ pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

2) L_1 -odhad

Zde $\rho(t) = |t|$. Tato funkce je konvexní a má hustotu $\psi(t) = \begin{cases} 1 & \text{proti } 0 \\ 0 & \text{proti } 0 \text{ a tak} \\ -1 & \text{proti } 0 \end{cases}$

podle tvrzení ??? , je vhodné předpokládat $E[\psi(\varepsilon_i+)] = P_\theta(\varepsilon \geq 0) - P_\theta(\varepsilon < 0) \geq 0$, $E[\psi(\varepsilon_i-)] = P_\theta(\varepsilon > 0) - P_\theta(\varepsilon \leq 0) \leq 0$ pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Jinými slovy 0 je mediánem chyby ε_i pro každé $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

5.3. LMS-ODHAD (LEAST MEDIAN OF SQUARES)

Uvedme ještě příklad odhadu regresních koeficientů, který není M-odhadem. Jedním z takových odhadů je LMS-odhad navržený v knize ??? . Jedná se o odhad minimalizující medián empirické chyby.

Tento odhad je založen na absolutních reziduiích $|e_1(b)|, |e_2(b)|, \dots, |e_n(b)|$, které uspořádáme podle velikosti, od nejmenšího po největší. Tyto uspořádané statistiky označme $e_{[1]}(b) \leq e_{[2]}(b) \leq \dots \leq e_{[n]}(b)$.

Minimalizací j -té uspořádané statistiky získáme odhad $M_{j,n} \in \underset{b \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} e_{[j]}(b)$, zde $j \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Tento odhad můžeme popsat také jiným způsobem. Z pozorování vybereme všemi způsoby j pozorování na jejichž základě uděláme odhad tak, že minimalizujeme maximum všech reziduí. Pak vybereme tu j -tici pozorování, která dává minimální rezidua.

Odhad je rozumným odhadem pro β_o pokud $j > \frac{n}{2}$. Při $j < \frac{n}{2}$ odhadujeme vlastně charakteristiku kontaminace původních dat.

Odhad $M_{[\frac{n+k+1}{2}],n}$ se nazývá LMS-odhad (Least Median of Squares) a je konzistentním odhadem parametru β_o , viz ??? .

LITERATURA

- [Amemiya] T. Amemiya: Regression analysis when the dependent variable is truncated normal. *Econometrica* **42**, 999-1012, 1973.
- [Anděl] J. Anděl: *Matematická statistika*. SNTL/ALFA, Praha 1978.
- [Fomby, Hill, Johnson] T.B. Fomby and R.C. Hill and S.R. Johnson: *Advanced Econometric Methods*. Springer-Verlag, Berlin 1984.
- [Heckman 1976] J. Heckman: The common structure of statistical models of truncation, sample selection and limited dependent variables and a simple estimator for such models. *Annals of Econometric and Social Measurement* **5**, 475-492, 1976.
- [Heckman 1979] J. Heckman: Sample bias as specification error. *Econometrica* **47** ?, 153-162, 1979.
- [Jurečková, Sen] Jurečková, J. and P.K. Sen: *Robust Statistical Procedures*. John Wiley & Sons, Inc., New York 1996.
- [Leroy, Rouseeuw] Robust Regression and Outlier Detection: *A.M. Leroy, P.J. Rouseeuw*. John Wiley & Sons, New York 1987.
- [Machek] Josef Machek: *Teorie odhadu*. KPMS MFF UK, Praha 1980.
- [van de Geer] Sara van de Geer: *Regression Analysis and Empirical Processes*. Ph.D. thesis of State University of Leiden, 1987.
- [Tobin] J. Tobin: Estimation of relationships for limited dependent variables. *Econometrica* **26**, 24-36, 1958.
- [van der Vaart, Wellner] Aad W. van der Vaart and Jon A. Wellner: *Weak Convergence and Empirical Processes*. Springer, New York 1996.

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSKÁ 83, 186 75 PRAHA
E-MAIL: lachout@karlin.mff.cuni.cz

STATISTICKÉ METODY PRO HODNOCENÍ HOMOGENITY TEXTILNÍCH MATERIÁLŮ

ALEŠ LINKA A PETR VOLF

ABSTRAKT. Článek poskytuje přehled statistických metod pro sledování nestejnomyšernosti textilního materiálu na základě získané obrazové informace. Detailněji je zkoumáno využití náhodných polí, speciálně Isingova modelu, pro sledování nestejnomyšernosti netkané textilie.

Резюме. В статье рассмотрены модели и статистические методы анализа образов с применением к классификации и анализу однородности текстильных материалов. Используются модели случайных полей Маркова (например модели Исинга) и характеристики распределений вероятности в этих полях.

ABSTRACT. The contribution presents a selection of methods for the analysis of textures, with the application to the inspection of nonhomogeneity of textile materials. A set of statistical characteristics of textures is reviewed and used for the classification of real textile material images. Further, the models of Markov random fields are recalled, their parameters are estimated and then utilized for the characterization of a texture.

1. ÚVOD

Jedním z kritérií hodnocení kvality textilie je i sledování rovnoměrnosti uspořádání materiálu. Případná nerovnoměrnost se může projevit kolísáním hmotnosti, mechanických a fyzikálních vlastností, či nestejnomyšernou strukturou (prodyšností, porositou). Pro měření takovéto nestejnomyšernosti existuje řada přístupů, od subjektivního vizuálního hodnocení až k počítačovým metodám analýzy obrazu, např. Militký (1998), Cohen (1991), Finsker (1997).

V práci popíšeme některé z metod statistické analýzy nestejnomyšernosti materiálu a zároveň se pokusíme provést klasifikaci podle stupně nestejnomyšernosti. Přitom budeme předpokládat, že analyzovaná data byla získána snímáním digitálních obrazů textilie, a že zkoumaný vzorek materiálu je rozdělen do obdelníkové sítě buněk (pixelů), přičemž každá buňka vykazuje konstantní „barvu“ (úroveň šedi). Škála pro „barvu“ závisí na našem výběru, v nejjednodušším případě pracujeme s binárním obrazem, tj. s dvěma hodnotami 0 (bílá) a 1 (černá).

Budeme se podrobněji věnovat použití modelu Markovských náhodných polí pro sledování nehomogenity netkané textilie. Modelování textur pomocí náhodných polí a jejich klasifikace na základě odhadu parametrů modelu náhodného pole byla zkoumána v posledním 20 letech např. Cross (1983), Winkler (1998), Johansson (2000) atd.. V řadě případů byla rovněž aplikována na textilní struktury Cohen (1991), Carstensen (1992), Finsker (1997). Především nedostatečná rychlost a efektivnost

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 68T10; Secondary 62P30.

Klíčová slova. Nestejnomyšernost, řízení kvality, Shewhartův diagram, náhodné pole, Isingův model, textilní materiál.

Práce na této problematice je podporována z projektů MŠMT č. VŠ 97084 a VZ J11/98:244100003.

výpočtu odhadu parametru náhodného pole, zatím brání jejich rozsáhlejšímu nasazení pro „on-line“ sledování textilií. Z tohoto důvodu pracujeme s jednoduchým Isingovým modelem pro binární obraz textilie. Nutno ovšem konstatovat, že i tento zvolený postup má řadu úskalí včetně předzpracování snímaného obrazu.

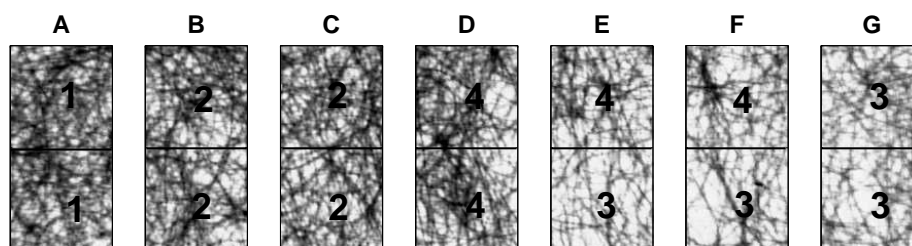
Abychom mohli efektivně porovnat výsledky získané z Isingova modelu, byla nejprve provedena texturní analýza a na základě zjištěných texturních charakteristik byla provedena klasifikace nehomogenity rozložení materiálu v netkané textili pomocí klasifikačního stromu. Tento přístup, který obvykle využívá texturní charakteristiky vypočtené na základě matice vzájemného výskytu úrovní šedi („grey level cooccurrence matrix“), byl studován v řadě prací, za všechny uvedme Weickert (1998) a Bodnarova (2000), jež se přímo vztahují textilním texturám.

2. KLASIFIKACE S VYUŽITÍ TEXTURNÍCH STATISTIK

Textura je důležitou částí interpretace obrazu. Jeden z přístupů k texturní analýze využívá číselné charakteristiky vypočtené z matice vzájemného výskytu úrovní šedi pro charakterizaci příslušné textury. Poprvé byly tyto číselné charakteristiky použity pro analýzu textur v práci Harlick (1973). Zde rovněž nalezneme první pokusy o využití těchto charakteristik ke klasifikaci, v tomto případě mikrofotografií pískovce. Problematikou klasifikace textur na základě zjištěných charakteristik se zabývala celá řada dalších autorů, za všechny uvedme Wezcka (1976), Connors (1980), de Buf (1990) a Berry (1990). Carstensen (1992) testoval informativnost charakteristik pomocí metody klasifikačních stromů na 15 vybraných Brodatzových texturách, přičemž ve výběru byly jak textury deterministické, tak stochastické, v obou případech velmi podobné texturám textilním. V práci Bodnarova (2000) jsou tyto texturní charakteristiky použity pro detekci kazů tkaných textilií, výsledky jsou pak porovnány s výsledky získanými na základě spektrální analýzy.

Texturní statistiky jsou velmi často klasifikovány do skupin - statistiky 1. řádu, statistiky 2. řádu a statistiky vyšších řádů. Statistiky 1. řádu se vztahují k marginálnímu rozdělení úrovně šedi. Statistiky 2. řádu charakterizují sdružené rozdělení úrovní šedi dvou pixlů, statistiky vyšších řádů se potom týkají sdruženého rozdělení úrovní šedi tří a více pixlů.

V další části nejprve podáme přehled texturních statistik používaných v analýze textur. Dále se pokusíme s pomocí texturních statistik rozklasifikovat obraz netkaného materiálu do přibližně homogenních skupin. K vlastní klasifikaci bude použita



OBRÁZEK 1. Ukázka 7 pruhů netkané textilie, u kterých byla posuzována homogenita rozložení materiálu.

metoda klasifikačních stromů, speciálně využijeme proceduru pro klasifikační stromy v programu Splus2000.

2.1. Texturní statistiky 1. řádu. Texturní statistiky 1.řádu mohou být vypočteny ze zjištěných četností $\{n_i\}_{i=0}^{G-1}$ úrovní šedi v obraze, N označuje celkový počet pixlů v obraze. Označíme-li G počet úrovní šedi, potom $\sum_{i=0}^{G-1} n_i = N$. Označme dále $\hat{p}_i = \frac{n_i}{N}$ relativní četnost úrovně šedi i , potom $\{\hat{p}_i\}_{i=0}^{G-1}$ je zároveň odhadem pravděpodobnostního rozdělení úrovně šedi. Pro odhady texturních charakteristik 1. řádu platí:

A1. *Odhad střední úrovně šedi*

$$\hat{\mu} = \sum_{i=0}^{G-1} i \hat{p}_i.$$

A2. *Odhad rozptylu úrovně šedi*

$$\hat{\sigma}^2 = \sum_{i=0}^{G-1} (i - \hat{\mu})^2 \hat{p}_i.$$

A3. *Odhad variačního koeficientu*

$$\hat{c}_v = \frac{\hat{\sigma}}{\hat{\mu}}$$

A4. *Výběrová šikmost úrovně šedi*

$$\hat{\gamma}_1 = \frac{1}{\hat{\sigma}^3} \sum_{i=0}^{G-1} (i - \hat{\mu})^3 \hat{p}_i.$$

A5. *Výběrová špičatost úrovně šedi*

$$\hat{\gamma}_2 = \frac{1}{\hat{\sigma}^4} \sum_{i=0}^{G-1} (i - \hat{\mu})^4 \hat{p}_i - 3$$

A6. *Energie úrovně šedi*

$$\hat{e} = \sum_{i=0}^{G-1} \hat{p}_i^2$$

A7. *Entropie úrovně šedi*

$$\hat{s} = - \sum_{i=0}^{G-1} \hat{p}_i \log \hat{p}_i$$

Texturní statistiky 1. řádu velmi závisí na světelných podmínkách. Je běžnou praxí, že se snažíme tento vliv eliminovat. Obvykle to provádíme tak, že se úrovně šedi transformují do nového obrazu. V novém obrazu jsou většinou jednotlivé jasové úrovně zastoupeny rovnoměrně, tomuto postupu říkáme ekvalizace obrazu a vede na zvýšení kontrastu obrazu.

2.2. Texturní statistiky 2. řádu. Statistiky 2. řádu jsou obvykle založeny na matici vzájemného výskytu úrovní šedi, která zhruba řečeno popisuje prostorové závislosti mezi jednotlivými úrovněmi šedi. Matice vzájemného výskytu úrovní šedi $\{c_{ij}(\mathbf{h}), i = 0, \dots, G-1, j = 0, \dots, G-1\}$ je definována vzhledem k danému posunutí $\mathbf{h} = (k, l)$ a prvku (i, j) , přičemž hodnota c_{ij} označuje kolikrát se objevuje úroveň šedi j v pozici \mathbf{h} relativně k bodu, jež má úroveň šedi i . Označíme-li $n_{\mathbf{h}}$ celkový počet dvojic s posunutím \mathbf{h} , pak

$$C_{ij}(\mathbf{h}) = \frac{c_{ij}(\mathbf{h})}{n_{\mathbf{h}}}$$

odhaduje sdružené rozdělení úrovní šedi v závislosti na daném posunutí \mathbf{h} (dále C_{ij} bude označovat $C_{ij}(\mathbf{h})$). V praxi se velmi často volí pro \mathbf{h} hodnoty $(0, 1)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$ a $(-1, 1)$. Z matice vzájemného výskytu úrovní šedi můžeme vypočítat texturní charakteristiky sdruženého rozdělení úrovní šedi, které lze použít pro popis a klasifikaci textur. Mezi texturní statistiky 2. řádu z matice vzájemného výskytu úrovní šedi zařazujeme následující statistiky:

B1. *Energie (Druhý angulární moment)*

$$\hat{e}c = \sum_{i=0}^{G-1} \sum_{j=0}^{G-1} C_{ij}^2$$

B2. *Entropie*

$$\hat{s}c = - \sum_{i=0}^{G-1} \sum_{j=0}^{G-1} C_{ij} \log C_{ij}.$$

B3. *Maximální pravděpodobnost*

$$\hat{m} = \max_{i,j} C_{ij}.$$

B4. *Korelace (Autokorelace)*

$$\hat{\rho} = \sum_{i=0}^{G-1} \sum_{j=0}^{G-1} \frac{(i - \hat{\mu}_x)(j - \hat{\mu}_y)C_{ij}}{\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y}$$

kde $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ jsou odhady střední hodnoty a rozptylu založených na odhadech marginálních rozdělení C_i^x a C_j^y .

B5. *Diagonální moment*

$$\hat{d} = \sum_{i=0}^{G-1} \sum_{j=0}^{G-1} |i - j|(i + j - \hat{\mu}_x - \hat{\mu}_y)C_{ij}.$$

Z matice vzájemného výskytu úrovní šedi můžeme obdržet odhad rozdělení absolutních hodnot rozdílů úrovní šedi dvojic pixlů

$$D_k = \underbrace{\sum_{i=0}^{G-1} \sum_{j=0}^{G-1} C_{ij}}_{|i-j|=k}, \quad k = 0, \dots, G-1.$$

Na toto rozdělení můžeme dívat jako na odhad rozdělení vzdálenosti od hlavní diagonály v matici vzájemného výskytu úrovní šedi.

Texturní statistiky 2. řádu vypočtené z odhadu rozdělení absolutních rozdílů úrovní šedi dvojic pixlů:

B6. *Energie rozdělení absolutních rozdílů úrovní šedi*

$$\widehat{ed} = \sum_{k=0}^{G-1} D_k^2.$$

B7. *Entropie absolutních rozdílů úrovní šedi*

$$\widehat{sd} = - \sum_{k=0}^{G-1} D_k \log D_k.$$

B8. *Variogram (Inerce, Kontrast)*

$$\widehat{vd} = \sum_{k=0}^{G-1} k^2 D_k = 2\widehat{\sigma}(1 - \widehat{\rho}).$$

B9. *Lokální homogenita*

$$\widehat{ld} = \sum_{k=0}^{G-1} \frac{D_k}{1 + k^2}.$$

Z matice vzájemného výskytu úrovní šedi můžeme rovněž obdržet odhad rozdělení součtu hodnot úrovní šedi dvojic pixelů

$$S_k = \underbrace{\sum_{i=0}^{G-1} \sum_{j=0}^{G-1} C_{ij}}_{i+j=k}, \quad k = 0, \dots, 2G-2.$$

Pro výběrový průměr tohoto rozdělení platí

$$\widehat{sa} = \sum_{k=0}^{2G-2} k S_k = \widehat{\mu}_x + \widehat{\mu}_y.$$

Texturní statistiky 2. řádu založené na rozdělení součtu úrovní šedi dvojic pixelů:

B10. *Energie rozdělení součtu úrovní šedi*

$$\widehat{es} = \sum_{k=0}^{2G-2} S_k^2.$$

B11. *Entropie rozdělení součtu úrovní šedi*

$$\widehat{ss} = - \sum_{k=0}^{2G-2} S_k \log S_k.$$

B12. *Odhad rozptylu rozdělení součtu úrovní šedi*

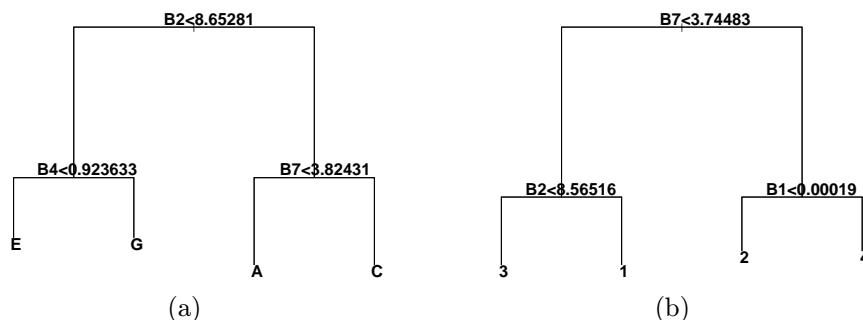
$$\widehat{vs} = \sum_{k=0}^{2G-2} (k - \widehat{sa})^2 S_k$$

B13. *Odhad třetího momentu rozdělení součtu úrovní šedi („Cluster Shade“)*

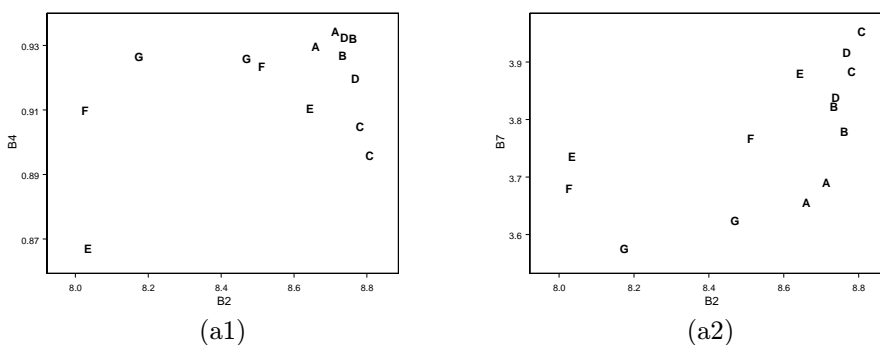
$$\widehat{hs} = \sum_{k=0}^{2G-2} (k - \widehat{sa})^3 S_k$$

B14. Odhad čtvrtého momentu rozdělení součtu úrovní šedi („Cluster Prominency“)

$$\widehat{ps} = \sum_{k=0}^{2G-2} (k - \widehat{sa})^4 S_k$$

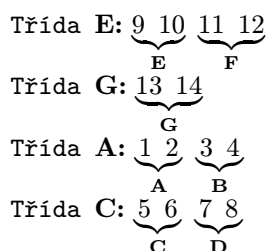


OBRÁZEK 2. Klasifikační stromy pro klasifikaci homogenity rozložení materiálu v netkané textilii v případech: (a) Přímá neřízená klasifikace kusů textilie A-G (viz obrázek 1) pomocí klasifikačního stromu, (b) Nezávislým posuzovatelem byla provedeno rozdělení částí textilie do 4 skupin (viz obrázek 1) a následně byl použita metoda klasifikačního stromu.



OBRÁZEK 3. Graf rozdělení hodnot statistiky B2 proti hodnotám statistiky B4 (a1), resp. hodnot statistiky B2 proti hodnotám statistiky B7 (a2) v případě klasifikace (a).

2.3. **Příklad.** Obraz netkané textilie byl rozdělen do 7 pruhů velikosti 200×100 pixlů (viz obrázek 1). Jednotlivé pruhy jsou označeny písmeny **A-G**. Každý z pruhů byl rozdělen do dvou oken velikosti 100×100 pixlů. Za předpokladu homogenity každého z jednotlivého pruhů můžeme každému ze dvou oken přiřadit stejný faktor. Pro každé okno byly vypočteny číselné charakteristiky B1 – B14 založené na příslušné matici vzájemného výskytu úrovní šedi pro horizontální posunutí $\mathbf{h} = (0, 1)$ v okně (100×100 pixlů). Pomocí metody klasifikačních stromů byla na základě zjištěných texturních charakteristik B1 – B14 provedena neřízená klasifikace textur. Příslušný



TABULKA 1. Přiřazení jednotlivých oken (obrázek 1) k uzlům v případě klasifikačního stromu (obrázek 2a).

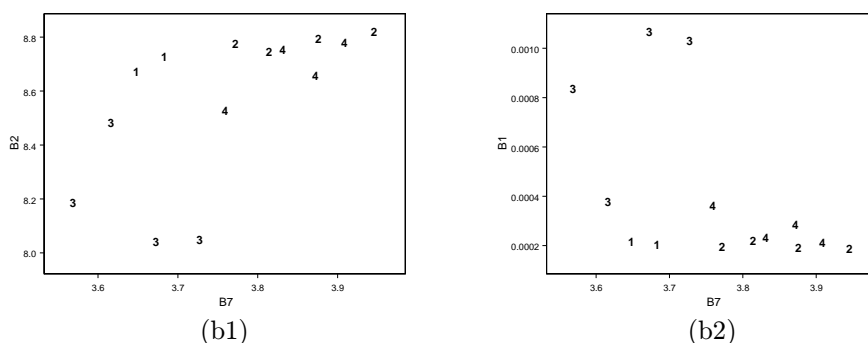
klasifikační strom je na obrázku 2a. Pro klasifikační strom 2a má výpis s programu Splus2000 následující podobu:

```

Classification tree:
tree(formula=cvy20,na.action=na.exclude,mincut=2,minsize=5, mindev=0.001)
Variables actually used in tree construction: [1] "B2" "B4" "B7"
Number of terminal nodes: 4
Residual mean deviance: 1.664 = 16.64 / 10
Misclassification error rate: 0.4286 = 6 / 14

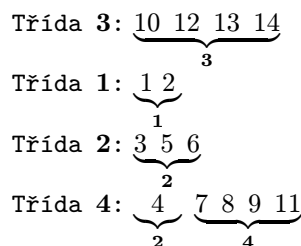
```

Vidíme, že jako typické třídy byly vybrány **A**, **C**, **E**, **G**, ostatní 3 k nim byly přiřazeny. Při bližším prozkoumání konečných uzlů (viz tabulka 1) zjistíme, že do stejných skupin byly přibližně zařazeny pruhy, které jsou stejně homogenní co do rozložení materiálu. Nejdůležitější charakteristikou pro klasifikaci byla B2 (entropie).



OBRÁZEK 4. Graf rozdělení hodnot statistiky B7 proti hodnotám statistiky B2 (b1), resp. hodnot statistiky B7 proti hodnotám statistiky B1 (b2) v případě klasifikace (b).

Obrázek 3a1 ilustruje rozdělení statistiky B2 proti B4 a obrázek 3a2 rozdělení statistiky B2 proti B7. V případě klasifikačního stromu na obrázku 2b byly okna nejprve z pohledu homogenity rozložení materiálu posouzeny nezávislým posuzovatelem a rozděleny do 4 skupin (viz obrázek 1). Toto rozdělení bylo následně spolu s hodnotami texturních statistik B1 – B14 použito pro konstrukci klasifikačního stromu. Příslušný klasifikační strom je na obrázku 2b a má výpis s programem Splus2000 má následující podobu:



TABULKA 2. Přiřazení jednotlivých oken (obrázek 1) k uzlům v případě klasifikačního stromu (obrázek 2b)

```

Classification tree:
snip.tree(tree=tr2,nodes=7)
Variables actually used in tree construction: [1] "B7" "B2" "B1"
Number of terminal nodes: 4
Residual mean deviance: 0.5004 = 5.004 / 10
Misclassification error rate: 0.07143 = 1 / 14
    
```

Pouze jedno okno (7.143%) nebylo klasifikováno správně (viz tabulka 2). Nejdůležitější charakteristikou pro klasifikaci byla B7 (entropie rozdělení absolutních rozdílů). Obrázek 4b1 ilustruje rozdělení statistiky B7 proti B2 a obrázek 4b2 rozdělení statistiky B7 proti B1.

Závěrem tohoto odstavce poznamenejme, že oba stromy klasifikují podle statistik B1,B2,B4 a B7, z pohledu nehomogenity rozložení materiálu dostáváme srovnatelné výsledky.

3. VYUŽITÍ MODELU NÁHODNÉHO POLE

Tento přístup využívá toho, že je možné popsat digitální obraz textile (a speciálně textile netkané) jako realizaci náhodného pole určitého typu. Obraz je tvořen konfigurací stavů $\mathbf{x} = \{x_i, i \in I\}$ v dvourozměrné síti indexů $I = \{1, 2, \dots, N\}$, kde index $i \in I$ označuje určitý element (pixel) obrázku. Zpravidla x_i nabývají jen několika hodnot (odpovídají např. různým barvám) a předpokládá se, že jsou vzájemně svázána, alespoň s hodnotami v sousedních polích tak, že náhodné pole vykazuje Markovskou vlastnost.

Představme si nejjednodušší případ, kdy obrázek je binární, hodnoty x_i jsou buď 0 či 1. Formulujme rozdělení pravděpodobnosti náhodné veličiny \mathbf{x} , $Q(\mathbf{x})$, tj. pravděpodobnost pro konfiguraci hodnot x_i dávající výsledný obraz. Jedním z používaných modelů je Isingův model, Janžura (1990), Winkler (1995), Tjelmeland (1998):

$$\ln Q(\mathbf{x}) = C + \alpha \sum_i x_i + \beta \sum_i \sum_{j \in \mathcal{O}_i} x_i x_j,$$

kde C je neznámá normující konstanta také závisící na α, β a \mathcal{O}_i představuje okolí bodu i . Druhý člen tedy vyjadřuje vzájemnou vazbu sousedních polí, např. $\beta > 0$ znamená, že spolu sousedí spíše stejné barvy. Dále např. $\alpha = \frac{-|\mathcal{O}|}{2} \beta$ znamená, že obě barvy jsou stejně pravděpodobné, kde $|\mathcal{O}|$ je počet bodů v okolí. My budeme pracovat s okolím složeným ze všech sousedních, tj. 8 bodů.

Snadno odvodíme podmíněná rozdělení pro hodnotu v jednom bodě, při daných hodnotách v ostatních bodech:

$$(1) \quad \ln Q_i(x_i | \mathbf{x}_{(-i)}) = \alpha x_i + \beta x_i \sum_{j \in \mathcal{O}_i} x_j + C_i,$$

což vede na pravděpodobnost (logistický či logitový pravděpodobnostní model)

$$Q_i(x_i = 0 | \mathbf{x}_{(-i)}) = \frac{1}{1 + \exp(\alpha + \beta \sum_{j \in \mathcal{O}_i} x_j)},$$

a přirozeně $Q_i(x_i = 1 | \mathbf{x}_{(-i)}) = 1 - Q_i(x_i = 0 | \mathbf{x}_{(-i)})$.

Je také poměrně snadné pro daný Isingův model vygenerovat jeho reprezentaci, tj. charakteristickou konfiguraci, obraz, pomocí Gibbsova nebo Metropolis–Hastingsova algoritmu, tzn. postupů známých jako Markov chain Monte Carlo (generované Markovovy řetězce, MCMC, Geman (1984) Bernardo (1994), Tjelmeland (1998)).

Na druhou stranu, není zcela jednoduché pro daná data – konfiguraci nul a jedniček – odhadnout parametry modelu (především díky neznalosti normující konstanty C , která na parametrech závisí a jejíž zjištění komplikuje rozsáhlost úlohy).

Úlohu maximálně věrohodného odhadu (MLE) je možné řešit opět pomocí intenzivních simulací metodou MCMC. Je nutno však nejdříve obejít fakt, že neznáme normující konstantu. K jejímu alespoň "relativnímu" odhadu se používá Gibbsův algoritmus, Tjelmeland (1998b). Potom pomocí další MCMC procedury, např. algoritmu Metropolis–Hastingse, se generuje reprezentace aposteriorního rozdělení neznámých parametrů α a β , s využitím naměřených dat. Tímto postupem zároveň získáme i empirické kvantily aposteriorního rozdělení, což nám opět umožní testovat shodu dat s očekávaným standardem (Isingovým modelem pro "ideální" textilií) a také odhalit změny modelu – tj. změny charakteru struktury materiálu. Tento postup je však příliš výpočetně (tj. i časově) náročný pro operativní on-line analýzu.

Proto se používají metody zvané maximálně pseudo-věrohodný odhad, MPLE, Besag (1986), Tjelmeland (1998b), které pracují s aproximací věrohodnostní funkce. Nejjednodušším přístupem v dané situaci je použít jako pseudověrohodnostní funkci prostě součin podmíněných jednorozměrných pravděpodobností (1):

$$Q^*(\mathbf{x}, \alpha, \beta) = \prod_{i \in I} Q_i(x_i | \mathbf{x}_{(-i)}, \alpha, \beta).$$

Logaritmus této funkce se maximalizuje přes α a β . Dostáváme:

$$\ln Q^* = \sum_{i \in I} x_i (\alpha + \beta \sum_{j \in \mathcal{O}_i} x_j) - \sum_{i \in I} \ln(1 + \exp(\alpha + \beta \sum_{j \in \mathcal{O}_i} x_j)).$$

Označme $S1 = \sum_{i \in I} x_i$, $J_i = \sum_{j \in \mathcal{O}_i} x_j$, $S11 = \sum_{i \in I} x_i J_i$. Potom

$$\frac{\partial \ln Q^*}{\partial \alpha} = S1 - \sum_{i \in I} \frac{\exp(\alpha + \beta J_i)}{1 + \exp(\alpha + \beta J_i)}, \quad \frac{\partial \ln Q^*}{\partial \beta} = S11 - \sum_{i \in I} \frac{J_i \exp(\alpha + \beta J_i)}{1 + \exp(\alpha + \beta J_i)}.$$

K vyřešení rovnic $\partial Q^*/\partial \alpha = 0$, $\partial Q^*/\partial \beta = 0$ můžeme použít např. algoritmu Newtona-Raphsona, který iteruje posloupnost řešení následujícím způsobem:

$$\theta^{(s+1)} = \theta^{(s)} - D2^{-1} D1,$$

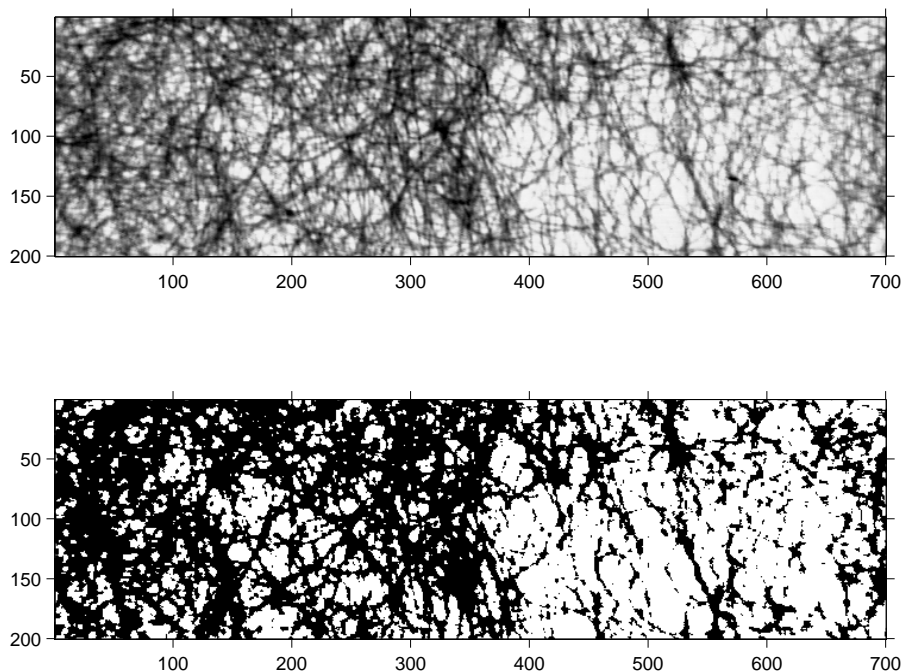
kde pro nás je $\theta = (\alpha, \beta)'$, $\theta^{(s)}$ je s -tá iterace řešení, $D1 = (\partial Q^*/\partial \alpha, \partial Q^*/\partial \beta)'$ je vektor 1. derivací $\ln Q^*$ a $D2$ je matice 2. derivací:

$$\begin{aligned} D2_{1,1} &= \frac{\partial^2 \ln Q^*}{\partial \alpha^2} = - \sum_{i \in I} \frac{\exp(\alpha + \beta J_i)}{(1 + \exp(\alpha + \beta J_i))^2}, \\ D2_{1,2} &= D2_{2,1} = \frac{\partial^2 \ln Q^*}{\partial \alpha \partial \beta} = - \sum_{i \in I} \frac{J_i \exp(\alpha + \beta J_i)}{(1 + \exp(\alpha + \beta J_i))^2}, \\ D2_{2,2} &= \frac{\partial^2 \ln Q^*}{\partial \beta^2} = - \sum_{i \in I} \frac{J_i^2 \exp(\alpha + \beta J_i)}{(1 + \exp(\alpha + \beta J_i))^2}. \end{aligned}$$

Lehce se ukáže, že $D2$ je negativně definitní matice, čili že funkce $\ln Q^*$ je konkávní. Navíc, protože $D1$ protíná zjevně bod $(0,0)'$, nutně jej protíná v jediném bodě (tj. odhad existuje s pravděpodobností 1), ke kterému tedy směřuje naše řešení maximalizace funkce $\ln Q^*$ (a to z jakéhokoli počátečního bodu $\theta^{(0)}$).

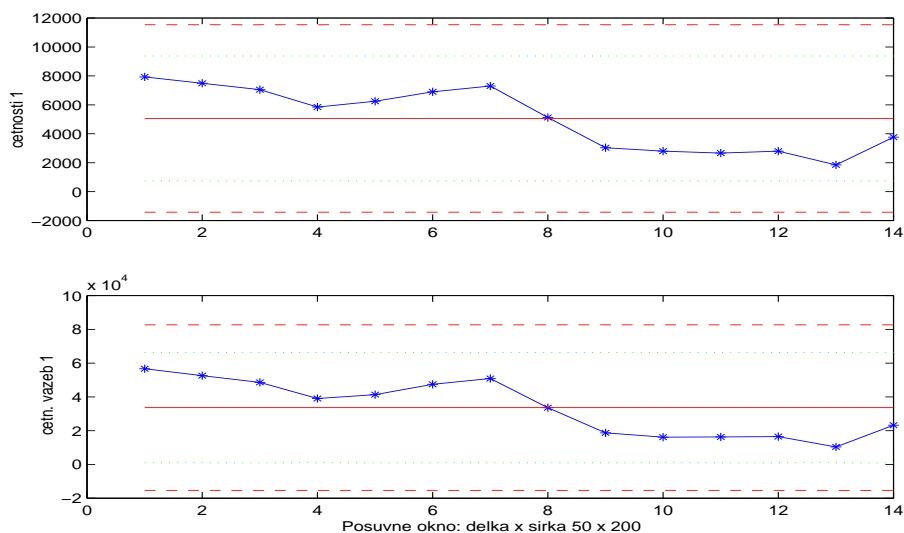
Teorie MLE říká, že odhad metodou MLE je za určitých podmínek regularity konzistentní a asymptoticky normální. Tato limitní normalita se pak využívá jako aproximace pro práci s konečnými soubory dat. O MPLE je dokázána jejich konzistence, alespoň pro takové případy, jaké uvažujeme zde, Tjelmeland (1998b). Málo je však známo o rychlosti konvergence. Jsou také známy výsledky o asymptotické normalitě odhadů parametrů metodou MPLE, Janžura (1992), Tjelmeland (1998b). Přesto je vhodné se o vhodnosti aproximace rozdělení MPLE normálním rozdělením přesvědčit simulačními studii, zejména z proto, že praktické metody používají vlastně několikerou aproximaci. Přes tyto nejasnosti, metoda zde navržená pro exploratorní analýzu nestejnóměrnosti materiálu předpokladu o přibližně normálním rozdělení odhadů parametrů využívá. Metoda je použitelná jak k testování homogenity, tj. stability parametrů v různých částech analyzovaného pole (tento postup ukážeme v následujícím příkladě), tak na testování shody parametrů s očekávaným standardem.

Pro případ polí s více hodnotami či s jinak pojatými vazbami jednotlivých hodnot jsou k dispozici další typy modelů, od dvourozměrných Poissonovských procesů až po tzv. Gibbssovská náhodná pole, Winkler (1995), Tjelmeland (1998).

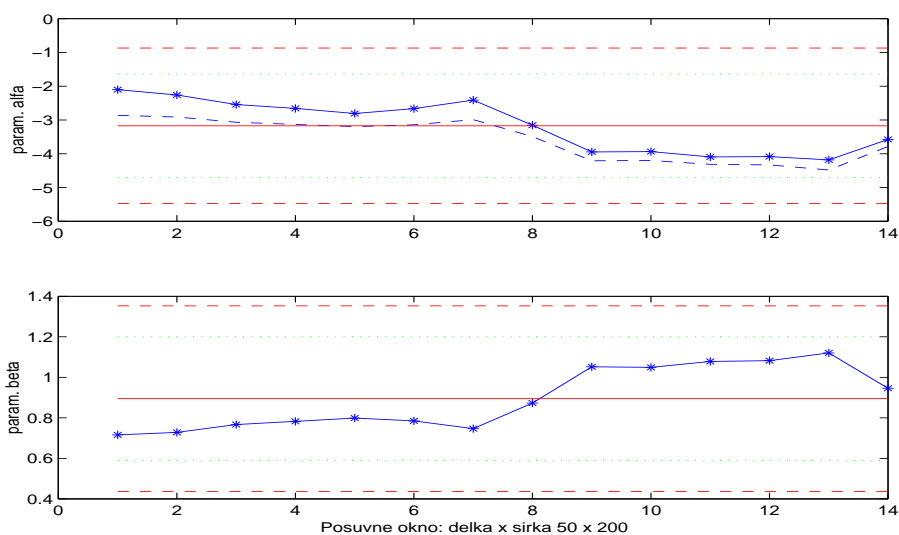


OBRÁZEK 5. Pruh netkané textilie v šedé škále a příslušný segmentovaný binární obraz vytvořený pomocí funkce $\text{im2bw}(I,0.6)$ z matlabského packetu `Image Processing Toolbox`

3. Příklad. Budeme analyzovat nestejnóměrnost pruhu netkaného textilního materiálu, jehož binární obraz je na obrázku 7. Budeme postupně hodnotit nepřekrývající



OBRÁZEK 6. Počty černých bodů a vazeb sousedních černých bodů v jednotlivých oknech



OBRÁZEK 7. MPL odhady parametrů Isingova modelu v jednotlivých oknech

se úseky délky 50 (a celé šířky 200), tj. dostaneme postupně 14 polí. V každém vyhodnotíme

- (1) počty $S1 = \sum x_i$ a $S11 = \sum J_i$, viz obrázek 8,
- (2) MPE odhady parametrů α, β Isingova modelu, viz obrázek 9. Navíc v horním grafu jsou rovněž čárkovaně zobrazeny hodnoty $-4\hat{\beta}$. Kladné hodnoty $\hat{\alpha} - 4\hat{\beta}$ znamenají, že hodnoty “1” jsou preferovány před hodnotami “0”. Kladné hodnoty β způsobují, že model podporuje shlukování buněk stejné hodnoty.

Z takto získaných 14 hodnot každé veličiny jsme také spočetli průměry a směrodatné odchylky. Do grafů jsme pak vynesli i tyto průměry a pásy kolem průměrů tvořené 2, resp. 3 - násobky směrodatné odchylky.

Pro iteraci α, β stačilo vždy jen několik (< 10) kroků Newton-Raphsonova algoritmu, začínali jsme v $\alpha^{(0)} = 0, \beta^{(0)} = 0$. Porovnáním grafu odhadu α a β zjistíme, že je stále $\alpha > -4\beta$, i v oknech, kde převažují bílá místa. Zdůvodněním může být, že skutečná data neodpovídají Isingovu modelu s jednoduchými interakcemi.

LITERATURA

- [1] J. BESAG. On statistical analysis of dirty pictures (with discussion). *J. Royal Statist. Soc. Ser. B* **48**, 1986, 259-302.
- [2] J. BESAG. Spatial interaction and the statistical analysis of lattice systems (with discussion). *J. Royal Statist. Soc. Ser. B* **36**, 1974, 192-326.
- [3] J. M. BERNARDO AND A. F. M. SMITH. *Bayesian Theory*. John Wiley, New York, 1994.
- [4] J. R. BERRY AND J. GOUTSIAS A comparative study of matrix measures for maximum likelihood texture classification. *IEEE Transactions on Systems, an and Cybernetics* **21**, N. 1, 1991, 252-261.
- [5] J. M. H. DU BUF, M. KARDAN AND M. SPANN Texture Feature performance for image segmentation. *Pattern Recognition* **23**, N. 3-4, 1990, 291-309.
- [6] A. BODNAROVA, M. BENNAMOUN, AND K. K. KUBIK. Suitability Analysis of Techniques for Flaw detection in Textiles Using Texture Analysis. *Pattern Analysis & Applications* **3**, 2000, 254-266.
- [7] J. M. CARSTENSEN. *Description and simulation of visual texture*. Ph.D. Thesis, No. 59, IMSOR, Technical University of Denmark, 1992.
- [8] F. COHEN, Z. FAN AND S. ATTALI. Automated Inspection of Textile Fabrics Using Textural Models. *IEEE Tran. on Pattern Analysis nad Machine Inteligence* **13**, N. 8, 1991, 803-808.
- [9] R. W. CONNERS AND C. A. HARLOW. A theoretical comparison of texture algorithms. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Mchine Inteligence* **2**, N. 3, 1980, 204-222.
- [10] G. R. CROSS, AND A. K. JAIN. Markov random field texture models. *IEEE Tran. on Pattern Analysis nad Machine Inteligence* **5**, N. 1, 1983, 25-39.
- [11] R. FINSKER AND J. M. CARSTENSEN. Automated visual inspection in textile. *Proceedings of 10th Scandinavian Conference on Image Analysis*, 1997, 173-179.
- [12] S. GEMAN AND D. GEMAN. Stochastic relaxation, Gibbs distributions and the Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Inteligence* **6**, 1984, 724-741.
- [13] R.M. HARLICK, K. SHANMUGAM AND I. DINSTEIN. Textural features fr image classification. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics* **3**, N. 6, 1973, 610-621.
- [14] M. JANŽURA. O jednom pravděpodobnostním algoritmu pro optimalizační úlohy. *Robust 90, JČMF*, 1990, 84-88.
- [15] J. O. JOHANSSON. Modelling the surface structure of newsprint. *Journal of Applied Statistics* **27**, N. 4, 2000, 425-438.
- [16] J. MILITKÝ, J. RUBNEROVÁ, V. KLIČKA. Vzhledová nestejnóměrost netkaných textilií. *Strutex*, TU Liberec, 1998.
- [17] H. TJELMELAND AND J. BESAG. Markov random fields with higher-order interactions. *Scandinavian Journal of Statistics* **25**, 1998, 415-433.
- [18] H. TJELMELAND. Empirical comparison of MPLÉ and MLE for binary Markov random fields. Res. Report, Dept. of Math. Sciences, Univ. of Trondheim, Norway, 1998.
- [19] J. S. WEZSKA, C. R. DYER AND A. ROSENFELD. A comparative study of texture measures for terrain classification. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics* **6**, N. 4, 1976, 269-285.
- [20] G. WINKLER. *Image Analysis, Random Fields and Dynamic Monte Carlo Methods*. Springer-Verlag Berlin Heldelberg, 1995.
- [21] J. WEICKERT. A Real-Time Algorithm for Assessing Inhomogeneities in Fabrics. *Real-Time Imaging* **5**, N. 1, 1999, 15-22.

DOTAZNÍKY O KVALITĚ ŽIVOTA

MAREK MALÝ

ABSTRAKT. In the last decade, the assessment of quality of life became one of the important endpoints in epidemiological studies, especially in clinical trials. The aim of this paper is to point out the properties and psychometric features of questionnaires for measuring this highly subjective concept and to address the statistical issues present in analysis of quality of life data. The problems arising from the large number of variables measured, repeated measurements, and from missing data are discussed and the suitable methods for their treatment are mentioned.

Абстракт. В этой статье изучается как описывать качество жизни больных.

1. ÚVOD

V posledních 10–15 letech se v lékařské oblasti velmi zvýšil zájem o posouzení kvality života pacientů. V různých epidemiologických studiích, ale zejména v klinických pokusech je nyní značná váha přikládána nejen délce života, ale i jeho kvalitě, jejíž hodnocení se stalo jedním ze standardních výstupů. Statistické aspekty měření kvality života jsou nesmírně různorodé, protože se dotýkají jak procesu zjišťování, tak hodnocení a interpretace dat, k jejichž typickým rysům patří zejména mnohozměrnost a opakovaná měření. Některých aspektů bychom se chtěli dotknout v tomto příspěvku.

K hlavním faktorům ovlivňujícím kvalitu života se počítají zdravotní stav, věk, sociální a ekonomické podmínky, záležitosti duchovního rázu a v neposlední řadě i přání, životní cíle a očekávání toho kterého jedince a jeho zázemí. Dá se říci, že je to pocit vznikající z rozdílu přání a míry jejich (ne)splnění v životě. Mnohé studie ukázaly, že se tato subjektivní výpověď může silně lišit od objektivní lékařské informace a že ani lékař ani nejbližší příbuzní nemocného nejsou schopni jeho odpověď dobře odhadnout. Last (1995) definuje kvalitu života jako subjektivně vnímanou úroveň, jíž lidé hodnotí své fyzické, emocionální a sociální schopnosti.

Kaplan a Bush (1982) zavedli pojem kvalita života ve vztahu ke zdraví (health-related quality of life; HRQoL), aby vymezili tu část kvality života, která je prvotně určována zdravím jedince a zdravotní péčí a která může být ovlivněna klinickými intervencemi. HRQoL vychází hlavně z oblasti sociální, tělesné a psychologické funkce jedince, úrovně chorob, schopnosti postarat se o sebe a citové pohody.

Vzhledem k povaze a obsažnosti pojmu HRQoL vykrytalizoval jako nejvhodnější nástroj ke zjišťování kvality života dotazník, nejčastěji vyplňovaný samotným pacientem při kontaktu se zdravotnickým zařízením. Dotazníky běžně obsahují cca 20–150 otázek seskupených do několika tzv. dimenzí či domén, které korespondují s výše

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62P10.

Klíčová slova. Kvalita života pacientů, klinické pokusy, výběrová šetření.

zmíněnými oblastmi lidského bytí (např. od fyzické k duševní). Dnes je známo minimálně 800 funkčních dotazníkových nástrojů, orientovaných buď obecně na velmi širokou škálu nemocí, anebo specificky na určitou nemoc, populaci, dimenzi.

Přehledný souhrn informací o nástrojích pro měření kvality života poskytuje několik základních publikací (McDowell, Newell, 1987; Fallowfield, 1990; Bowling, 1996; Bowling, 1997; Spilker, 1996). K velmi rozšířeným obecným dotazníkům patří např. SF-36 (Ware, Sherbourne, 1992), který obsahuje 36 otázek v 8 dimenzích a byl přeložen do mnoha jazyků včetně češtiny (Vondra a spol., 1999; Skalská a spol., 2000).

Kvalita života se mění v čase v závislosti na změnách samotného pacienta i jeho okolí. Je ovlivňována věkem, nemocí a její léčbou i tím, jak se jedinec vyrovná s různými stavy a stadii, jimiž prochází. Různé dimenze jsou navíc různě citlivé k různým podnětům a i rychlost, s jakou se změna kvality promítne do měření, závisí na povaze dimenze. Např. u pacientů s různými stupni chronické obstrukční plicní nemoci reagují na zhoršování stavu velmi citlivě fyzické domény, ale hodnocení duševní domény často není extrémně špatné ani u těch, kteří jsou zcela odkázáni na domácí kyslíkový přístroj. Kvalita života je tedy mnohorozměrný, subjektivní a dynamický ukazatel, v psychometrii označovaný jako konstrukt. Můžeme jej měřit pouze nepřímo a pouze v určitém (malém) počtu časových intervalů (Schumacher, Olszewski, 1991).

K oblastem, v kterých nacházejí míry kvality života uplatnění, patří

- 1) Klinická praxe - screening a monitorování psychosociálních problémů v rámci individuální péče o pacienta, výběr ošetření
- 2) Populační studie zaměřené na vnímání zdravotních problémů, dopad rizikových faktorů
- 3) Hodnocení výzkumných studií a zdravotní péče (zde často jako finální míra),
- 4) Klinické pokusy - porovnání účinnosti léků, hodnocení průběhu nemoci, vyhledání rozhodujících zdravotních činitelů
- 5) Hodnocení finanční nákladnosti a efektivity léčby, určení priorit při alokace zdrojů.

Diskriminační vlastnosti dotazníku se uplatní v průřezové studii, kdy je potřeba rozlišit kvalitu života v různých skupinách nemocných v jednom časovém okamžiku, evaluační vlastnosti poslouží při studiu změn kvality života v čase ve studiích longitudinálního typu a při predikci jistých ukazatelů zdravotního stavu včetně délky přežívání. Pro různé účely je nutná rozdílná struktura, úrovně proměnných.

2. OTÁZKY KONSTRUKCE DOTAZNÍKŮ

Při konstrukci nových dotazníků se zpravidla vychází ze širšího počátečního okruhu otázek shromážděných na základě vyjádření expertů či cílených pohovorů s pacienty (Donner, 1997). Téměř vždy se používají otázky uzavřené, kdy respondent vybírá pouze z předepsaných variant odpovědí. Uzavřené alternativní otázky připouštějí jen dvě varianty odpovědi, selektivní nabízejí výběr z více variant - v tomto kontextu většinou z 3-7 odpovědí s logickým uspořádáním od nejmenšího po největší dopad nemoci a dávají tak vzniknout ordinální veličině.

Kromě obsahové správnosti, relativní stručnosti a snadnosti vyplňování musí každý dotazník splňovat základní psychometrické vlastnosti, zejména validitu a reliabilitu (Nunnally, Bernstein, 1994). Ty by se měly vždy znovu ověřit pro novou jazykovou mutaci i pro použití v kontextu jiného onemocnění. Validita udává, do jaké míry měří použitý dotazník skutečně to, co zamýšlí měřit. Jedním z aspektů

validity je také citlivost (ke změně). Citlivost je síla metody, míra schopnosti detekovat u konkrétního jedince klinicky významnou změnu zdravotního stavu, v čase, v průběhu studie. Spolehlivost (reliability) je mírou stability, tedy schopnosti dotazníku poskytovat stejné výsledky, kdykoli je měření opakováno za stejných podmínek. Říká, zda měření nebo dotazník jsou opakovatelné (reprodukovatelné). Reliability je nutnou, ale nikoli postačující podmínkou validity. Se spolehlivostí je úzce spjata vnitřní konzistence, která ukazuje, do jaké míry spolu otázky v rámci jedné dimenze souvisejí.

3. OVĚŘOVÁNÍ VALIDITY A RELIABILITY

V literatuře je popsáno kolem 20 typů validity. Jejich hodnocení je velmi obtížné a do značné míry individuální podle typu problému (Streiner, Norman, 1995; Říčan, 1977), často vychází z korelačních koeficientů a faktorové analýzy (Juniper a spol., 1997). Van Knippenberg, de Haes (1988) analyzují způsoby hodnocení validity užívané v kontextu kvality života. V rámci *pojmové validity* se zkoumá, do jaké míry měří test právě to, co se očekává, že měří, tedy to, k čemu byl konstruován. Pokud se např. studovaná vlastnost mění s věkem, měla by se tato změna odrazit v měření pojmové validity. *Obsahová validita* popisuje, zda test přiměřeně pokrývá celou studovanou oblast. *Kritériální validita* empiricky zkoumá stupeň asociace či korelace posuzovaného nástroje a určitého externího kritéria. Kritériem by, obecně vzato, měla být proměnná, kterou se testem snažíme diagnostikovat či predikovat, či která je obecně uznaným absolutním ("zlatým") standardem. V případě měření kvality života však není žádná taková jasně definovaná a přímo pozorovatelná míra dostupná, protože se jedná o subjektivní, případně experimentální fenomén. V praxi se často se na místě standardního kritéria používá některý z nejrozšířenějších délů užívaných dotazníků. Účinnou technikou, která však vyžaduje speciální plán studie, je přístup "multitrait-multimethod" [MTMM] (Campbell, Fiske, 1959), kdy jsou dvě či více různých (a pokud možno málo souvisejících) dimenzí měřeny dvěma či více metodami. Získá se tak srovnání kvalitativně různých typů korelací. Nejvyšší by měly být reliability všech nástrojů a různé míry stejné dimenze by si měly více odpovídat než různé míry různých dimenzí, mezi nimiž by vlastně neměl být vztah (Streiner, Norman, 1995). Pro výpočet citlivosti se někdy používá koncepce nejmenšího závažného rozdílu (minimal important difference), což je nejmenší změna ve skóru určité domény, která je již klinicky anebo z pohledu pacienta považována za významnou (Jaeschke a spol., 1989; Juniper a spol., 1994).

Jednou z metod zjišťování reliability (Řehák, 1998) je opakované vyplnění dotazníku (postup test-retest) po několika týdnech, kdy se již snížil efekt zapamatování původních odpovědí a ještě nedošlo ke změně zkoumané vlastnosti (zdravotního stavu). Mírou reliability je pak korelační koeficient. Při jednorázové distribuci dotazníku lze vyšetřovat vnitřní konzistenci, kdy se hodnotí stejnoměrný vztah dílčích otázek ke skóru dimenze. Je nutno si uvědomit, že délka testu zpravidla zvyšuje reliability. Základním ukazatelem je Cronbachovo alpha (Cronbach, 1951), které lze vyjádřit jako $\alpha = \frac{k\overline{cov}/\overline{var}}{1+(k-1)\overline{cov}/\overline{var}}$, kde \overline{cov} je průměrná kovariance mezi k otázkami zkoumané dimenze a \overline{var} je jejich průměrný rozptyl. Koeficient vychází z úvahy, že položky v rámci jedné dimenze mají do určité míry stejný předmět, zabývají se stejnou entitou, a průměrná korelace stanovuje do jaké míry jde o stejný předmět. Je možno jej interpretovat jako korelaci mezi pozorovaným skórem dimenze a kterýmkoli jiným testem, který by obsahoval stejný počet otázek z hypotetického souboru všech možných otázek vázaných k dané dimenzi. Podobné úvahy vedou

k hodnocení reliability pomocí Pearsonova korelačního koeficientu mezi jednotlivou položkou a skórem příslušné dimenze spočteným po jejím vypuštění ze zbývajících položek (item-scale correlation). Na základě tzv. "split-half" metody se celý dotazník ve všech dimenzích rozdělí do dvou částí (např. na sudé a liché otázky) a jako odhad vnitřní konzistence se počítá korelace mezi těmito dvěma částmi pomocí tzv. Spearmanova-Brownova vzorce (Lord, Novick, 1968). Nevýhodou je, že metoda silně závisí na způsobu rozdělení dotazníku.

4. ŠKÁLOVÁNÍ ODPOVĚDÍ

Je nezbytné, aby jednotlivé testy a dotazníky měly nejen standardizovaný obsah (Jones, 1997), ale i proces ohodnocení odpovědí, protože jedině tak jsou výsledky interpretovatelné a porovnatelné navzájem mezi studii. Jakékoli změny obsahu či vyhodnocování mohou snadno přivodit vychýlení skóre (bias) a ovlivnit validitu i reliabilitu.

Pro kódování odpovědí se většinou používají přirozená čísla 1,2,3,... . Ta mohou sloužit i jako skóry pro zpracování, pokud je realistický předpoklad lineárního vztahu mezi skóry a jim odpovídajícími kategoriemi zdravotních problémů. Pak se lze na použitou stupnici dívat nejen jako na pořadovou (ordinální), ale i jako na intervalovou (která má stanovenou míru vzdálenosti mezi pozicemi na stupnici). Opačný případ vede k neekvidistantním ohodnocením (vlastně k vážení odpovědí) a skóry jsou odvozovány empiricky na základě nějakého zkušební vzorku pacientů pomocí různých analytických metod, např. faktorové analýzy či regrese (Olschewski, Schumacher, 1990), distanční analýzy a někdy bohužel i dosti libovolně bez racionálního podkladu. Někteří autoři doporučují přihlížet při užití čistě matematických metod i ke klinickému posouzení.

Význam přidělování skóre je naprosto zásadní. Jejich rozsah by neměl být extrémní, protože jinak může dojít k nežádoucímu potlačení či upřednostnění některých stavů a tím i k mimořádným závěrům. Je zřejmé, že různými postupy se ani zdaleka nedospěje k totožným vahám. Cox a spol. (1992) ze statistických pozic složitější metody vážení kritizují a dávají přednost prostým celočíselným skórum, případně doporučují vycházet z diskriminační analýzy, normálních skóre (pro odpovědi přibližně symetricky rozložené kolem centrální hodnoty), exponenciálních skóre (pro odpovědi koncentrované na jednom konci). Někteří autoři volí mírný odklon od celočíselných skóre ke skórum typu 1, 2.1, 2.9, 4.3, atd.

5. STATISTICKÉ OTÁZKY PŘI MĚŘENÍ KVALITY ŽIVOTA

Při řešení studií o kvalitě života je nutno preferovat statistické postupy, které jsou schopny vzít v úvahu mnohorozměrnou ordinální povahu dat, strukturu jejich závislosti v čase (sousední měření téhož pacienta, zejména když jsou nepřilíš časově vzdálená, jsou nepochybně kladně korelovaná) a poměrně častý výskyt chybějících pozorování (cenzorování).

Kdybychom se snažili posuzovat rozdíly mezi skupinami pacientů, či vývoj v čase pro každou z mnoha otázek dotazníku separátně, byly by výsledky dosti nepřehledné, ale hlavně by došlo k výraznému posunu hladiny významnosti v důsledku mnohonásobného srovnávání a metodologické problémy zůstávají i při použití korekcí typu Bonferroniho nerovnosti (Miller, 1981). Vhodný kompromis, při němž je omezen počet testovaných hypotéz a zjištěná informace kondenzována, ale zároveň zachována ve své mnohorozměrnosti, představují skóry pro jednotlivé dimenze, případně doplněné celkovým skórem ze všech otázek. Ty lze i snáze interpretovat. Celkový ukazatel

však pozbývá smyslu, pokud dochází k interakci mezi léčbou a dimenzemi, tj. pokud s pozitivní změnou v jedné dimenzi přichází negativní změna v jiné. Celkové skóre pak mnohdy není schopno zachytit jakýkoli efekt léčby. Vzhledem k tomu, že jednotlivé položky dimenze mají zhruba stejný vztah k měřenému aspektu zdravotního stavu a že žádná z položek není využita ve více než jedné dimenzi, doporučuje se vytvořit skóre dimenze jako nevážený součet či průměr skóru odpovědí a vyjádřit jej procentuálně jako podíl maximálního možného hodnocení.

Jako hlavní statistický nástroj pak často slouží (mnohorozměrná) analýza rozptylu (resp. analýza kovariance) s opakovanými měřeními, pokud u skóru dimenzí můžeme předpokládat normální rozložení, a zobecněné lineární modely v ostatních situacích (Agresti, 1989), mj. při specifikaci korelační struktury (Liang, Zeger, 1986). Flexibilní je hierarchický model s náhodnými koeficienty, který popisují Beacon a Thompson (1996). Složitější přístup, který vychází z teorie položkové analýzy, dokáže lépe zohlednit strukturu daného dotazníku, ordinální povahu proměnných a psychometrické požadavky uplatněné při tvorbě dotazníku (Douglas, 1999).

Chybějící pozorování a ztráta pacientů ze sledování (včetně neochoty či neschopnosti k další spolupráci) představují značný problém zejména proto, že mechanismus chybění často souvisí se stavem pacienta. Moderní statistická literatura rozlišuje tři hlavní mechanismy vzniku chybějících pozorování (Rubin, 1986). Údaj chybí "zcela náhodně", pokud pravděpodobnost, že k výpadku dojde, nezávisí na žádném jiném údaji, který byl nebo bude zaznamenán (např. nemocný přehlédl otázku, ošetřující sestra se na ni zapomněla zeptat). Údaj chybí "náhodně", pokud pravděpodobnost výpadku souvisí s předem známými doprovodnými údaji (věk, pohlaví) nebo závisí na dříve zjištěných skórech, ale nemá vztah k současným ani k budoucím (např. odpovědi chybí převážně u příslušníků jednoho etnika, či spíše neodpovídají pacienti, kteří měli při minulém stanovení horší HRQoL). Matematicky nejsložitější situace nastává, když data chybí "nenáhodně" a pravděpodobnost chybění může záviset nejen na dřívějších (známých) zjištěních, ale i na současných a budoucích (neznámých) skórech (např. kvalita života konkrétního pacienta je víceméně konstantní v průběhu všech dosud zaznamenaných měření, ale odmítnutí spolupráce přichází v okamžiku, kdy se HRQoL výrazně zhoršuje, takže proces zhoršování není v datech zachycen). Nenáhodné chybění může ale zároveň být z lékařského hlediska dobrým prognostickým faktorem závažné zdravotní události včetně úmrtí. Jedině v případě zcela náhodného chybění není zásadní chybou omezit zpracování jen na jedince s úplnými daty, jindy by tak snadno mohlo dojít třeba k podcenění vedlejších efektů nového léku, protože nezískáme údaje právě od probandů, kteří mají největší problémy.

Pro ošetření chybějících dat o kvalitě života bylo aplikováno a nově vyvinuto mnoho metod. Této tématice (v kontextu klinických pokusů při léčbě karcinomů) je např. věnováno celé trojčíslo časopisu *Statistics in Medicine* (Vol. 17, No. 5/6/7). Pokud u daného jedince v daném čase chybí jen některé údaje, je někdy možno je nahradit průměrným skórem z příbuzných otázek (zpravidla v rámci jedné dimenze). Troxel a spol. (1998) systematicky zpracovali situace, kdy pro určitý čas chybí celý dotazník. Shrnují řešení pro data chybějící zcela náhodně či náhodně v kontextu lineárního modelu se smíšenými efekty, zobecněného lineárního modelu a modelu GEE (generalized estimating equations - zobecněné rovnice odhadu; Zeger a spol., 1988). Nevychýlené odhady pro spojitá data s nenáhodným mechanismem chybění lze získat v modelu sdruženého rozložení kompletního datového vektoru a indikátoru chybění (Diggle, Kenward, 1994).

Alternativu k dosud uvedeným modelům představuje analýza opakovaných měření pomocí dvou typů tzv. sumárních měř (Senn a spol., 2000). V prvním případě probíhá primárně redukce dat odděleně pro každého jedince. Sumární ukazatel $S_{ik} = \sum_{j=1}^n w_j f(Y_{ijk})$ vznikne jako vážený součet n měření Y_{ijk} i -tého jedince v k -té skupině, transformovaných vhodnou funkcí f (Fairclough, 1997). Index j může probíhat buď časové okamžiky nebo jednotlivé dimenze. O'Brien (1984) navrhl neparametrický (f jsou pořadí a váhy $w_j = 1/n$) i parametrický (f jsou standardizované normální odchylky) test tohoto typu. Přístup Coxe a spol. (1992) vychází ze sumární míry představované plochou pod křivkou průběhu HRQoL v čase. Jindy lze za f zvolit rozdíl prvního a posledního pozorování jedince, průměr všech pozorování, atp. Při druhém přístupu k sumárním měřám se nejprve získají odhady mnohorozměrných parametrů odděleně pro každý z n časů či dimenzí a posléze pro každou skupinu jedinců sumární ukazatel $S_k = \sum_{j=1}^n w_j g(\beta_{kj})$, kde $g(\beta_{kj})$ jsou odhady průměru j -tého měření v k -té skupině, které jsou adjustované vzhledem k důležitým kovariantám (Fairclough, 1997).

Olschewski, Schumacher (1990) diskutují modelování kvality života vhodnými stochastickými procesy, vycházejícími z popisu průběhu nemoci několika stavy (se smrtí jako trvalým, absorbujícím stavem). Pravděpodobnosti přechodu mezi stavy lze dobře odhadovat, pokud je reálný předpoklad, že proces kvality života splňuje Markovskou vlastnost. Většinou je třeba pracovat s nehomogenním Markovským řetězcem, neboť pravděpodobnosti přechodu mezi stavy se mohou měnit v čase. Pokud je místo výpočtu pravděpodobností přechodu cílem srovnání skupin, lze propojit HRQoL s analýzou přežívání a vycházet z modelu proporciálního rizika, v němž jsou efekty ošetření zařazeny jako kovarianty (Kay, 1982).

6. KVALITA ŽIVOTA A ANALÝZA PŘEŽÍVÁNÍ

Komplexnější obraz života jedince s ohledem na jeho zdravotní stav a klady a záporů terapie poskytuje souběžné hodnocení kvality života s jeho "kvantitou", tj. délkou přežívání. Zároveň je tento přístup využíván k měření efektivity zdravotnických nákladů metodou cena-prospěch (cost-utility) (Drummond, 1991; Žáček, Holčík, 1992). Pro tyto účely byly vyvinuty jednodimensionální míry kvality života, tzv. indexy či "profily", které se pohybují v rozmezí od 1 (plné zdraví, maximální kvalita života) až po 0 (smrt) a které lze v závislosti na čase zobrazit tzv. Carlensovým vitagramem (Olschewski, Schumacher, 1990). Plocha pod touto křivkou byla použita jako vhodná sumární míra v původní definici tzv. kvalitativně upravených roků života QALY (quality-adjusted life years). Koncepte QALY vychází z myšlenky, že určitá doba optimálního zdraví má vyšší hodnotu než stejná doba života nižší kvality (Torrance, 1986). Jeden rok plného zdraví tak odpovídá dvěma rokům s indexem 0.5, což koresponduje s tím, že někdo může dávat přednost kratšímu bezproblémovému životu před delším s výraznými omezeními. Etické otázky, zvláště v souvislosti s ekonomickým využitím této charakteristiky jsou nasnadě. Ze statistického pohledu je kritizována přílišná redukce jevu, který je charakterizován vysokou interpersonální variabilitou, na jedinou hodnotu, která navíc vychází z nedostatečně přesných měření (úmrtnost, průměrných nákladů). Cox a spol. (1992) upozorňují na úskalí vznikající, když určitá léčba má protichůdné účinky z pohledu kvality života a přežívání. Pak míry těchto dvou fenoménů jednoznačně nesmí být kombinovány do jediného indexu.

Zásadní problémy se objevují, pokud v průběhu sledování dochází k cenzorování (Cox a spol., 1992). Jakou kvalitu života máme přiřadit neznámému úseku života pacienta? Jeden z přístupů, označený jako Q-TWiST (Time Without Symptoms and

Toxicity), definuje sérii úrovní zdravotního stavu, vypočte průměrný čas strávený v každé úrovni na základě "po částech" provedené analýzy přežívání a při výpočtu finální míry typu QALY váží každou úroveň odpovídající kvalitou života (Gelber a spol., 1995). Pro případy, kdy jsou přechody mezi úrovněmi stavu nezřetelné či kdy stavy adekvátně nekorespondují s výkyvy v kvalitě života navrhli alternativní postup Glasziou a spol. (1998). Metoda je založena na separaci přežívací křivky, odhadnuté standardní Kaplan-Meierovou metodou, a tzv. funkce kvality života, odvozené z opakovaných individuálních stanovení kvality života. Ribauda a spol. (2000) navrhli sdruženou analýzu kvality života a přežívání v trojrozměrném normálním modelu.

LITERATURA

- [1] Agresti, A. (1989). A survey of models for repeated ordered categorical response data. *Stat. Med.* 8, 1209-1224.
- [2] Beacon, H.J., Thompson, S.G. (1996). Multi-level models for repeated measurement data: application to quality of life data in clinical trials. *Stat. Med.* 15, 2717-2732.
- [3] Bowling, A. (1996). *Measuring Disease: A Review of Disease-specific Quality of Life Measurement Scales*. Open University Press, Buckingham.
- [4] Bowling, A. (1997). *Measuring Health: A Review of Quality of Life Measurement Scales*, 2nd ed. Open University Press, Buckingham.
- [5] Campbell, D.T., Fiske, D.W. (1959). Convergent and discriminant validation by the multitrait-multimethod matrix. *Psych. Bull.* 56, 81-105.
- [6] Cox, D.R., Fitzpatrick, R., Fletcher, A.E., Gore, S.M., Spiegelhalter, D.J., Jones, D.R. (1992). Quality-of-life assessment: Can we keep it simple? With discussion. *J. R. Statist. Soc. A* 155, 353-393.
- [7] Cronbach, L.J. (1951). Coefficient alpha and the internal structure. *Psychometrika* 16, 297-334.
- [8] Diggle, P., Kenward, M. (1994). Informative drop-out in longitudinal analysis (with discussion). *Appl. Stat.* 43, 49-93.
- [9] Douglas, J.A. (1999). Item response models for longitudinal quality of life data in clinical trials. *Stat. Med.* 18, 2917-2931.
- [10] Donner, C.F., Carone, M., Bertolotti, G., Zotti, A.M. (1997). Methods of assessment of quality of life. *Eur. Respir. Rev.* 7, 43-45.
- [11] Drummond, M. (1991). Economic studies. In: Holland, W.W., Detels, R., Knox, G., (eds.). *Oxford Textbook of Public Health, Vol. 2: Methods of Public Health*, 295-307. Oxford University Press, Oxford.
- [12] Fairclough, D. (1997). Summary measures and statistics for comparison of quality of life in a clinical trial of cancer therapy. *Stat. Med.* 16, 1197-1209.
- [13] Fallowfield, L. (1990). *The quality of life*. Souvenir, London.
- [14] Flanagan, J.C. (1982). Measurement of quality of life. *Arch. Phys. Med. Rehabil.* 63, 56-59.
- [15] Gelber, R.D., Cole, B.F., Gelber, S., Goldhirsch, A. (1995). Comparing treatments using quality-adjusted survival: the Q-TWiST method. *Am. Statist.* 49, 161-169.
- [16] Glasziou, P.P., Cole, B.F., Gelber, R.D., Hilden, J., Simes, R.J. (1998). Quality adjusted survival analysis with repeated quality of life measures. *Statistics in Medicine* 17, 1215-1229.
- [17] Jaeschke, R., Singer, J., Guyatt, G.H. (1989). Measurement of health status: ascertaining the minimal clinically important difference. *Controlled Clin. Trials* 10, 407-415.
- [18] Jones, P. W. (1997). Quality of life measurement: the value of standardisation. *Eur. Respir. Rev.* 7, 46-49.
- [19] Juniper, E.F., Guyatt, G.H., Willan, A., Griffith, L.E. (1994). Determining a minimal important change in a disease-specific quality of life questionnaire. *J. Clin. Epidemiol.* 47, 81-87.
- [20] Juniper, E.F., Guyatt, G.H., Streiner, D.L., King, D.R. (1997). Clinical impact versus factor analysis for quality of life questionnaire construction. *J. Clin. Epidemiol.* 50, 233-238.
- [21] Kaplan, R.M., Bush, J.W. (1982). Health-related quality of life measurement for evaluation research and policy analysis. *Health Psychol.* 1, 61-80.
- [22] Kay, R. (1982). The analysis of transition times in multistate stochastic processes using proportional hazards regression models. *Comm. in Stat. - Theory and Methods* 11, 1743-1756.

- [23] van Knippenberg, F.C.E., de Haes, J.C.J.M. (1988). Measuring quality of life of cancer patients: psychometric properties of instruments. *J. Clin. Epidem.* 41, 1043-1055.
- [24] Last, J.M., ed. (1995). *A dictionary of epidemiology*. 3rd ed. Oxford University Press, New York.
- [25] Liang, K., Zeger, S.L. (1986). Longitudinal data analysis using generalised linear models. *Biometrics* 73, 45-51.
- [26] Lord, F.M., Novick, M.R. (1968). *Statistical Theories of Mental Tests*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts.
- [27] McDowell, I., Newell, C. (1987). *Measuring health: a guide to rating scales and questionnaires*. Oxford University Press, Oxford.
- [28] Miller, R.G., Jr. (1981). *Simultaneous statistical inference*. 2nd ed. Springer-Verlag, New York.
- [29] Nunnally, J.C., Bernstein, I.H. (1994). *Psychometric Theory*. 3rd edn. McGraw-Hill, New York.
- [30] O'Brien, P.C. (1984). Procedures for comparing samples with multiple endpoints. *Biometrics* 40, 1079-1087.
- [31] Olschewski, M., Schumacher, M. (1990). Statistical analysis of quality of life data in cancer clinical trials. *Stat. in Med.* 9, 749-763.
- [32] Ribaldo, H.J., Thompson, S.G., Allen-Mersh, T.G. (2000). A joint analysis of quality of life and survival using a random effect selection model. *Statistics in Medicine* 19, 3237-3250.
- [33] Rubin, D.B. (1976). Inference and missing data. *Biometrika* 63, 581-592.
- [34] Řehák, J. (1998). Kvalita dat I. Klasický model měření reliability a jeho praktický aplikační význam. *Sociologický časopis* 34 (1), 51-60.
- [35] Říčan, P. (1977). *Úvod do psychometrie*. Skripta, Psychodiagnostické a didaktické testy, Bratislava.
- [36] Schumacher, M., Olschewski, M., Schulgen, G. (1991). Assessment of quality of life in clinical trials. *Stat. Med.* 10, 1915 - 1930.
- [37] Skalská, H., Sobotík, Z., Jezberová, D., Mareš, J. (2000). Use and evaluation of the Czech version of the SF-36 questionnaire self-reported health status of medical students. *Centr. Eur. J. Publ. Health* 8, 88-93.
- [38] Spilker, B., ed. (1996). *Quality of life and pharmacoeconomics in clinical trials*, 2nd ed. Lippincott-Raven Publishers, Philadelphia.
- [39] Streiner, D.L., Norman, G.R. (1995). *Health Measurement Scales*. Oxford University Press, Oxford.
- [40] Torrance, G.W. (1986). Measurement of health state utilities for economic appraisal: A review. *J. Health Econ.* 5, 1-30.
- [41] Troxel, A.B., Fairclough, D.L., Curran, D., Hahn, E.A. (1998). Statistical analysis of quality of life missing data in cancer clinical trials.
- [42] Vondra, V., Malý, M., Reisová, M. (1999). Kvalita života nemocných s chronickou obstrukční plicní nemocí, bronchiálním astmatem a s alergickou rýmou. *Respirace* 5 (3), 2-13.
- [43] Ware, J.E., Sherbourne, C.D. (1992). The MOS 36-item short-form health survey (SF-36): I. Conceptual framework and item selection. *Med. Care* 30, 473-483.
- [44] Zeger, S.L., Liang, K.Y., Albert, P.S. (1988). Models for longitudinal data: A generalized estimating equation approach. *Biometrics* 44, 1049-1060.
- [45] Žáček, A., Holčík, J. (1992). *Sociální lékařství II*. Skripta, Masarykova univerzita, Brno.

O ODHADU PARAMETRŮ V JEDNODUCHÉM NELINEÁRNÍM MODELU KLOUZAVÝCH SOUČTŮ

TOMÁŠ MAREK

ABSTRAKT. The paper is concerned with a parameter estimation in the simple non-linear moving average time series model given by $X_t = \varepsilon_t + \alpha\varepsilon_{t-1} + \beta\varepsilon_t\varepsilon_{t-1}$. The model mentioned in Tong (1990) is a stochastic perturbation of the linear MA(1) model, where the constant coefficient α is substituted by a random one $\alpha + \beta\varepsilon_t$. Moment and maximum likelihood estimators are presented.

Абстракт. В этой статье мы занимаемся оценкой параметров в случае простой нелинейной модели скользящего среднего. Исследованный процесс имеет вид $X_t = \varepsilon_t + \alpha\varepsilon_{t-1} + \beta\varepsilon_t\varepsilon_{t-1}$, он упомянутый в книге Тонга (1990) и имеет форму стохастической пертурбации линейного процесса скользящего среднего, где находится вместо коэффициента α случайная переменная $\alpha + \beta\varepsilon_t$. Мы исследуем методы использующие моменты и функцию правдоподобия.

1. ÚVOD

Nelineární modely klouzavých součtů jsou velmi obecnou třídou náhodných procesů, které jsou definovány nějakou nelineární transformací bílého šumu. V tomto článku se budeme zabývat speciálním modelem daným vzorcem

$$X_t = \varepsilon_t + \alpha\varepsilon_{t-1} + \beta\varepsilon_t\varepsilon_{t-1},$$

kde ε_t je posloupnost nezávislých stejně rozdělených náhodných veličin s nulovou střední hodnotou a konečným rozptylem σ^2 , parametry α, β jsou z intervalu $(0; 1)$. Námi zkoumaný model ve srovnání s dobře známým lineárním modelem MA(1) obsahuje navíc ještě součin posledních dvou hodnot bílého šumu. Tento součin je také příčinou některých zajímavých vlastností náhodného procesu, které zmiňuje Tong (1990). Patří mezi ně například schopnost produkovat náhle velké hodnoty X_t , stejně jako například některá hydrologická data. V dalších částech na základě pozorovaných hodnot X_t odhadneme parametry α a β a to momentovou metodou a metodou maximální věrohodnosti. Část věnovaná metodě maximální věrohodnosti navazuje na publikaci uvedenou ve sborníku WDS'99 - viz. Marek(1999). Na závěr pak zmíníme některé výhody a nedostatky obou metod.

2. MOMENTOVÉ ODHADY

Předpokládejme v této části, že bílý šum ε_t má konečné momenty aspoň čtvrtého řádu. Za této podmínky označme

$$\begin{aligned} a &= \mathbf{E} X_t^2 = (1 + \alpha^2)\sigma^2 + \beta^2\sigma^4, \\ b &= \mathbf{E} X_t X_{t-1} = \alpha\sigma^2, \\ c &= \mathbf{E} X_t X_{t-1} X_{t-2} = \alpha\beta\sigma^4. \end{aligned}$$

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62M10.

Klíčová slova. Nelineární model klouzavých součtů.

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 201/00/0770 a VZ MŠMT MSM 113200008.

Snadno ověříme, že $c/b = \beta\sigma^2$ a $a - (c/b)^2 = (1 + \alpha^2)\sigma^2$, z čehož vyplývá, že α je jedním z kořenů rovnice

$$x^2 - \left(\frac{a}{b} - \frac{c^2}{b^3}\right)x + 1 = 0.$$

Při známém α je pak

$$\sigma^2 = \frac{b}{\alpha} \quad \text{a} \quad \beta = \frac{c}{\alpha\sigma^4}.$$

Výše zmíněná úvaha vede k následující konstrukci momentových odhadů neznámých parametrů. Označme

$$\begin{aligned}\hat{a}_N &= \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N X_t^2, \\ \hat{b}_N &= \frac{1}{N} \sum_{t=2}^N X_t X_{t-1}, \\ \hat{c}_N &= \frac{1}{N} \sum_{t=3}^N X_t X_{t-1} X_{t-2}.\end{aligned}$$

Budiž dále $\hat{\alpha}_N$ kořen rovnice

$$x^2 - \left(\frac{\hat{a}_N}{\hat{b}_N} - \frac{\hat{c}_N^2}{\hat{b}_N^3}\right)x + 1 = 0,$$

který padne do intervalu $(-1;1)$, a

$$\hat{\sigma}_N^2 = \frac{\hat{b}_N}{\hat{\alpha}_N} \quad \text{a} \quad \hat{\beta} = \frac{\hat{c}_N}{\hat{\alpha}_N \hat{\sigma}_N^4}.$$

Tuto metodu navrhl Robinson (1977), který rovněž dokázal konsistenci a asymptotickou normalitu takto definovaných odhadů. Následující tabulka udává průměrné hodnoty a směrodatné odchylky zkoumaných odhadů získané ze 100 simulací pro každou délku časové řady a uvedené hodnoty parametrů, za předpokladu, že veličiny ε_t mají rovnoměrné rozdělení na intervalu $(-1;1)$.

N	$\alpha = 0.3$		$\beta = 0.1$		$\sigma^2 = 1/3$	
	průměr	sm. odch.	průměr	sm. odch.	průměr	sm. odch.
100	0.338	0.210	0.053	1.554	0.269	1.062
500	0.319	0.062	0.110	0.481	0.314	0.030
1 000	0.310	0.043	0.104	0.277	0.326	0.013
5 000	0.303	0.018	0.082	0.107	0.332	0.005
10 000	0.299	0.013	0.097	0.090	0.332	0.004

3. ODHADY METODOU MAXIMÁLNÍ VĚROHODNOSTI

Předpokládejme nyní, že bílý šum ε_t má nějakou známou hustotu g . Z nezávislosti veličin ε_t tak známe sdruženou hustotu vektoru $\mathbf{e}_N = (\varepsilon_0, \dots, \varepsilon_N)^T$, která má tvar

$$g_N(t_0, \dots, t_N) = \prod_{i=0}^N g(t_i).$$

Označme h zobrazení, jež převádí vektor \mathbf{e}_N na vektor $\mathbf{Z}_N = (\varepsilon_0, X_1, \dots, X_N)^T$ a $Jac(h)$ budiž jeho jakobián. Snadno zjistíme, že

$$Jac(h) = \prod_{i=0}^{N-1} (1 + \beta\varepsilon_i)$$

a zobrazení je tedy skoro jistě regulární kdykoliv je $P(\varepsilon_t = -1/\beta) = 0$. Užitím věty o transformaci tak lze najít sdruženou hustotu \mathbf{Z}_N , která obecně bude tvaru $|Jac(h)|^{-1}g_N(h^{-1}(\mathbf{Z}_N))$. Zobrazení h^{-1} je určeno rekurentním vztahem

$$\varepsilon_t = \frac{X_t - \alpha\varepsilon_{t-1}}{1 + \beta\varepsilon_{t-1}}, \quad 1 \leq t \leq N.$$

Je zřejmé, že pro rostoucí N je explicitní předpis pro h a tudíž i pro sdruženou hustotu \mathbf{Z}_N stále složitější, což do značné míry komplikuje výpočet marginální hustoty f_N vektoru pozorování $\mathbf{X}_N = (X_1, \dots, X_N)^T$, neboť ta je dána integrálem

$$f_N(\mathbf{x}_N) = \int_{-\infty}^{\infty} |Jac(h)|^{-1}g_N(t, \mathbf{x}_N)dt.$$

Vynecháme-li nyní pozorování X_k, X_{2k}, \dots pro $k \geq 2$, zbývající veličiny tvoří vzájemně nezávislé podvektory $\mathbf{X}_j^{(k)} = (X_{1+jk}, \dots, X_{k-1+jk})^T$, $j \geq 1$, s hustotou f_{k-1} . Při některých rozděleních bílého šumu tak můžeme získat explicitní vzorec pro věrohodnostní funkci vektoru zbývajících pozorování, která má tvar

$$l_k(\mathbf{X}_N, \alpha, \beta) = \sum_{j \geq 1} \log \left[f_{k-1}(\mathbf{X}_j^{(k)}) \right].$$

Jak ukáže i následující příklad, je maximalizace věrohodnostní funkce l_k možná pouze numericky přes určitou předem zvolenou síť bodů.

Příklad:

Nejjednodušší příklady pro $k = 2$ uvádí Marek(1999). Zabývejme se nyní proto poněkud složitější situací, jež nastává, jestliže $k = 3$. Nechť $\varepsilon_t \sim R(-1; 1)$. Odvodme sdruženou hustotu podvektoru $(X_t, X_{t-1})^T$. Užijeme zobrazení

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_t \\ \varepsilon_{t-1} \\ \varepsilon_{t-2} \end{pmatrix} \xrightarrow{h'} \begin{pmatrix} X_t \\ X_{t-1} \\ \varepsilon_{t-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}.$$

Jakobián transformace je roven

$$Jac(h') = \begin{vmatrix} 1 + \beta v & \alpha + \beta u & 0 \\ 0 & 1 + \beta w & \alpha + \beta v \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = -(1 + \beta v)(\alpha + \beta v).$$

Pro zjednodušení budeme předpokládat, že čísla $-\frac{1}{\beta}$ a $-\frac{\alpha}{\beta}$ leží mimo interval $(-1; 1)$. Inverzní zobrazení je dáno předpisem

$$\begin{aligned} u &= \frac{x - \alpha z}{1 + \beta z}, \\ v &= z, \\ w &= \frac{y - z}{\alpha + \beta z}. \end{aligned}$$

Označme χ_A indikátor množiny

$$A = \left\{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : \left| \frac{x - \alpha z}{1 + \beta z} \right| < 1 \quad \& \quad |z| < 1 \quad \& \quad \left| \frac{y - z}{\alpha + \beta z} \right| < 1 \right\}.$$

Podle věty o transformaci tedy sdruženou hustotu vektoru $(X, Y, Z)^T$ můžeme zapsat ve tvaru

$$g(x, y, z) = \frac{\chi_A}{8(1 + \beta z)(\alpha + \beta z)}.$$

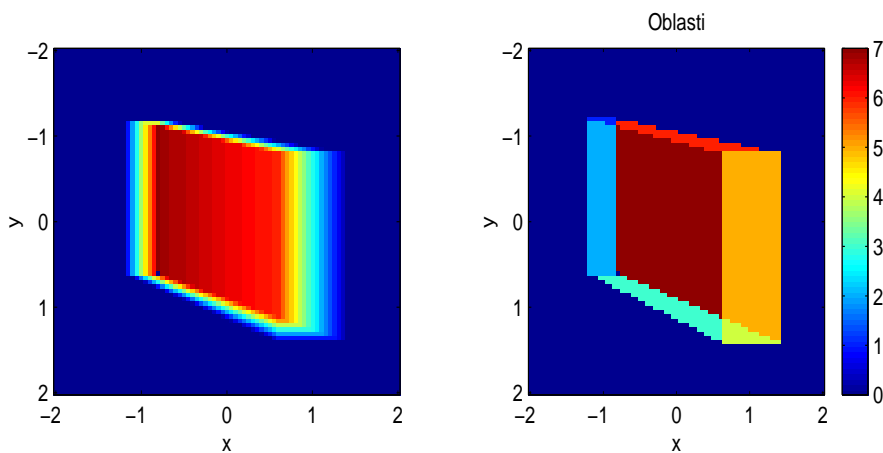
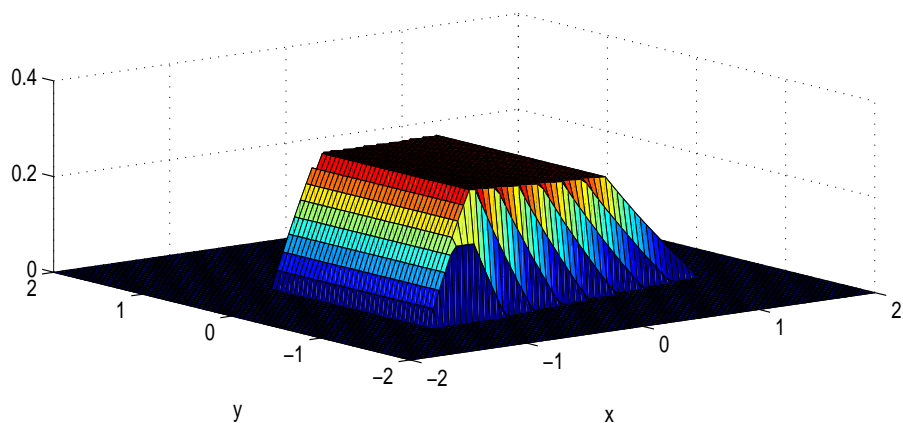
Hledanou hustotu vektoru $(X, Y)^T$ vypočteme vyintegrováním proměnné z

$$\begin{aligned} f_2(x, y) &= \frac{1}{8} \int_{s_1}^{s_2} \frac{1}{(1 + \beta z)(\alpha + \beta z)} dz \\ &= \frac{1}{8(1 - \alpha)} \int_{s_1}^{s_2} \left(\frac{1}{\alpha + \beta z} - \frac{1}{1 + \beta z} \right) dz \\ &= \frac{1}{8\beta(1 - \alpha)} \log \frac{(1 + \beta s_1)(\alpha + \beta s_2)}{(1 + \beta s_2)(\alpha + \beta s_1)}. \end{aligned}$$

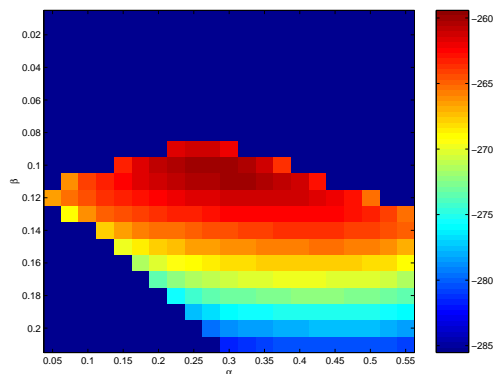
Integrační meze s_1, s_2 určíme jako

$$s_1 = \max \left\{ -1; \frac{x - 1}{\alpha + \beta 1}; \frac{y - \alpha 1}{1 + \beta 1} \right\}, \quad s_2 = \min \left\{ 1; \frac{x + 1}{\alpha - \beta 1}; \frac{y + \alpha 1}{1 - \beta 1} \right\}.$$

Na následujícím obrázku je graf $f_2(x, y)$ a rozdělení roviny podle hodnot s_1, s_2 pro hodnoty parametrů $\alpha = 0.3$ a $\beta = 0.1$.



Další obrázek ukazuje věrohodnostní funkci l_3 získanou z $N = 500$ pozorování při výše zmíněném rozdělení.



Následující tabulka udává průměrné hodnoty a směrodatné odchylky zkoumaných odhadů získané ze 100 simulací pro každou délku časové řady a stejné hodnoty parametrů jako v části věnované momentovým odhadům. Veličiny ε_t mají i tentokrát rovnoměrné rozdělení na intervalu $(-1;1)$. Při maximalizaci byla použita síť bodů (α, β) s krokem 0.001 v α a 0.0005 v β .

N	$\alpha = 0.3$		$\beta = 0.1$	
	průměr	sm. odch.	průměr	sm. odch.
10	0.285	0.279	0.215	0.256
20	0.300	0.211	0.217	0.205
50	0.270	0.118	0.137	0.121
100	0.263	0.073	0.116	0.077
200	0.276	0.045	0.106	0.046
500	0.294	0.020	0.103	0.024

4. ZÁVĚR

Z obou zmíněných metod odhadu neznámých parametrů zkoumaného modelu je momentová metoda méně náročná na výpočetní čas, její nevýhodou je pomalejší konvergence. Metoda založená na maximální věrohodnosti konverguje rychleji, při některých rozděleních bílého šumu však nejsme schopni najít explicitní vyjádření hustoty vektoru $\mathbf{X}_j^{(k)}$ a numerická integrace značně zvyšuje nároky na výpočetní čas.

5. LITERATURA

Marek T. (1999): Maximum likelihood estimation in the simple NLMA model. *WDS'99 Proceedings of contributed papers - Part I.*, (ed. J. Šafránková), pp. 28–33. Matfyzpress Praha. Praha 1999.

Robinson P. M. (1977): The estimation of a nonlinear moving average models. *Stochastic processes Appl.* **5**, 81–90.

Tong H. (1990): Nonlinear Time Series. Clarendon Press, Oxford.

DVĚ POZNÁMKY O METODĚ KRIGING

JAROSLAV MICHÁLEK

ABSTRAKT. Kriging techniques are frequently used for the evaluation of continuous spatial processes. When the covariance structure of a considered spatial process is not known then it is necessary to estimate it from the data. Thus the first part of the article is devoted to the estimate of a variogram function which describes the covariance structure of the considered spatial process. In the second part of the article a problem is considered how some additional information about the observed spatial process can be incorporated into the statistical model. Two possibilities are considered. One is the application of Bayesian statistics the other is to use the minimax technique.

Резюме. Статистический метод называемый кригинг (*kriging*) часто употребляется для обработки непрерывных пространственных случайных процессов. Когда ковариационная структура рассматриваемого процесса неизвестна, тогда надо оценить ее из данных. По этому первая часть работы посвящена оценке вариограммы, которая описывает ковариационную структуру рассматриваемого процесса. Во второй части работы исследована проблема как можно какую-нибудь дополнительную информацию о наблюдаемом пространственном процессе включить в статистическую модель. В статье изложены два возможности: применение Байесовской статистики и метод минимакса.

1. ÚVOD

V prostorové statistice (zejména v geologii, meteorologii apod.) je mezi inženýry velmi oblíbená metoda kriging. Její název pochází od Matherona [7], který ji pojmenoval po D.E. Krigeovi, jihoafrickém inženýrovi, který v padesátých letech rozvinul empirické statistické metody v důlním inženýrství. Podstatou této metody je nalezení optimální predikce kovariančně stacionárního náhodného procesu definovaného v dané oblasti vzhledem ke střední kvadratické chybě. Problémem je, že obvykle není známa kovarianční struktura tohoto procesu a je potřeba ji odhadnout z dat. Častá je též situace, že experimentátor má k dispozici jistou informaci o parametrech procesu, které je třeba odhadnout a problém je v nalezení modifikace klasické metody, která by umožnila začlenit tuto dodatečnou informaci do modelu. Právě tyto dva problémy budou v tomto příspěvku diskutovány.

Po úvodním popisu modelu a zavedení odhadů typu "kriging" bude první poznámka (odstavce 5) věnována otázce odhadu kovarianční struktury prostorového procesu, zejména odhadu variogramu. V druhé poznámce (odstavce 6 a 7) pak budou zmíněny vybrané postupy, jak začlenit do modelu předem známou informaci o parametrech. Zejména bude diskutován přístup bayesovský (viz [12,13]) a minimaxový přístup pro hledání odhadů při známé dodatečné informaci o parametrech.

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62C20; Secondary 62M30.

Klíčová slova. Prostorová statistika, kovariogram, variogram, metoda kriging, bayesovské odhady, minimaxové odhady.

Výzkum byl podporován grantem MŠMT MSM 143100001.

2. ZÁKLADNÍ POJMY A OZNAČENÍ

Nejdříve uvedeme označení a základní pojmy, s nimiž budeme dále pracovat. Nechť $Z(\mathbf{s})$ je náhodný proces pozorovaný v jisté oblasti $D \subseteq \mathbb{R}^d$, která má kladný d -rozměrný objem. Tedy $Z(\mathbf{s})$ je pro každý bod $\mathbf{s} \in D$ náhodná veličina definovaná na pravděpodobnostním prostoru (Ω, \mathcal{A}, P) . Předpokládáme, že existuje střední hodnota

$$\mathbf{E}Z(\mathbf{s}) = \mu(\mathbf{s})$$

a kovarianční funkce

$$C(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = \text{cov}(Z(\mathbf{s}_1), Z(\mathbf{s}_2)).$$

Jestliže kovarianční funkce závisí pouze na rozdílu argumentů, tedy když

$$C(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2),$$

říkáme, že proces je kovariančně stacionární a funkci $C(\mathbf{h})$, $\mathbf{h} \in D$, kterou značíme stejným písmenem, jako funkci kovarianční, nazýváme kovariogramem. V případě, když C závisí pouze na délce \mathbf{h} , zjednodušeně zapsáno, když $C(\mathbf{h}) = C(\|\mathbf{h}\|)$, kde $\|\mathbf{h}\|$ značí Euklidovskou normu vektoru \mathbf{h} , budeme říkat, že kovariogram je izotropicky stacionární. V některých situacích je praktičtější pracovat s jinou charakteristikou korelovanosti složek procesu Z , kterou je variogram. Jestliže rozptyl přírůstků procesu $\text{var}(Z(\mathbf{s}_1) - Z(\mathbf{s}_2))$ závisí pouze na rozdílu argumentů, pak funkci

$$2\gamma(\mathbf{h}) = 2\gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) = \text{var}(Z(\mathbf{s}_1) - Z(\mathbf{s}_2)), \quad \mathbf{h} = \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2$$

nazýváme variogramem procesu Z a funkci $\gamma(\mathbf{h})$ semivariogramem procesu Z . Podobně jako v případě kovariogramu nazýváme variogram izotropickým, když $2\gamma(\mathbf{h}) = 2\gamma(\|\mathbf{h}\|)$, kde stejně jako u kovariogramu, užíváme pro označení obou funkcí $\gamma(\mathbf{h})$ a $\gamma(\|\mathbf{h}\|)$ stejné písmeno.

S ohledem na tyto definice je potom zvykem mluvit o stacionaritě druhého řádu procesu Z , když Z má konstantní střední hodnotu a je kovariančně stacionární. V případě, že proces Z má konstantní střední hodnotu a existuje jeho variogram, říkáme, že proces je vnitřně stacionární (*intrinsically stationary*). Lze snadno ukázat, že stacionární proces druhého řádu je vnitřně stacionární, opak však neplatí. Jako příklad může posloužit d -rozměrný Wienerův izotropický proces, jehož semivariogram je

$$\gamma(\mathbf{h}) = \text{var}(W(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - W(\mathbf{s})) = \|\mathbf{h}\|,$$

ale jeho kovariogram je tvaru

$$\text{cov}(W(\mathbf{s}_1), W(\mathbf{s}_2)) = \frac{1}{2}\|\mathbf{s}_1\| + \frac{1}{2}\|\mathbf{s}_2\| - \frac{1}{2}\|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2\|.$$

Proto někteří autoři (viz např. [1]) dávají při popisu korelovanosti procesu Z přednost variogramu před kovariogramem.

3. MODEL

Nejdříve popíšeme model, který je znám pod názvem *univerzální kriging model* (viz [1]). Budeme předpokládat, že proces $Z(\mathbf{s})$ je tvaru

$$Z(\mathbf{s}) = \mu(\mathbf{s}) + \delta(\mathbf{s}), \quad \mathbf{s} \in \mathbf{D}$$

kde $\mu(\mathbf{s})$ je střední hodnotou $Z(\mathbf{s})$ a tedy $\mu(\mathbf{s})$ je deterministická složka Z která popisuje tak zvanou *large-scale* variabilitu procesu Z . Dále předpokládáme, že druhý člen v uvedeném rozkladu, náhodný proces $\delta(\mathbf{s})$ je korelovaný chybový proces a popisuje směs tzv. *smooth-scale* variability dále *mikro-scale* variability a chyb měření. O náhodném procesu $\delta(\mathbf{s})$ budeme dále předpokládat, má nulovou střední hodnotu

a je kovariančně stacionární. Jeho kovariogram označíme $C(\mathbf{h})$ a vyjdeme ze situace, kdy funkce $C(\mathbf{h})$ je známá.

Předpokládejme dále, že střední hodnota $\mu(\mathbf{s})$ procesu Z , je lineární kombinací známých funkcí $f_0(\mathbf{s}), \dots, f_p(\mathbf{s})$, $\mathbf{s} \in D$, přičemž koeficienty této lineární kombinace jsou neznámé parametry β_0, \dots, β_p , které potřebujeme odhadnout. Tedy předpokládáme, že

$$\mu(\mathbf{s}) = \sum_{j=0}^p \beta_j f_j(\mathbf{s}).$$

Je-li proces $Z(\mathbf{s})$ pozorován v n různých bodech $\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_n$ oblasti D , pak cílem metody zvané *univerzální kriging* je nalézt nejlepší lineární prediktor

$$Z^*(\mathbf{s}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{s}_i)$$

procesu $Z(\mathbf{s})$ v bodě $\mathbf{s} = \mathbf{s}_0$ vzhledem ke střední kvadratické ztrátové funkci. To znamená, že hledáme reálná čísla $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, která minimalizují střední kvadratickou chybu

$$(1) \quad MSE(\mathbf{s}_0) = \mathbf{E}(Z^*(\mathbf{s}_0) - Z(\mathbf{s}_0))^2 = \mathbf{E}\left(Z(\mathbf{s}_0) - \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{s}_i)\right)^2$$

predikce Z^* v bodě \mathbf{s}_0 , přičemž požadujeme, aby tento odhad byl nestranný, tedy minimalizujeme (1) za podmínky

$$(2) \quad \mathbf{E}Z^*(\mathbf{s}_0) = \mathbf{E}Z(\mathbf{s}_0)$$

S ohledem na předchozí zavedené označení lze podmínku (2) vyjádřit ve tvaru

$$(3) \quad \mu(\mathbf{s}_0) = \sum_{j=0}^p \beta_j f_j(\mathbf{s}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mu(\mathbf{s}_i) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \sum_{j=0}^p \beta_j f_j(\mathbf{s}_i).$$

Užijeme-li maticové označení

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} f_0(\mathbf{s}_1) & \cdots & f_p(\mathbf{s}_1) \\ \vdots & & \vdots \\ f_0(\mathbf{s}_n) & \cdots & f_p(\mathbf{s}_n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} f_0(\mathbf{s}_0) \\ \vdots \\ f_p(\mathbf{s}_0) \end{pmatrix}, \quad \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}$$

dostaneme (3) v maticovém tvaru

$$(4) \quad \mathbf{x}'\beta = \lambda'\mathbf{X}\beta$$

Z podmínky nestrannosti (2) prediktoru $Z^*(\mathbf{s})$ pak plyne, že (4) platí pro každé $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$ a tedy ze (4) plyne $\mathbf{x} = \mathbf{X}'\lambda$. Když množina $\mathcal{U} = \{\lambda \in \mathbb{R}^n : \mathbf{x} = \mathbf{X}'\lambda\}$ je neprázdná, pak univerzální kriging estimátor Z^* může být nalezen minimalizací střední čtvercové chyby (1) za podmínky, že $\lambda \in \mathcal{U}$.

4. KRIGING ODHADY

V případě, že chybový proces $\delta(\mathbf{s})$ je stacionární druhého řádu, se známým kovariogramem C , je snadné najít kriging estimátor Z^* náhodného procesu Z .

Označme nejdříve $\mathbf{Z} = (Z(\mathbf{s}_1), \dots, Z(\mathbf{s}_n))'$ vektor pozorovaných hodnot procesu Z v bodech $\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_n$ a $\delta = (\delta(\mathbf{s}_1), \dots, \delta(\mathbf{s}_n))'$ odpovídající vektor náhodných chyb. Pak pomocí označení z předchozího odstavce můžeme psát

$$Z(\mathbf{s}_0) = \mu(\mathbf{s}_0) + \delta(\mathbf{s}_0) = \mathbf{x}'\beta + \delta(\mathbf{s}_0)$$

a tedy

$$Z^*(\mathbf{s}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{s}_i) = \lambda' \mathbf{Z} = \lambda' \mathbf{X} \beta + \lambda' \delta.$$

Tudíž pro střední kvadratickou chybu predikce v bodě \mathbf{s}_0 dostaneme vyjádření

$$(5) \quad MSE(\mathbf{s}_0) = \mathbf{E} \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_0) \right)^2 = \mathbf{E} \left((\mathbf{x} - \mathbf{X}' \lambda)' \beta + \delta(\mathbf{s}_0) - \lambda' \delta \right)^2$$

a minimalizace $MSE(\mathbf{s}_0)$ za podmínky $\lambda \in \mathcal{U}$ vede k minimalizaci

$$\mathbf{E}(\delta(\mathbf{s}_0) - \lambda' \delta)^2 = \lambda' \mathbf{C} \lambda - 2\mathbf{c}' \lambda + C(\mathbf{0}),$$

kde

$$\mathbf{C} = var(\delta) = \begin{pmatrix} C(\mathbf{0}) & C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) & \cdots & C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_1) & C(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_2) & \cdots & C(\mathbf{0}) \end{pmatrix}$$

je varianční matice vektoru δ a

$$\mathbf{c} = cov(\delta, \delta(\mathbf{s}_0)) = (C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_0), \dots, C(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_0))'$$

je vektor kovariancí mezi δ a $\delta(\mathbf{s}_0)$.

Je-li matice \mathbf{C} regulární a matice \mathbf{X} je plně sloupcové hodnosti, pak pomocí Lagrangeových multiplikátorů (viz [1]) snadno nahlédneme, že

$$(6) \quad \lambda = \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{c} + \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c}))$$

minimalizuje $MSE(\mathbf{s}_0)$ a tedy $Z^*(\mathbf{s}_0) = \lambda' \mathbf{Z}$, kde λ je dáno rovnicí (6), je universalní kriging estimátor procesu $Z(\mathbf{s}_0)$. Ze vztahu (6) lze snadno získat univerzální kriging estimátor $Z^*(\mathbf{s}_0)$ ve tvaru

$$(7) \quad Z^*(\mathbf{s}_0) = \mathbf{Z}' \lambda = \mathbf{c}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Z} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c})' \hat{\beta}_{GLS}$$

kde $\hat{\beta}_{GLS} = (\mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Z}$ je odhad zobecněnou metodou nejmenších čtverců (GLS-odhad) parametru β . Pro minimální střední kvadratickou chybu predikce (*kriging variance*) pak dostaneme vyjádření

$$\sigma_k^2(\mathbf{s}_0) = \min_{\lambda \in \mathcal{U}} MSE(\mathbf{s}_0) = C(\mathbf{0}) - \mathbf{c}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c})' (\mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c}).$$

V případě, že střední hodnota $\mu(\mathbf{s}) = \mathbf{E}Z(\mathbf{s})$ je známá, pak mluvíme o prosté metodě kriging (*simple kriging*) (viz [8]). V tomto případě je známý vektor β a vzorec (7) pro predikci $Z(\mathbf{s}_0)$ prostou metodou kriging pak lze zapsat ve tvaru

$$Z^*(\mathbf{s}_0) = \mathbf{c}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Z} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c})' \beta.$$

Uvedené odhady lze snadno modifikovat pro případ, že proces δ je vnitřně stacionární. V tom případě místo s kovariogramem pracujeme s variogramem $\gamma(\mathbf{h})$ procesu δ . Označíme-li

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{0}) & \gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) & \cdots & \gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \gamma(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_1) & \gamma(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_2) & \cdots & \gamma(\mathbf{0}) \end{pmatrix}$$

a

$$\gamma = (\gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_0), \dots, \gamma(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_0))',$$

pak za předpokladu, že $f_0(\mathbf{s}) \equiv 1$, (který zaručí, že $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$), lze odvodit (viz [1]), že hledaný váhový vektor λ pro odhad metodou univerzální kriging, je opět tvaru

(6), kde matice \mathbf{C} je nahrazena maticí $\mathbf{\Gamma}$, vektor \mathbf{c} vektorem γ a místo $C(0)$ je 0. Pro kriging varianci pak dostaneme vyjádření

$$\sigma_k^2(\mathbf{s}_0) = \min_{\lambda \in \mathcal{U}} MSE(\mathbf{s}_0) = \gamma' \mathbf{\Gamma}^{-1} \gamma - (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{\Gamma}^{-1} \gamma)' (\mathbf{X}' \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{\Gamma}^{-1} \gamma).$$

5. ODHAD VARIOGRAMU

Při praktických aplikacích metody kriging zůstává hlavním problémem skutečnost, že kovariogram C nebo variogram $2\gamma(\mathbf{h})$ procesu Z je neznámý. Potom nalezení kvalitního odhadu C nebo $2\gamma(\mathbf{h})$ není jednoduchý problém, protože chybový proces δ není přímo pozorovatelný a k odhadu jeho kovariogramu nebo variogramu je zapotřebí užít nějakých specifických rysů uvažovaného modelu. Často se vychází z předpokladu izotropie a skutečnosti, že funkce μ je v nějakém směru konstantní apod.

Protože vnitřně stacionární procesy zahrnují třídu procesů druhého řádu stacionárních, dáme v tomto odstavci při popisu korelovanosti sledovaného procesu Z přednost variogramu před kovariogramem a budeme se věnovat způsobu jeho odhadu za předpokladu, že sledovaný proces je vnitřně stacionární.

Klasický odhad variogramu pochází od Mathorna viz [6] a je dán vztahem

$$2\hat{\gamma}(\mathbf{h}) = \frac{1}{|N(\mathbf{h})|} \sum_{N(\mathbf{h})} (Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_j))^2,$$

kde $N(\mathbf{h}) = \{(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j) : \mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j = \mathbf{h}; i, j = 1, 2, \dots, n\}$ a $|N(\mathbf{h})|$ je počet prvků v množině $N(\mathbf{h})$. Protože uvedený odhad je velmi citlivý na odlehlá pozorování, navrhli Cressie a Hawkins v [2] dvě varianty robustního odhadu variogramu. První je tvaru

$$2\bar{\gamma}(\mathbf{h}) = \left[\frac{1}{|N(\mathbf{h})|} \sum_{N(\mathbf{h})} |Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_j)|^{\frac{1}{2}} \right]^4 / \left(0.457 + \frac{0.494}{|N(\mathbf{h})|} \right).$$

Druhá varianta je založena na mediánu a příslušný odhad má při asymptotické korekci vychýlení tvar

$$2\tilde{\gamma}(\mathbf{h}) = \left[\text{med}\{|Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_j)|^{\frac{1}{2}} : (\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \in N(\mathbf{h})\} \right]^4 / 0.457.$$

Praktické i simulační zkušenosti ukazují, že tyto robustní varianty dávají podstatně kvalitnější odhady, než původní klasický odhad navržený Mathornem. Motivace, které vedly ke konstrukci těchto robustních odhadů nalezne čtenář v [1]. Na dosud uvedené odhady variogramu se dále budeme odvolávat jako na odhady empirické.

Z teoretických analýz vlastností variogramu viz např. [3] plyne, že variogram $2\gamma(\mathbf{h})$ je podmíněně negativně definitní funkcí a tedy musí splňovat nerovnost

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m a_i a_j 2\gamma(\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \leq 0$$

pro každou konečnou množinu bodů $\{\mathbf{s}_i; i = 1, \dots, m\}$ oblasti D a pro libovolná reálná čísla a_1, \dots, a_m , která splňují nerovnost $\sum_{i=1}^m a_i = 0$. Tato vlastnost variogramu odpovídá známé vlastnosti kovariogramu, totiž tomu, že kovariogram musí být pozitivně semidefinitní funkcí. Proto je přirozené, že na odhad variogramu klademe požadavek, aby byl také podmíněně negativně definitní. Potom za předpokladu, že sledovaný proces je izotropický, je možné uvést základní typy modelových variogramů a jim odpovídajících semivariogramů $\gamma(\mathbf{h})$ (viz [1], [4]), které tomuto požadavku vyhovují a zároveň mají při praktických aplikacích nejčastější uplatnění.

Lineární model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + b\|\mathbf{h}\|, & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0$ a $b \geq 0$ jsou parametry.

Sférický model pro $1 \leq d \leq 3$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + c_s \left\{ \frac{3}{2} \frac{\|\mathbf{h}\|}{a_s} - \frac{1}{2} \left(\frac{\|\mathbf{h}\|}{a_s} \right)^3 \right\}, & 0 < \|\mathbf{h}\| \leq a_s, \\ c_0 + c_s, & \|\mathbf{h}\| \geq a_s, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0, c_s \geq 0$ a $a_s \geq 0$ jsou parametry.

Exponenciální model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + c_e \left[1 - \exp \left\{ -\frac{\|\mathbf{h}\|}{a_e} \right\} \right], & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0, c_e \geq 0$ a $a_e \geq 0$ jsou parametry.

Racionální kvadratický model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + \frac{c_r \|\mathbf{h}\|^2}{1 + \frac{\|\mathbf{h}\|^2}{a_r}}, & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0, c_r \geq 0$ a $a_r \geq 0$ jsou parametry.

Mocninný model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + b_m \|\mathbf{h}\|^\lambda, & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0, b_m \geq 0$ a $0 \leq \lambda < 2$ jsou parametry.

Příslušný odhad semivariogramu pak dostaneme proložení některého z vybraných modelů empirickým variogramem vhodnou statistickou procedurou. Často se pro odhad parametrů uvedených teoretických modelů používá nelineární metoda nejmenších čtverců. Jiný postup vychází z postupné volby parametrů modelu a vizuálním porovnáním empirického odhadu s proloženým teoretickým modelem. Oba tyto postupy jsou implementovány v softwareovém balíku S+SpatialStats (viz [5]).

Zajímavý přístup k modelování variogramu je popsán v článku [14]. Vychází se z faktu, že reálná funkce $g(\mathbf{h}), \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d$ je přípustný variogram, je-li spojitá v \mathbb{R}^d s případnou výjimkou počátku, nezáporná, symetrická (tj. $g(\mathbf{h}) = g(-\mathbf{h}), \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d$) a podmíněně negativně definitní. Přičemž vhodnou podmíněně negativně definitní funkci g lze získat z vhodné pozitivně semidefinitní funkce $f(\mathbf{h})$ pomocí vztahu $g(\mathbf{h}) = -f(\mathbf{h}) + c$, kde c je vhodná konstanta. Volbou f s výše uvedenými vlastnostmi pak dostaneme speciální typy variogramu.

Na příklad pro $d = 2$ je přípustný model semivariogramu $\gamma(\mathbf{h}), \mathbf{h} = (h_1, h_2) \in \mathbb{R}^2$ funkce $g(h_1, h_2) = c - f(h_1, h_2)$, kde

$$f(h_1, h_2) = \sum_{j_1=-m_1}^{m_1} \sum_{j_2=-m_2}^{m_2} a_{j_1 j_2} \cos(h_1 t_{j_1} + h_2 t_{j_2}),$$

přičemž m_1 a m_2 jsou daná přirozená čísla, $t_{j_1}, t_{j_2}, a_{j_1 j_2}$, jsou pro $j_1 = -m_1, \dots, m_1$ a pro $j_2 = -m_2, \dots, m_2$ vhodné reálné konstanty vyhovující podmínce

$$c - \sum_{j_1=-m_1}^{m_1} \sum_{j_2=-m_2}^{m_2} a_{j_1 j_2} \geq 0.$$

Jejich doporučená optimální volba vychází ze simulací (viz [14]).

Položíme-li (viz [14])

$$g(h_1, h_2) = c - \sum_{j=1}^m J_0(t_j \sqrt{(h_1^2 + h_2^2) a_j}),$$

kde J_0 je Besselova funkce prvního druhu (viz [15]), dostaneme, za podmínky, že uvedené konstanty splňují nerovnost $c - \sum_{j=1}^m |a_j| \geq 0$ izotropický variogram.

Výhodou těchto modelů je, že umožňují modifikovat odhad variogramu na reálná data a že zahrnují také třídu modelů, které nevycházejí z předpokladů izotropie.

6. ODHADY V MODELU S DODATEČNOU INFORMACÍ

Odlisný přístup k metodě kriging, kde se předpokládá, že variogram není znám, ale je k dispozici dodatečná informace o neznámém vektoru parametrů β založili Omre and Halvorsen v [12,13] na bayesovské metodě odhadu. Předpokládají, že parametrický vektor β je náhodný a sdružené rozdělení vektorů β a \mathbf{Z} je mnohorozměrné normální. Pak, za předpokladu, že apriorní rozdělení parametru β je známé, tedy za předpokladu normality vektoru β jsou apriori známé střední hodnota

$$\mathbf{E}(\beta) = \beta_{apriori}$$

a varianční matice

$$\text{var}(\beta) = \Sigma_{apriori}.$$

Pak je snadné v případě, že Z je kovariančně stacionární odvodit (viz [13]) bayesovský odhad $Z(\mathbf{s}_0)$ ve tvaru

$$(8) \quad Z_B^*(\mathbf{s}_0) = \beta_B' \mathbf{x} + \mathbf{c}' \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \beta_B) = \mathbf{c}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Z} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{c})' \beta_B,$$

kde β_B je aposteriorní střední hodnota β a může být vyjádřena ve tvaru

$$(9) \quad \beta_B = (\mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X} + \Sigma_{apriori}^{-1})^{-1} (\mathbf{X}' \mathbf{C}^{-1} \mathbf{Z} + \Sigma_{apriori}^{-1} \beta_{apriori})$$

nebo, zapsáno ekvivalentně

$$(10) \quad \beta_B = \Sigma_{apriori} \mathbf{X}' (\mathbf{X} \Sigma_{apriori} \mathbf{X}' + \mathbf{C})^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \beta_{apriori}) + \beta_{apriori}$$

Z (10) je zřejmé, že aposteriorní střední hodnota β_B je součtem apriorního "kvalifikovaného" odhadu $\beta_{apriori}$ a lineární transformace vektoru rozdílů pozorování a kvalifikovaného odhadu jejich střední hodnoty.

Dále ze srovnání klasického odhadu (7), který dává univerzální kriging metoda a bayesovského odhadu (8) je zřejmé, že tyto odhady mají stejnou strukturu. Když v odhadu Z^* procesu Z nahradíme odhad $\hat{\beta}_{GLS}$ aposteriorním odhadem β_B , který je dán vzorcem (9), pak univerzální kriging odhad přejde v bayesovský odhad Z_B^* .

Bayesovský odhad má další zajímavou vlastnost, kterou Omre a Halverson v [13] nazvali bayesovský můstek mezi prostou a univerzální metodou kriging. Jednoduše lze tuto vlastnost charakterizovat následovně. Při známém vektoru β je jeho varianční matice $\Sigma_{apriori}$ nulová a bayesovský odhad přechází v odhad metodou prostého krigingu (simple kriging). Na druhé straně, když není známa žádná dodatečná informace o parametrech, pak lze předpokládat, že variabilita parametrů β_0, \dots, β_p je velká, což odpovídá tomu, že varianční matice $\Sigma_{apriori}^{-1}$ je přibližně nulová a tedy β_B

je blízko $\hat{\beta}_{GLS}$ a bayesovský odhad přechází v odhad (7) získaný metodou univerzální kriging.

Celkově lze shrnout, že kvalita bayesovských odhadů procesu Z podstatně závisí na tom, jak dobrý je kvalifikovaný odhad $\beta_{apriori}$ a $\Sigma_{apriori}$. Jejich nalezení může být v řadě praktických situací velkým problémem. Ovšem na druhé straně jsou popsány experimentální situace, kdy je možné tyto kvalifikované odhady spolehlivě stanovit (viz [12, 13]) a získat pomocí bayesovských metod kvalitní odhady, vhodné pro praktické použití.

Jiný způsob, jak se vyrovnat s problémem začlení dodatečné informace o parametrech modelu přímo do modelu, může být založena na minimaxové metodě odhadu a bude jí věnován následující odstavec.

7. MINIMAXOVÝ ODHAD

V tomto odstavci budeme předpokládat, že chybový proces δ je druhého řádu stacionární a zavedeme minimaxový estimátor pro $Z(\mathbf{s}_0)$, $\mathbf{s}_0 \in D$. Z (5) plyne, že ze předpokladu nevychýlenosti odhadu predikce, tedy když $\lambda \in \mathcal{U}$, je MSE odhad $Z(\mathbf{s}_0)$ dán vztahem

$$\mathbf{E}(Z^*(\mathbf{s}_0) - Z(\mathbf{s}_0))^2 = \lambda' \mathbf{C} \lambda - 2\mathbf{c}' \lambda + C(0) = (1, \lambda') \mathbf{C}_m (1, \lambda)'$$

kde \mathbf{C}_m je bloková matice $\mathbf{C}_m = \begin{pmatrix} C(0) & -\mathbf{c}' \\ -\mathbf{c} & \mathbf{C} \end{pmatrix}$

Zřejmě matice \mathbf{C}_m je kovarianční maticí vektoru $(-\delta(\mathbf{s}_0), \delta(\mathbf{s}_1), \dots, \delta(\mathbf{s}_n))'$ a tedy je to matice pozitivně semidefinitní.

Pro získání minimaxového estimátoru pro $Z(\mathbf{s}_0)$ pak lze užít principu minimaxu podobným způsobem jako byl užit pro odhad regreních parametrů v [10,11].

Předpokládejme nejdříve, že je k dispozici dodatečná informace o kovariogramu C , speciálně, že je známo, že matice \mathbf{C}_m leží v nějakém okolí pozitivně definitní matice Σ_m typu $(n+1) \times (n+1)$. Zapsáno formálně, když Σ_m je nějaká pozitivně definitní matice typu $(n+1) \times (n+1)$ a $q > 0$ dané reálné číslo, pak předpokládáme, že $Tr(\Sigma_m - \mathbf{C}_m)^2 < q^2$, kde $Tr(\mathbf{W})$ značí stopu čtvercové matice \mathbf{W} a $q > 0$ je dané reálné číslo. Dále nechť $\mathcal{R} = \{\mathbf{W} : Tr(\mathbf{W} - \Sigma_m)^2 \leq q^2\}$ je uvažované okolí matice Σ_m , do něhož matice \mathbf{C}_m patří. Pak užitím principu minimaxu dostaneme odhad váhového vektoru λ minimalizací funkcionálu

$$J(\lambda) = \sup_{\beta \in \mathbb{R}^{p+1}, \mathbf{C}_m \in \mathcal{R}} \mathbf{E}(Z^*(\mathbf{s}_0) - Z(\mathbf{s}_0))^2 = \sup_{\beta \in \mathbb{R}^{p+1}, \mathbf{C}_m \in \mathcal{R}} (1, \lambda') \mathbf{C}_m (1, \lambda)'$$

pro $\lambda \in \mathcal{U}$.

Z [10] lemma 5.2. plyne, že funkcionál $J(\lambda)$ může být vyjádřen ve tvaru

$$J(\lambda) = (1, \lambda') (\Sigma_m + q^2 \mathbf{I}) (1, \lambda)'$$

a tedy vektor λ^* , který vyhovuje vztahu

$$(11) \quad J(\lambda^*) = \inf_{\lambda \in \mathcal{U}} J(\lambda)$$

je minimaxovým odhadem váhového vektoru λ . Zavedeme-li označení $\lambda_m = (1, \lambda)'$, $\mathbf{0}_k = (0, \dots, 0)' \in \mathbb{R}^k$, $\mathbf{x}_m = (1, \mathbf{x}')'$ a $\mathbf{X}_m = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}'_{p+1} \\ \mathbf{0}_n & \mathbf{X} \end{pmatrix}$, pak $\lambda \in \mathcal{U}$ právě když $\lambda_m \in \mathcal{U}_m = \{\lambda_m = (\lambda_0, \lambda')' : \mathbf{x}_m = \mathbf{X}'_m \lambda_m\}$ a je zřejmé, že minimalizace (11) vede k nalezení λ_m^* vyhovujícího vztahu

$$(12) \quad J(\lambda_m^*) = \inf_{\lambda_m \in \mathcal{U}_m} \lambda_m' (\Sigma_m + q^2 \mathbf{I}) \lambda_m.$$

Nyní snadno nahlédneme (viz [9]), že váhový vektor

$$(13) \quad \lambda_m^* = (1, \lambda^*)' = (\Sigma_m + q^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}_m (\mathbf{X}_m' (\Sigma_m + q^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}_m)^{-1} \mathbf{x}_m,$$

kde matice $(\mathbf{X}_m' (\Sigma_m + q^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}_m)^{-1}$ značí libovolnou zobecněnou inverzi matice $(\mathbf{X}_m' (\Sigma_m + q^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}_m)$, je hledaný vektor λ_m^* . Jeho subvektor λ^* je pak hledaný váhový vektor, který určuje minimaxový kriging prediktor veličiny $Z(\mathbf{s}_0)$. Konečně z [9] plyne, že minimaxový "kriging" rozptyl estimátoru $Z^*(\mathbf{s}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^* Z_i$ je dán vztahem

$$J(\lambda_m^*) = \mathbf{x}_m' (\mathbf{X}_m' (\Sigma_m + q^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}_m)^{-1} \mathbf{x}_m.$$

Literatura

- [1] Cressie, N.A.C., Statistics for spatial data. John-Wiley & Sons, Inc., New York, 1993
- [2] Cressie, N. A.C. and Hawkins, D.M. Robust estimation of the variogram, Journal of the International Association for Mathematical Geology, 12, 1980, p.115-125.
- [3] Johansen, S. An application of extreme point methods to the representation of infinitely divisible distributions. Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete, 5, 1966, p. 304-316.
- [4] Journel, A.G. and Huijbregts, C.J. Mining Geostatistics. Academia Press, London. 1978.
- [5] Kaluzny, S.P. Vega, S.C. Cardoso, T.P. and Shelly, A.A.: S+Spatials, User's manual for WINDOWS and UNIX, Versions 1.0, MathSoft, Inc. Seattle, Washington. 1996.
- [6] Matheron, G. Traite de Geostatistique Appliquee, Tome I. Memoires du Bureau de Recherches Geologiques at Minieres, No. 14. Editions Technip, Paris. 1962.
- [7] Matheron, G. Principles of geostatistics. Economic Geology, 58,1246-1266, 1963.
- [8] Matheron, G. The Theory of Regionalized variables and Its applications. Cahiers du Centre de Morphologie Mathematique, No. 5. Fontainebleau, France. 1971.
- [9] Michálek, J. Minimax approach to kriging. Folia - Mathematica. (Přijato do tisku)
- [10] Michálek, J. and Nakonechny, O. Minimax estimates of linear parameter function in regression model under restrictions on parameters and variance-covariance matrix. J. Comput. Appl. Math. No. 81, 1987, pp.79-92.
- [11] Michálek, J. and Nakonechny, O. Minimax estimates in regression model with restrictions on parameters and with variance matrix belonging to a special class of variance matrices. Folia - Mathematica 7, 1998, p. 95-104.
- [12] Omre, H. Bayesian Kriging - Merging Observations and Qualified Guesses in Kriging. Mathematical Geology, Vol. 19, No. 1 1987, pp. 25-39.
- [13] Omre, H. and Halvorsen, K. B.: The Bayesian Bridge between Simple and Universal Kriging. Mathematical Geology, Vol.21, No.7, 1989, pp.767-786.
- [14] Rehman, S.U. and Shapiro, A.: An Integral transform approach to cross-variograms modeling. Computational Statistics & Data Analysis 22 1996 p. 213-233.
- [15] Shapiro, A. and Botha, J.D.: Variogram fitting with a general class of conditionally positive definite functions. Computational Statistics & Data Analysis. 11 1991 p.87-96.

ON CONVERGENCE OF A CLASS OF STOCHASTIC ALGORITHMS

LADISLAV MIŠÍK, JOSEF TVRDÍK AND IVAN KŘIVÝ

ABSTRACT. V tomto príspevku sa skúmajú otázky spojené s konvergenciou obcej triedy algoritmov pre globálnu optimalizáciu. Za istých predpokladov sú dokázané nutné a postačujúce podmienky konvergence takýchto algoritmov. Ďalej je ukázaná jednoduchá metóda modifikácie ľubovoľného algoritmu uvažovanej triedy na konvergentný algoritmus tejto triedy. Táto modifikácia môže byť pritom ľubovoľne malá, aby podstatne neovplyvnila praktický beh pôvodného algoritmu. V experimentálnej časti sú aplikované dosiahnuté výsledky na niektoré konkrétne algoritmy uvažovaných tried. Výsledky týchto pokusov potvrdzujú, že z praktického hľadiska nemá splnenie požiadavky konvergence významný vplyv na chod algoritmu.

Резюме: В этой работе рассматриваются вопросы касающиеся конвергенции общего класса алгоритмов для глобальной оптимизации. Иходя из весьма общих предположений здесь доказываются необходимые и достаточные условия конвергенции этих алгоритмов. Дальше предлагается простой метод приведения любого алгоритма рассматриваемых классов к конвергентному алгоритму того же самого класса. Эта модификация может быть произвольно маленькая, чтобы на практике не влиять на действие оригинального алгоритма. В экспериментальной части работы полученные результаты применяются к некоторым конкретным алгоритмам обоих классов. Результаты этих экспериментов показывают, что выполнение условий конвергенции не имеет на практике существенное влияние на действие алгоритма.

1. INTRODUCTION

Let $D \subset \mathcal{R}^d$. Denote by \mathcal{L} the system of all Lebesgue measurable subsets of D and λ the Lebesgue measure on \mathcal{L} . Let f be a real Lebesgue measurable function defined on D . The number $m = \inf\{t; \lambda(f^{-1}(-\infty, t)) > 0\}$, where $f^{-1}(A) = \{x \in D; f(x) \in A\}$, is called the *essential minimum* of f . The task is to find an arbitrary good approximation of m .

1.1. Evolutionary algorithm. Let p_0 be a probability measure on (D, \mathcal{L}) which is positive on each open subset of D . Let N be a positive integer called the *size of population* and D^N the set of all populations. Let π be a mapping defined on D^N assigning to each population \mathcal{P} the probability measure $\pi(\mathcal{P})$ on (D, \mathcal{L}) . Finally, let $\{m_n\}$ be a sequence of numbers from interval $\langle 0, 1 \rangle$ and let \mathcal{C} be a rule according to which some points in the old population are replaced by new ones. We will consider a class of *evolutionary algorithms* described as follows:

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 65C20; Secondary 68U20.

Key words and phrases. Global optimization, convergence of algorithms.

This research was supported by both the grant no. 402/00/1165 of the Czech Grant Agency and the institutional research grant no. CEZ: J09/98:179000002.

- I*: Generate an initial population $\mathcal{P}_0 = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ chosen as an independent identically distributed sample according to the probability measure p_0 and set $n = 0$.
- C_n*: Copy a portion of M best points of \mathcal{P}_n directly into the new population. Here, the best points means the points at which the function f has its lowest values and M is an integer from the set $\{0, 1, 2, \dots, N - 1\}$.
- S_n*: Select a new point at random according to the probability measure $p_{n+1} = \pi(\mathcal{P}_n)$ and include it to the new population when fulfilling the condition \mathcal{C} . Repeat this procedure until the new population is complete.
- M_n*: With the probability m_{n+1} replace a randomly chosen point by its mutation.
- R*: Set $n = n + 1$ and go back to *C_n*.

Mutation of a given point is a point in D generated according to the specified rules. Algorithms using only steps *I*, *C_n*, *S_n*, *R* we will call *CRS algorithms* (Controlled Random Search). In other words, CRS is an evolutionary algorithm, for which all m_n are equal to zero.

1.2. Convergence of an algorithm. By convergence of an algorithm we mean the convergence with probability 1, i.e. an algorithm is convergent if for any measurable function f

$$P(\lim_{n \rightarrow \infty} \min\{f(x); x \in \mathcal{P}_n\} = m) = 1.$$

2. CONVERGENCE OF CRS ALGORITHM

2.1. General conditions for the convergence of CRS algorithm.

Definition. We will say that an CRS algorithm saves the best point if

- the best point in the old population is copied into the new population directly at step *C_n*, i.e. $M > 0$.
- if a point selected at step *S_n* has lower f value than any point in the old population then it is included into the new population by rule \mathcal{C} .

The following theorem provides the necessary and sufficient condition for the convergence of an CRS algorithm and it is similar to Global Search Convergence Theorem by Solis and Wets in [5].

Theorem 1. Suppose that an CRS algorithm saves the best point. Then it is convergent if and only if for each set S of positive Lebesgue measure, we have

$$(1) \quad \prod_{n=1}^{\infty} (1 - p_n(S)) = 0.$$

Proof: First suppose that the equation (1) holds. The infinite product on the left side expresses the probability of repeatedly missing the set S when selecting new points of population. Let f be a measurable function and denote by m its essential minimum. Choose $\epsilon > 0$. Let us consider the probability that a point y in the set $F_\epsilon = f^{-1}(-\infty, m + \epsilon)$ of a positive Lebesgue measure (by definition of essential minimum) will be selected at latest at the step *S_n*. This probability is greater than or equal to $1 - \prod_{i=1}^n (1 - p_i(F_\epsilon))^{N-M}$. According to the assumption of Theorem 1 point y can be removed from the population only if a better point will later be selected. Denote by x_n the best point in population \mathcal{P}_n . Then, by equation (1)

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} P(x_n \in F_\epsilon) &\geq 1 - \prod_{n=1}^{\infty} (1 - p_n(S))^{N-M} = \\ &= 1 - (\prod_{n=1}^{\infty} (1 - p_n(S)))^{N-M} = 1 \end{aligned}$$

and, as $\epsilon > 0$ was arbitrary, the algorithm is convergent.

Now suppose that the equation (1) does not hold for some set S of positive Lebesgue measure. Define the function f by

$$f(x) = \begin{cases} 0, & x \in S \\ 1, & x \in D - S. \end{cases}$$

Then f is a measurable function and the algorithm does not converge to the essential minimum of f .

2.2. Necessary condition for the convergence of CRS. In the case when $M = N - 1$ and the rule \mathcal{C} is as follows

If $f(y_{n+1}) < \max\{f(x); x \in \mathcal{P}_n\} = f(x_i)$ replace x_i by y_{n+1} in \mathcal{P}_n
to produce \mathcal{P}_{n+1} , otherwise set $\mathcal{P}_{n+1} = \mathcal{P}_n$,
where a new trial point y_{n+1} is generated from \mathcal{P}_n by a heuristic,

the following theorem provides the necessary condition for the convergence of CRS.

Theorem 2. If an algorithm is convergent then for any collection $\{U_1, U_2, \dots, U_N\}$ of open subsets of D and for every measurable set $S \subset D$ of positive Lebesgue measure there is a selection $\mathcal{P} = \{x_1 \in U_1, x_2 \in U_2, \dots, x_N \in U_N\}$ such that $\pi(\mathcal{P})(S) > 0$.

Proof: Suppose the contrary and, without loss of generality, let $\left(\bigcup_{i=1}^N \overline{U_i}\right) \cap S = \emptyset$. Consider the measurable function

$$f(x) = \begin{cases} -1, & x \in S \\ 0, & x \in \bigcup_{i=1}^N U_i \\ 1, & x \in D - \left(S \cup \left(\bigcup_{i=1}^N U_i\right)\right) \end{cases}$$

As p_0 is positive on open sets, the probability α of the choice $\mathcal{P}_0 = \{x_1 \in U_1, x_2 \in U_2, \dots, x_N \in U_N\}$ is positive. For such a choice we have $\mathcal{P}_n = \mathcal{P}_0$ for all integers n and the algorithm will never reach the essential minimum in S . Thus

$$P\left(\lim_{n \rightarrow \infty} \min\{f(x); x \in \mathcal{P}_n\} = m\right) < 1 - \alpha$$

and the algorithm does not converge with probability 1.

2.3. Modification of a nonconvergent algorithm. The following theorem provides a simple way how to modify an arbitrary CRS algorithm to a convergent one.

Theorem 3. Let two algorithms \mathcal{A}_1 and \mathcal{A}_2 work with the same size of population and let they use the mappings π_1 and π_2 , respectively, to determine the corresponding probability measures. Further, let for every $S \subset D$ of positive Lebesgue measure there exists a positive constant δ_S such that $\pi_1(\mathcal{P})(S) \geq \delta_S$ holds for all $\mathcal{P} \in D^N$. Finally, let $\sum_{n=1}^{\infty} c_n$ be an arbitrary divergent series of real numbers from the interval $\langle 0, 1 \rangle$. Then the algorithm \mathcal{A} using the mapping

$$\pi = c_n \pi_1 + (1 - c_n) \pi_2$$

is convergent.

Remark 1. It is evident that the algorithm \mathcal{A}_1 itself is convergent. (If $c_n = 1$ for all n then \mathcal{A} is identical with \mathcal{A}_1 .)

Remark 2. The expression $c_n \pi_1 + (1 - c_n) \pi_2$ should be interpreted in the way that the new probability measure p_{n+1} is generated with the probability c_n by the function π_1 and with the probability $(1 - c_n)$ by the function π_2 .

In the proof of Theorem 3 the following simple Lemma is used.

Lemma 1. Let $\alpha_n \in \langle 0, 1 \rangle$ for all integers n and let the infinite series $\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n$ be divergent. Then $\prod_{n=1}^{\infty} (1 - \alpha_n) = 0$.

Proof of Lemma 1: Note that the condition $\prod_{n=1}^{\infty} (1 - \alpha_n) = 0$ is equivalent to the condition $\prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - \alpha_n)} = \infty$. An easy calculation

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - \alpha_n)} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_n^k \right) > 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n = \infty$$

completes the proof.

Proof of Theorem 3: Let $S \subset D$ be of positive Lebesgue measure. According to the definition of the algorithm \mathcal{A} and the properties of π_1

$$\alpha_n = \pi(\mathcal{P}_n)(S) \geq c_n \delta_S$$

holds. The series $\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n$ is divergent and, by Lemma 1, $\prod_{n=1}^{\infty} (1 - \alpha_n) = 0$. An application of Theorem 1 completes the proof.

3. CONVERGENCE OF EVOLUTIONARY ALGORITHMS

3.1. Conditions for the convergence of evolutionary algorithms. The introduction of mutation into an algorithm can influence its convergence in both the positive and the negative direction. It may adapt the nonconvergent CRS algorithm to the convergent evolutionary algorithm and vice versa.

The positive role of mutation may be described as follows. Suppose that the corresponding CRS algorithm is not convergent and that the sequence (of best points of populations) generated is far from the essential minimum. Since the new point created by mutation need not depend on the history of populations, there can be a positive probability that its value belongs to the small neighbourhood of the essential minimum. Of course, it depends on the way how the mutation does work.

Now suppose that the value of the best point of population is close to the essential minimum. There is a positive probability that the best point will be replaced via mutation by much worse point. Thus it is possible that the mutation can break the convergence of corresponding CRS algorithm. The following definition can be motivated by the above discussion.

Definition. We will say that the mutation excludes the best point if the best point of population must not be replaced by its mutation.

Note that the condition of exclusion of the best point is not too restrictive in the case when the size of population is relatively high. Now we can state the sufficient condition for the convergence of evolutionary algorithms.

Theorem 4. Let for each set $S \in D$ of positive Lebesgue measure, the probability that the new point created by mutation belongs to S be positive. Further suppose that the mutation excludes the best point and that the series $\sum_{n=1}^{\infty} m_n$ is divergent. Then the evolutionary algorithm is convergent provided the corresponding CRS algorithm saves the best point.

Proof: Let $\epsilon > 0$ and $F_\epsilon = f^{-1}(-\infty, m + \epsilon)$. It suffices to show that

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P(x_k \in F_\epsilon) = 1.$$

Denote by s the positive probability that the new point created by mutation belongs to F_ϵ . Then the probability that a point from F_ϵ is included to the population \mathcal{P}_n via mutation is equal to $s m_n$ and the probability that a point from F_ϵ will be

included to the population \mathcal{P}_n either via mutation or via selection at step $[S_n]$ is greater than or equal to $s m_n$. Now, because of saving the best point and excluding it from mutation, we have

$$P(x_k \in F_\epsilon) \geq 1 - \prod_{n=1}^k (1 - s m_n).$$

Lemma 1 and the Theorem 1 show that the algorithm is convergent.

3.2. Examples. The assumptions of Theorem 4 provide only a sufficient condition for the convergence of evolutionary algorithms. Thus, in connection with this theorem, some natural questions arise. We will touch two of them here.

Question 1. What can be said about the convergence, when the assumption of excluding the best point is removed in Theorem 2?

Question 2. What can be said about the convergence, when the positive probability of selection of a mutant is restricted only to a part of the domain?

We conjecture that in no one of the above questions the positive answer about the convergence can be stated. Let us give a short informal explanation of the reasons why.

Concerning *Question 1*: For a general evolutionary algorithm, the probability of creation a new point in a sufficiently small neighbourhood of global minimum can be smaller than the probability of its removing from the population via mutation when the point is not protected. We illustrate this possibility by the following example.

Let $a \in (0, 1)$, $\epsilon \in (0, 1)$ and let $\phi_{a,\epsilon}$ be a measurable function defined in the interval $\langle 0, K \rangle$ such that $\phi_{a,\epsilon}(0) = 0$, $\phi_{a,\epsilon}(1) = 1$, $\phi_{a,\epsilon}(K) = \epsilon$, let $\phi_{a,\epsilon}$ be increasing in the interval $(0, a)$ and $\phi_{a,\epsilon}$ decreasing in the interval (a, K) . Further, let $D \subset \{X \in \mathbb{R}^d; |X| \leq K\}$ and $f_{a,\epsilon}(X) = \phi_{a,\epsilon}(|X|)$ for all $X \in D$. Let $d = 2$, $N = 10$, $M = 5$, $D = \{[x, y]; \sqrt{x^2 + y^2} \leq 100\}$, $m_n = 0.1$, for $n = 1, 2, \dots$ and consider the function $f_{a,\epsilon}$. For simplicity suppose that all new points and mutants are chosen by the uniform probability distribution. Then the probability that a point in a sufficiently small neighbourhood of the global minimum will appear when forming new population is less than $1 - [1 - \pi a^2 / (\pi 100^2)]^{N-M} = 1 - (1 - a^2 10^{-4})^5$. On the other hand, the probability that such a point will be mutated to a point outside the neighbourhood $\{[x, y]; \sqrt{x^2 + y^2} < a\}$ of the global minimum is equal to $m_n \cdot \frac{1}{N} [1 - \pi a^2 / (\pi 100^2)] = \frac{1}{100} (1 - a^2 10^{-4})$. One can show that for sufficiently small values of a , the probability of disappearance of "good" points is greater than the probability of their appearance. Consequently the algorithm can not be convergent.

Concerning *Question 2*: Consider the same function $f_{a,\epsilon}$ as in the previous example and suppose, for example, that mutation changes only a one randomly chosen coordinate of a point. Thus the new mutant can belong to a sufficiently small neighbourhood of global minimum only in the case when all but one coordinates of the original point are very close to 0. On the other hand, the probability of existence of such a point in population is not very high by the nature of the function f and one can demonstrate the non-convergence of algorithm in a similar way as in the previous example.

4. EXPERIMENTAL COMPARISON OF ALGORITHMS

4.1. Algorithms selected for tests. *Modified controlled random search algorithm* (MCRS) is described in [2, 3, 8]. It starts from a population P of N uniformly distributed points in D . A new trial point \mathbf{x} is generated from a simplex S ($d + 1$

points chosen at random from P) by the relation

$$(2) \quad \mathbf{x} = \mathbf{g} - Y(\mathbf{z} - \mathbf{g}),$$

where \mathbf{z} is one (randomly taken) pole of the simplex S , \mathbf{g} the centroid of the remaining d poles of the simplex and Y a random multiplication factor. Several distributions of Y were tested in [3] and it was found that good optimization results were obtained with Y distributed uniformly in $\langle 0, \alpha \rangle$ with α ranging from 4 to 8. Point \mathbf{x} may be considered as resulting from the reflection of point \mathbf{z} with respect to centroid \mathbf{g} . Using the reflection procedure, initial population P is iteratively contracted by replacing the worst point with a better point (with respect to f -values). Input parameters of MCRS are: population size N and parameter α of uniform distribution in randomized reflection.

Differential evolution (DE) algorithms [7, 6] work with two populations: P (old) and Q (new). Basically, for each vector (point) $\mathbf{x}_{i,P}$, $i = 1, 2, \dots, N$, of old population P a mutant vector $\mathbf{v}_{i,Q}$ is generated by adding the weighted difference of vectors from P to another vector from P . In order to increase the diversity of the new vectors, crossover is introduced. Therefore, trial vector $\mathbf{u}_{i,Q}$ of new population Q is created by replacing some elements of vector $\mathbf{x}_{i,P}$ by corresponding elements of mutant vector $\mathbf{v}_{i,Q}$.

Two different strategies are used to generate mutant vectors [7, 6]:

- strategy using three randomly taken vectors of P (DERAND algorithm),
- strategy using the best vector and four randomly taken vectors of P (DEBEST algorithm).

The strategies as well as the crossover procedure are described in [6] in detail. The input parameters of DE algorithms are: population size N , dilatation coefficient of vector difference $F > 0$ and parameter C influencing the number of elements L to be exchanged by crossover, L being drawn from $\langle 1, d \rangle$ with the probability $P(L \geq t) = C^{t-1}$ for $t = 1, 2, \dots, d$, $C \in (0, 1)$. No proof of convergence of differential evolution has been yet known [7].

Evolutionary search (ES) algorithms [2, 8] also work with two populations: old population P and new population Q . The new population inherits the properties of the old one in two ways: directly by surviving a number M of the best points (with respect to f -values) and indirectly by applying the reflection to the old population. Moreover, a point with new properties (even with a larger f -value) is allowed to arise with a small probability p (mutation probability). The convergence of evolutionary search under specific circumstances is proved in Theorem 4. An example of the evolutionary search is the ES5 procedure.

procedure ES5

generate P (an old population of N points taken at random from D)

repeat

copy M best points of P into new population Q

find the worst point in P , \mathbf{x}_{worst}

if condition for the mutation is true

then *mutate* any point of P except the best point

repeat

repeat *Reflection* applied to a simplex from P

until the next trial point is better than \mathbf{x}_{worst}

insert the next trial point into Q

until Q is completed to N points
replace P by Q
until stopping condition is true

The two kinds of mutation were used in the experiments:

- Uniform, when a mutant point is taken at random from the uniform distribution on $D = \prod_{i=1}^d \langle a_i, b_i \rangle$, $a_i < b_i$, $i = 1, 2, \dots, d$,
- Normal, when point \mathbf{x} selected to mutation is changed into point $\mathbf{y} \sim N(\mathbf{x}, \sigma^2)$, where $\sigma^2 = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_d^2)$, $\sigma_i = (b_i - a_i) / 6$.

In the next text the algorithms are called ES5UNI and ES5NOR, resp. Both the ES5UNI and the ES5NOR fulfill the conditions of convergence given in Theorem 4.

The ES5 algorithm without any mutation (when condition for mutation never occurs and $M < N - 1$) can be considered as a kind of modified controlled random search working with two populations and we call it MCRS2.

When compared with MCRS algorithms, ES algorithms have two additional tuning parameters: probability of mutation p and number M of the best points surviving from old population P to new population Q or its upper limit.

Mixtures of the heuristics mentioned above were also tested in this research, namely:

- DExRF12, where in each generation the heuristic DERAND was followed by $2N$ reflections according to (2),
- DExRF11, where in each generation the heuristic DERAND was followed by N reflections,
- DExRF21, where in each generation the heuristic DERAND was followed by $N/2$ reflections,
- DExES5N, where the heuristic DERAND was combined with the heuristic ES5NOR with one mutation in each generation.

4.2. Test functions. For the testing of the algorithms we used such problems where at least one of the nonconvergent heuristics, i.e. MCRS or DE, sometimes failed in searching for the global minimum. From this point of view the following functions [7] were chosen:

Shekel's Foxholes

$$f(\mathbf{x}) = \left(0.002 + \sum_{i=0}^{24} \frac{1}{i+1 + \sum_{j=1}^2 (x_j - a_{ij})^6} \right)^{-1}$$

where the elements of \mathbf{A} matrix are defined as follows:

$$\begin{aligned} a_{i1} &= -32, -16, 0, 16, 32 \quad \text{for } 0, 1, 2, 3, 4, \quad \text{resp.}, \\ a_{i1} &= a_{i(\text{mod } 5), 1} \quad \text{for } i \geq 5, \\ a_{i2} &= -32, -16, 0, 16, 32 \quad \text{for } i = 0, 5, 10, 15, 20, \quad \text{resp.}, \\ a_{i2} &= a_{i+k, 2} \quad \text{for } k = 1, 2, 3, 4. \end{aligned}$$

The global minimum is $\mathbf{x}^* = (-32, -32)$ and $f(-32, -32) \simeq 0.998004$.

Corana's parabola

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^4 \begin{cases} 0.15a_i [z_i - 0.05\text{sgn}(z_i)]^2 & \text{if } |x_i - z_i| < 0.05 \\ a_i x_i^2 & \text{otherwise} \end{cases}$$

where $z_i = 0.2 \text{sgn}(x_i) \lfloor 5x_i \rfloor + 0.49999$ and $\mathbf{a} = (1, 1000, 10, 100)$.

The global minimum is $\mathbf{x}^* = (\langle -0.05, 0.05 \rangle, \dots, \langle -0.05, 0.05 \rangle)$ and $f(\mathbf{x}^*) = 0$.

Griewangk's function

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^d x_i^2 - \prod_{i=1}^d \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1$$

The global minimum is $\mathbf{x}^* = (0, 0, \dots, 0)$ and $f(\mathbf{x}^*) = 0$.

4.3. Experimental conditions. The stopping condition for all the tests were defined as it follows. Suppose that f_1, f_2, \dots, f_N is a nondecreasing sequence of the function values in a given iteration of the algorithm. The optimization process was stopped when $f_5 - f_1 \leq 10^{-7}$.

For each optimization task 100 independent runs were carried out. The common tuning parameter α for MCRS and ES5 was adjusted to the same value, $\alpha = 8$. In each generation the additional tuning parameter M for ES5 algorithms was set at random from $\langle 1, \lfloor N/2 \rfloor \rangle$, where $\lfloor N/2 \rfloor$ is the largest integer less than or equal to $N/2$. Concerning DE algorithms the tuning parameters were set $F = 0.9$ and $C = 0.9$.

Three basic characteristics of the algorithms were considered in the experiments:

- reliability R defined as $(100 - \text{percentage of failures})$, the failure being considered as the stopping at a local minimum;
- convergence rate measured by the average number of objective function evaluations NE for stopping at global minimum;
- number of objective function evaluations $NE1$ needed for reaching a state very close to the global minimum, specially when $f(\mathbf{x}_{best}) - f(\mathbf{x}_{opt}) < 1 \times 10^{-3}$.

4.4. Results for CRS. Using Theorem 2, it can be shown that the modified controlled random search heuristic (MCRS) fails to be convergent. In agreement with Theorem 3 we tested its modification based on a *combination* of the MCRS and the simple random search with new trial points uniformly distributed on D , $c_n = c$ for all integers n , $c \in \langle 0, 1 \rangle$. This *combined* algorithm was tested on well-known fifth De Jong's function (Shekel's Foxholes), for which MCRS stopped at a local minimum in about 60 % of runs [8]. The relative frequency of the simple random search is an input parameter c of the algorithm. Value $c = 0$ reduces the algorithm to MCRS, value $c = 1$ gives the simple random search. The switching between the MCRS and the simple random search is made at random in each step with the probability c for the simple random search and $(1 - c)$ for the MCRS. Searching space D was constrained to $\prod_{j=1}^2 [-40, 60]$ in these experiments.

From Fig. 1 it is evident that the reliability of the combined MCRS increases almost linearly with increasing c . Fig. 2 shows the dependence of number of the function evaluations (NE) on the reliability for the combined MCRS (Fig. 1 – left) and the original (nonconvergent) MCRS (Fig. 1 – right). In both cases the growth of NE is approximately exponential but in the case of the nonconvergent MCRS the growth of NE is much slower. Moreover, the original nonconvergent MCRS enables to achieve the same level of reliability even at smaller values of NE by increasing the population size. By increasing the population size from 10 to 35 the reliability of 100 per cent was achieved, see Fig. 2 – right .

4.5. Results for evolutionary algorithms. Population size N and the size of searching space $D = \prod_{i=1}^d \langle a_i, b_i \rangle$, $a_i < b_i, i = 1, 2, \dots, d$ were set to be the same for all the algorithms depending on the tested function, see Table 1.

The experimental results are summarized in Tables 2, 3 and 4. As we can see in the e 2, any general conclusion cannot be made on nonconvergent heuristics. We obtained

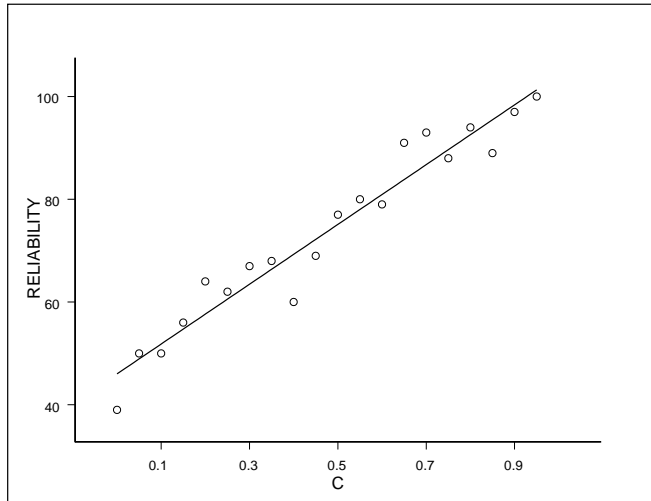


FIGURE 1. Empirical dependence of reliability on c

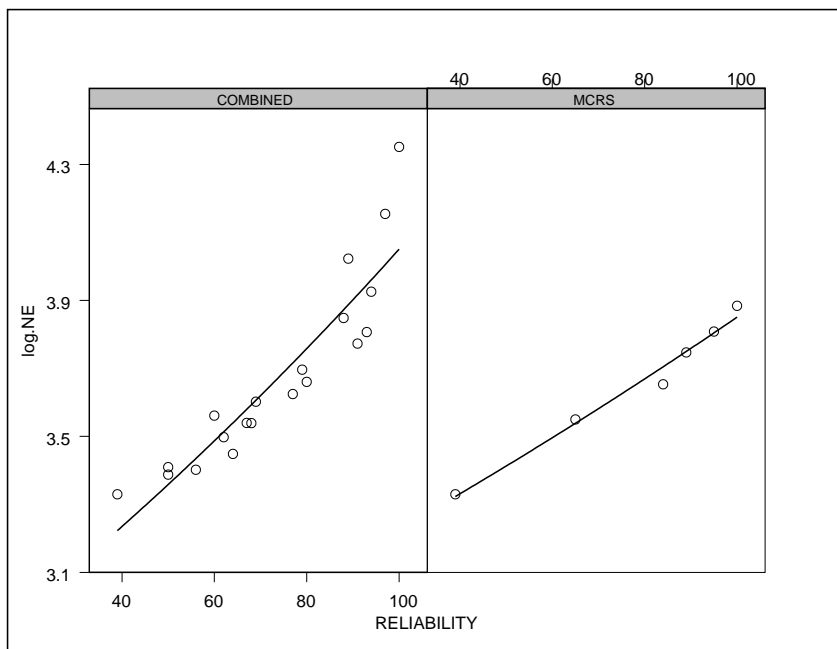


FIGURE 2. Empirical dependence of log NE on reliability

TABLE 1. Population size and searching space

Function	d	N	$\langle a_i, b_i \rangle$
Shekel	2	10	$\langle -65.536, 65.536 \rangle$
Corana	4	20	$\langle -1000, 1000 \rangle$
Griewangk	10	100	$\langle -400, 400 \rangle$

TABLE 2. Nonconvergent simple heuristics

Algorithm	Corana		Shekel		Griewangk	
	R	NE	R	NE	R	NE
DEBEST	97	6855	69	845	100	327810
DERAND	96	4503	37	700	100	199015
MCRS	100	6577	39	2136	23	63256
MCRS2	97	11124	71	2921	100	219342

very different values of R and NE for the three functions under considerations. For Corana’s function the MCRS was found to be the only reliable optimization algorithm. On the contrary, the MCRS is the only unreliable algorithm for the optimization of Griewangk’s function but it is significantly faster than the others. In the case of Shekel’s function all the heuristics are not reliable, both DERAND and MCRS being heavily unreliable.

TABLE 3. ES5 – dependence R and NE on probability of mutation p for Shekel’s function

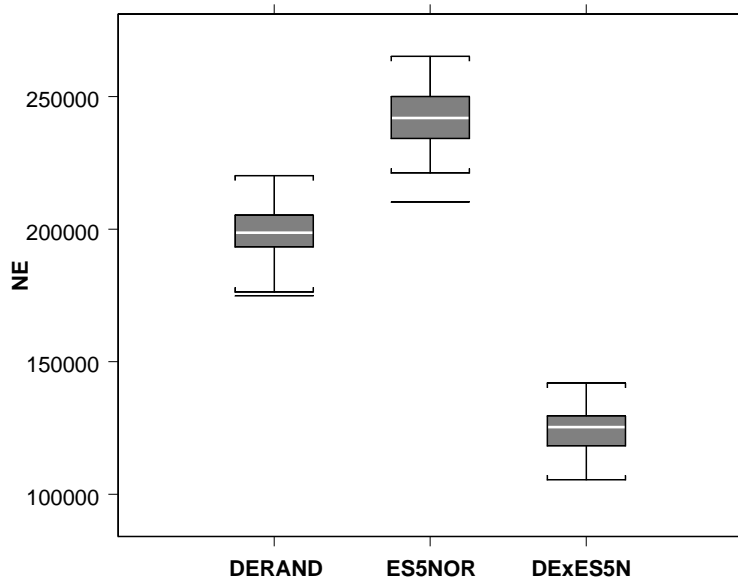
p	Uniform			Normal		
	R	$NE1$	NE	R	$NE1$	NE
0.2	71	2157	3072	72	2272	3173
0.4	69	2269	3189	69	2272	3020
0.6	67	2221	3116	80	2272	3240
0.8	75	2380	3272	79	2417	3395
1.0	82	2273	3252	71	2471	3609

As regards the ES5 algorithm, we can see in Table 3 that for Shekel’s function the reliability increases very slowly with increasing probability of mutation and NE values are also slightly increasing. The overall results are not significantly better than the results of simple nonconvergent heuristics (compare with Table 2). For Griewangk’s function the full reliability was achieved by the MCRS2 algorithm and additional mutation in ES5 only slightly increased NE values, i.e. it did not bring any improvement of the results.

The results of the mixtures of different heuristics are summarized in Table 4. Interesting results were achieved by using the DExES5N algorithm in the case of Griewangk’s function. The DExES5N is the combination of DERAND and ES5NOR with one mutated point in each generation. The results are shown in Fig. 3. We can see that the DExES5N is much better with respect to NE than the both parental algorithms.

TABLE 4. Mixtures

Algorithm	Corana		Shekel		Griewangk	
	R	NE	R	NE	R	NE
DExRF21	98	3722	51	776	100	162098
DExRF11	93	3380	58	815	100	180115
DExRF12	91	3240	58	949	96	169796
DExES5N	95	9044	80	2467	100	127476

FIGURE 3. Griewangk's function - comparison of NE for a mixture of DERAND and ES5NOR

5. CONCLUSIONS

The proof of convergence for a stochastic algorithm may bring some useful ideas for its implementation. However, the proof of convergence with probability 1 is very weak result from practical point of view. A nonconvergent heuristic can give more reliable results than a related theoretically convergent algorithm even at a smaller number of objective function evaluations. There is no guarantee that the evolutionary algorithm with proved convergence is more reliable than a nonconvergent heuristic in solving a concrete problem of the global optimization of a multimodal function.

Sometimes a mixture of different heuristics can bring a substantial decrease in the number of objective function evaluations and/or an increase in reliability, but any commonly used guideline for such a mixing is not yet available.

REFERENCES

- [1] Bäck, T. (1996). *Evolutionary Algorithms in Theory and Practice*. New York: Oxford University Press
- [2] Křivý, I. and Tvrđík, J. (1996). Stochastic Algorithms in Estimating Regression Models. In: A. Prat (Ed.), *COMPSTAT'96. Proceedings in Computational Statistics*, Physica Verlag, Heidelberg, 325–330
- [3] Křivý, I. and Tvrđík, J. (1995). The Controlled Random Search Algorithm in Optimizing Regression Models. *Comput. Statist. and Data Anal.*, **20**, 229–234
- [4] Mišík, L. (2000). On Convergence of a Class of Evolutionary Algorithms. In: *MENDEL'2000. 6th International Conference on Soft Computing* (Tech. Univ. of Brno, June 2000). Brno, 97–100
- [5] Solis, F. J. and Wets, R. J-B. (1981). Minimization by Random Search Techniques. *Mathematics of Operations Research* **6**, 19–30
- [6] Storn, R. and Price, K. (1995). *Differential evolution - a Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Spaces*. Technical Report TR-95-012, ISCI, <http://http.isci.berkeley.edu/~storn/litera.html>
- [7] Storn, R. and Price, K. (1997). Differential Evolution – a Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization. *J. Global Optimization* **11**, 341–359
- [8] Tvrđík, J. and Křivý, I. (1999). Simple Evolutionary Heuristics for Global Optimization. *Comput. Statist. and Data Anal.* **30**, 345–352

UNIVERSITY OF OSTRAVA, 30. DUBNA 22, 701 03 OSTRAVA, CZECH REPUBLIC
E-mail address: Ladislav.Misik; krivy@osu.cz; tvrdik@osu.cz

REGRESSION MODELS FOR LONGITUDINAL DATA

MARTINA ORSÁKOVÁ

ABSTRACT. V článku referuji vlastnosti parametrického odhadu v regresním modelu $Z_i^k = m(\theta_0, \mathbb{X}_i(T_i^k)) + \varepsilon_i^k$, kde T_i^k představuje čas k -tého pozorování vysvětlované proměnné Z u i -tého subjektu. Obecně mnohorozměrný proces kovariát $\mathbb{X}_i(s) = (X_i^{(1)}(s), \dots, X_i^{(d)}(s))$ závisí na událostech do času s , tj. na $\{(Z_i^k, T_i^k) | k : T_i^k < s\}$. Odhad neznámých parametrů θ_0 je založen na metodě nejmenších vážených čtverců.

Резюме. В работе реферирую качества параметрического оценивания в регрессивной модели $Z_i^k = m(\theta_0, \mathbb{X}_i(T_i^k)) + \varepsilon_i^k$, где T_i^k есть время k -наблюдения зависимой переменной Z для i -субъекта. Вообще многомерной процесс независимых переменных $\mathbb{X}_i(s) = (X_i^{(1)}(s), \dots, X_i^{(d)}(s))$ зависит от события до времени s , т.е. от $\{(Z_i^k, T_i^k) | k : T_i^k < s\}$. Оценивание неизвестных параметров θ_0 основано на методе наименьших взвешенных квадратов.

1. INTRODUCTION

Consider the triples $(T_i^k, Z_i^k, \mathbb{X}_i(T_i^k))$, where T_i^k is the time of the k -th observations of i -th subject, Z_i^k is dependent variable and $\mathbb{X}_i(T_i^k)$ is a d -dimensional process of covariates: $\mathbb{X}_i(s) = (X_i^{(1)}(s), X_i^{(2)}(s), \dots, X_i^{(d)}(s))$. We assume that we have n i.i.d. replicates from a generic model. The T_i 's can be exposed to different censoring systems. The covariates $\mathbb{X}_i(s)$ can depend on the events prior to time s , i.e. on the $\{(Z_i^k, T_i^k) | k : T_i^k < s\}$. The process $\mathbb{X}_i(s)$ may include quantitative as well as qualitative variables, and could include indicators of sex, treatment group, geographical regions or age, and various other continuous measurements. In this paper we investigate properties of a particular estimator for the regression parameters in the model $Z_i^k = m(\theta_0, \mathbb{X}_i(T_i^k)) + \varepsilon_i^k$.

2. PARAMETRIC MODEL

Assume that $m(\cdot)$ is a regression function - known and (sufficiently) smooth function of unknown regression parameters θ_0 :

$$(1) \quad Z_i^k = m(\theta_0, \mathbb{X}_i(T_i^k)) + \varepsilon_i^k,$$

where $i = 1, \dots, n$, $k = 1, \dots, N_t^i$, ε_i^k is a noise. The process N_t^i counts number of observations for i -th subject in $[0, t]$, i.e. $N_t^i = \sum_k I(T_i^k \leq t)$.

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62J02.

Key words and phrases. Longitudinal data, regression model.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 113200008.

2.1. **Assumptions.** Define $R_t^i = \sum_{k=1}^{N_t^i} Z_i^k$ and a filtration

$$\mathcal{F}_t = \sigma(R_s^i, N_s^i : s \leq t, i = 1, ..n) \vee \mathcal{A},$$

the history of the process R_t^i and N_t^i for $i = 1, ..n$. \mathcal{A} is assumed to be a σ -algebra independent of $\sigma(R_s^i, N_s^i : s \leq t, i = 1, ..n)$, and represents knowledge prior to time 0. It is assumed that no two of the counting processes N_t^i jump at the same time (almost surely). Let $\mathbb{X}_i(s)$ is predictable process with respect to the filtration \mathcal{F}_s and is "cadlag" - the right continuous with left limits process. The process N_t^i has a random intensity $\lambda_t^i \geq 0$, which is "cadlag". One particular form for the intensity is Aalen's multiplicative model: $\lambda_t^i = \alpha(t)Y_t^i$, where $\alpha(\cdot)$ is deterministic function and Y_t^i is \mathcal{F}_t -predictable process. In practice, censoring indicators play the role of Y_t^i , i.e. the variable is 1 if the i -th subject is at risk and 0 otherwise.

The conditional distribution of the noise terms ε_i^k is denoted

$$(2) \quad F_s(z) = P(\varepsilon_i^{N_u^i+1} \leq z | \mathcal{F}_u, T_i^{N_u^i+1} = s),$$

and it is assumed that ε_i^k have conditional mean and variance given by

$$(3) \quad E(\varepsilon_i^{N_u^i+1} | \mathcal{F}_u, T_i^{N_u^i+1} = s) = 0,$$

$$(4) \quad E((\varepsilon_i^{N_u^i+1})^2 | \mathcal{F}_u, T_i^{N_u^i+1} = s) = \sigma^2(\mathbb{X}_i(s)),$$

where $\sigma^2(\cdot)$ is deterministic, continuous and bounded function.

2.2. **Estimation.** Let \mathcal{B} denote the Borel σ -field on \mathbb{R} . For $A \in \mathcal{B}$, define the counting process

$$(5) \quad N_s^i(A) = \sum_k I(Z_i^k \in A)I(T_i^k \leq s),$$

that counts the number of observations of "size- A " in the time interval $[0, t]$ for the i -th subject, and the associated marked point process $P^i(ds \times dz) : P^i([0, s] \times A) = N_s^i(A)$. Note the notation

$$\int_0^t \int H_i(s, z) P^i(ds \times dz) = \sum_k H_i(T_i^k, Z_i^k) I(T_i^k \leq t).$$

Our estimator $\hat{\theta}$ of θ_0 is based on the conditional weighted least squares. The objective function is

$$(6) \quad L(\theta, t) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{N_t^i} (Z_i^k - m(\theta, \mathbb{X}_i(T_i^k)))^2 W(\mathbb{X}_i(T_i^k)),$$

where $W(\cdot)$ is some weight function independent of θ . Denote

$$H_i(\theta, s, z) = \frac{1}{2}(z - m(\theta, \mathbb{X}_i(s)))^2 W(\mathbb{X}_i(s))$$

and (6) can be rewritten as

$$(7) \quad L(\theta, t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \int_0^t \int H_i(\theta, s, z) P^i(ds \times dz).$$

Denote $U(\theta, t) = ((\frac{d}{d\theta_k})L(\theta, t))_{k=1, \dots, d}$ and $I(\theta, t) = ((\frac{d^2}{d\theta_j d\theta_k})L(\theta, t))_{j, k=1, \dots, d}$. The estimator $\hat{\theta}$ is defined as a solution to the equations:

$$(8) \quad U(\theta, t) = 0.$$

Such a $\hat{\theta}$ does not necessarily minimize $L(\theta, t)$, it may not be a consistent estimator and may not exist. However, if we assume that there exists a unique maximum for $L(\theta, t)$, the estimator is consistent.

Before giving the asymptotic results about the estimator of θ_0 , some further conditions must be stated. We discuss the specific model where the processes R_s^1, \dots, R_s^n are assumed to be independent and identically distributed. These assumptions could be weakened, for more general results see [6].

ASSUMPTION A

Assume that $m(\theta, x)$ is three times continuously differentiable in a neighborhood $B(\theta_0, r)$ around θ_0 .

ASSUMPTION B

Let further $W(\cdot)$, $E(\int_0^t \lambda_s^i ds)$ and the derivatives of $m(\cdot, \cdot)$ in a neighborhood $B(\theta_0, r)$ are bounded.

ASSUMPTION C

The processes

$$q_s^i := \frac{d}{d\theta_k} m(\theta_0, \mathbb{X}_i(s)) \frac{d}{d\theta_j} m(\theta_0, \mathbb{X}_i(s)) W(\mathbb{X}_i(s)) \lambda_s^i$$

and

$$Q_s^i := \frac{d}{d\theta_k} m(\theta_0, \mathbb{X}_i(s)) \frac{d}{d\theta_j} m(\theta_0, \mathbb{X}_i(s)) \sigma^2(\mathbb{X}_i(s)) W^2(\mathbb{X}_i(s)) \lambda_s^i$$

satisfy

$$E \left(\sup_{s \in [0, t]} |q_s^i| \right) < \infty, \quad E \left(\sup_{s \in [0, t]} |Q_s^i| \right) < \infty$$

for all $i = 1, \dots, n$, and $j, k = 1, \dots, d$.

Assume further that there exist non-negative definitive symmetric matrices Σ_I, Σ_U such that $\Sigma_I = \left(E(\int_0^t q_s^i ds) \right)_{j, k=1, \dots, d}$ and $\Sigma_U = \left(E(\int_0^t Q_s^i ds) \right)_{j, k=1, \dots, d}$.

The following theorems give the asymptotic results about the estimator $\hat{\theta}$. All proofs can be found in [6].

Theorem 1:

Under the assumptions A-C there exists a consistent solution to $U(\theta, t) = 0$, that provides a local minimum of $L(\theta, t)$ with probability tending to one. \square

Theorem 2:

Under the assumptions A-C and with $\hat{\theta}$ a consistent solution of $U(\theta, t) = 0$, one has

$$\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta_0) \xrightarrow{D} N(0, \Sigma_I^{-1} \Sigma_U \Sigma_I^{-1}).$$

Further $-I(\hat{\theta}, t)$ and $\hat{\Sigma}_U$ provide consistent estimates of Σ_I and Σ_U respectively, where $\hat{\Sigma}_U := \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \int_0^t \int \left(\frac{d}{d\theta_j} H_i(\hat{\theta}, s, z) \right) \left(\frac{d}{d\theta_k} H_i(\hat{\theta}, s, z) \right) P^i(ds \times dz) \right)_{j,k=1, \dots, d}$. \square

The following result is of interest for the purpose of testing a simple hypothesis $H : \theta = \theta_0$ against the composite alternative $G : \theta \neq \theta_0$. Let $W_d(\Sigma)$ denote the Wishart distribution corresponding to a d -dimensional normal distribution $N(0, \Sigma)$.

Theorem 3:

Under the hypothesis H and under the assumptions A-C and if $\hat{\theta}$ is a consistent solution of $U(\theta, t) = 0$ one has

$$n(L(\hat{\theta}, t) - L(\theta_0, t)) \xrightarrow{D} W_d \left(\frac{1}{2} \Sigma_I^{-1/2} \Sigma_U \Sigma_I^{-1/2} \right).$$

\square

When the conditional variance $\sigma^2(\cdot)$ of the error term ε_i^j is a known function, a natural choice of the weight function is $W(\cdot) = \frac{1}{\sigma^2(\cdot)}$.

Theorem 4:

The asymptotic variance of $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta_0)$ is minimized by choosing the weight function $W(\cdot)$ as the inverse of the conditional variance, $\frac{1}{\sigma^2(\cdot)}$; that is $\Sigma^{opt} \leq \Sigma_I^{-1} \Sigma_U \Sigma_I^{-1}$, where Σ^{opt} is the asymptotic variance of $\sqrt{n}(\hat{\theta} - \theta_0)$ for the choice $W(\cdot) = \frac{1}{\sigma^2(\cdot)}$. \square

The conditional variance, $\sigma^2(\cdot)$ is usually unknown and in some cases one can replace $\sigma^2(\cdot)$ by a uniformly consistent estimator, $\hat{\sigma}^2(\cdot)$, and still obtain the theorems of this section. In the case of Aalen’s multiplicative intensity model, Sheike in [6] proposed a non-parametric estimator of $\sigma^2(\cdot)$, which is uniformly consistent under some regularity conditions. An estimator is $\hat{\sigma}^2(y) = \frac{\hat{V}(y)}{\hat{\sigma}(y)}$, where

$$\begin{aligned} \hat{V}(y) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{N_t^i} (Z_i^j)^2 - (\hat{m}(y))^2 \frac{1}{\beta} K(y - \mathbb{X}_i(T_i^j), b) \frac{J^i(T_i^j)}{Y_{T_i^j}^i}, \\ \hat{\sigma}(y) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{N_t^i} \frac{1}{\beta} K(y - \mathbb{X}_i(T_i^j), b) \frac{J^i(T_i^j)}{Y_{T_i^j}^i}. \end{aligned}$$

$K(\cdot)$ is a d -dimensional kernel, $b = (b_1, \dots, b_d)$ is a bandwidth, $\beta = b_1 \dots b_d$ and $J^i(s) = I(Y_s^i > 0)$. The kernel estimation of the regression function (see [7]) is defined as

$$\hat{m}(y) = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{N_t^i} Z_i^j K(y - \mathbb{X}_i(T_i^j), b)}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{N_t^i} K(y - \mathbb{X}_i(T_i^j), b)}.$$

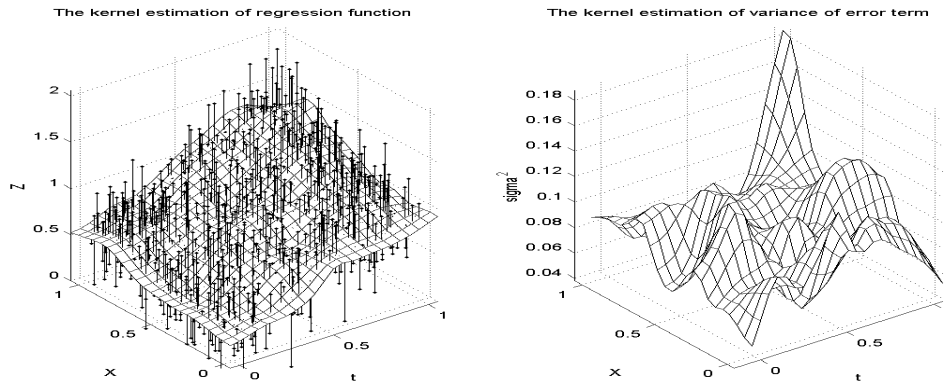
Sheike in [6] proved that under some "technical assumptions" and provided $\hat{\sigma}^2$ is a uniformly consistent estimator of the σ^2 , theorems 1-3 remain true for $W(\cdot) = \frac{1}{\hat{\sigma}^2}$.

3. SIMULATION STUDY

We studied the properties of our estimator in the following limited simulation study. We simulated a two-dimensional longitudinal data. Suppose the covariate process $\mathbb{X}_i(T_i^j) = (X_i(T_i^j), T_i^j)$, where X_i is an additional covariate for the i -th individual and T_i^j is the j -th random observation time of i -th individual.

The covariate processes X_i were generated from the random variables with density function $\frac{5}{6} + \frac{x}{3}$ for $x \in [0, 1]$. For each individual the observation times were generated from the Poisson process over the unit time period of $[0, 1]$ with parameter λ , where $\lambda = 10$, if the previous response value $Z_i^{j-1} < 0.8$, and $\lambda = 20$ otherwise. Notice that the random observation time depends on the value of the previous measurement. The response values were generated as $Z_i^j = \theta_1 + \theta_2 \cdot T_i^j + \theta_3 \cdot X_i^j + \varepsilon_i^j$, where $\theta_1 = 0.2$, $\theta_2 = 0.8$ and $\theta_3 = 0.4$ and ε_i^j has a normal distribution with mean zero and standard deviation 0.3. This linear regression model satisfies needed assumptions. We generate 80 individuals in the sample. On the average there are about 13 observations for each individual. Together we have got 1068 observations.

The following figure provides a plot of a non-parametric estimate of the regression function. The estimate of the conditional variance of the noise term $\sigma^2(\cdot)$ is plotted in the second figure. We used Gaussian kernel with bandwidth $b_1 = b_2 = 0.002$.



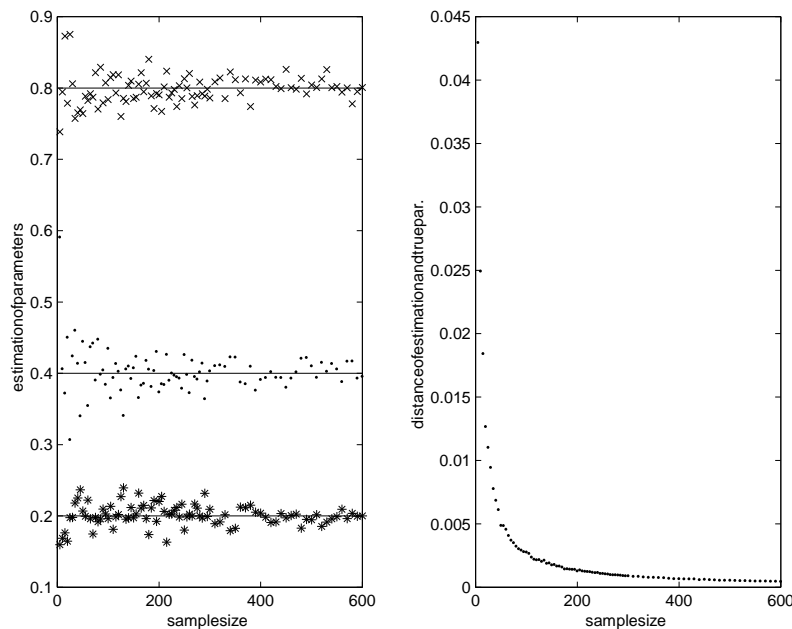
The estimation of θ_0 is done for two different choices of the weight function. The first weight function examined is $W(\cdot) \equiv 1$. For this choice the estimate of θ_0 and the estimate of their standard errors and correlations are given in the table:

i	Estimates $\hat{\theta}_i$	Standard errors $\sqrt{\text{var } \hat{\theta}_i}$	Estimated correlations		
			1	2	3
1	0.1912	0.0026	1	-0.6838	0.0285
2	0.8158	0.0034	-	1	-0.6401
3	0.3799	0.0034	-	-	1

The second choice of the weight function is $W(\cdot) = \frac{1}{\hat{\sigma}^2(\cdot)}$, where $\hat{\sigma}^2(\cdot)$ is the Sheike's estimate of $\sigma^2(\cdot)$. The weighted estimate of θ_0 , standard errors and correlations are given in this table:

i	Estimates $\hat{\theta}_i$	Standard errors $\sqrt{\text{var } \hat{\theta}_i}$	Estimated correlations		
			1	2	3
1	0.2019	0.0021	1	-0.6585	0.0123
2	0.8125	0.0029	-	1	-0.6397
3	0.3684	0.0028	-	-	1

The last pictures show the estimated parameters and the distance of the estimated parameter and its true value for different sample size. The estimate was computed for the choice of weights $W(\cdot) \equiv 1$.



4. SOME REMARKS

The Sheike's methods mesh well with the modeling in terms of the conditional distribution of the current observation given the past. When there is a strong time dependence, the conditional least square methods seem preferable to the generalized estimation equations. It was mentioned that the optimal choice of the weight function is the inverse of the conditional variance. Some caution has to be taken in choosing the smoothing parameters b . The appropriate choice of the bandwidth ensures that the regression function estimates are not too unstable and at the same time

do not introduce too much bias. A small difficulty arises from our non-parametric estimator: the bias is more severe at the edges of the data and therefore one must limit the results to nonedge areas.

REFERENCES

- [1] Fleming T.R., Harrington, D.P. (1991): Counting Processes and Survival Analysis. Wiley - Sons.
- [2] Jacobsen M. (1982): Statistical Analysis of Counting Processes. Springer-Verlag.
- [3] Lehmann E. (1983): Theory of Point Estimation. Wiley.
- [4] Martinussen, T., Scheike, T.H. (1998): A Non-Parametric Dynamic Additive Regression Model for Longitudinal Data. Research Report. Copenhagen.
- [5] Martinussen, T., Scheike, T.H. (1998): A Semi-Parametric Additive Regression Model for Longitudinal Data. Research Report. Copenhagen.
- [6] Scheike, T.H. (1994): Parametric Regression for Longitudinal Data with CP Measurement Times. Scandinavian Journal of Statistics 21.
- [7] Scheike, T.H., Zhang M. (1998): Cumulative Regression Tests for Longitudinal Data. Annals of Statistics.

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSK 83, 186 75 PRAHA
E-MAIL: orsakova@karlin.mff.cuni.cz

A CLASS OF TESTS ON THE TAIL INDEX USING THE MODIFIED EXTREME REGRESSION QUANTILES

JAN PICEK AND JANA JUREČKOVÁ

ABSTRAKT. Jurečková (1999) proposed a class of tests on the Pareto-type tail index of the distribution of errors in the linear regression model, based on the extreme regression quantiles. Regarding that there are not many tests on tails even in the location model, though they would be useful, we construct analogous tests on the Pareto index in the location model, modifying the *i. i. d.* observations into a two-samples model. The proposed tests are based on two extremes of a splitted sample, and on the empirical distribution functions of their mean. The main idea behind the tests is that the tails of the test criterion distinguish sharply between the heavy and light tails of the basic distribution.

The asymptotic null distribution of the test criterion is normal, the tests are consistent against the Pareto type tails with a larger index as well as against the exponential tails. The simulation study shows that the tests distinguish the tails already for moderate samples.

Abstrakt: Jurečková (2000) navrhla třídu testů indexu Paretových chvostů pro rozdělení chyb v lineárním regresním modelu. Testy je založeny na extrémních regresních kvantilech. V tomto příspěvku uvažujeme analogické testy pro model polohy. Simulační studie ukazuje, že testy rozlišují chvosty poměrně dobře i pro nepřilíš rozsáhlé výběry.

Резюме: Юречкова (2000) предложила класс критериев для индекса Паретого хвоста в модели линейной регрессии. Критерии выведены на основе крайних регрессионных квантилей. В этой статье мы конструируем класс аналогичных критериев в модели сдвига. Симулированный этюд показывает что работают хорошо тоже для небольшое выборки.

1. INTRODUCTION

If we are interested in the extremal events such as the high flood levels of the rivers or extreme values of environmental indicators, then we are rather interested in the tails of the underlying distribution than in its central part. A goodness-of-fit test would not provide us with a sufficient information on the shape of tails. Our first step would consist of a decision whether the underlying distribution function F is light- or heavy-tailed; the next steps would consist of a more precise study of its shape. The model is semiparametric in its nature, involving an unknown slowly varying function, besides the real-valued parameters of interest.

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62F03; Secondary 62J99.

Key words and phrases. Consistency of the test; Extreme values; Extreme regression quantiles; Pareto-type tails; Weibull-type tails.

The research of the first author was supported by the Ministry of Education of Czech Republic – the Research Project MSM 245100303. The research of the second author was supported by the Charles University Grant 161/1999/B MAT/MFF and by the Research Project MSM 113200008 "Mathematical Methods in Stochastics".

Let Y_1, \dots, Y_n be independent observations, identically distributed according to distribution function $F(y)$. We distinguish two broad classes of distributions corresponding to two types of tails of F :

- *Exponentially tailed F (type I)*: for some $b > 0$ and $r \geq 1$, F satisfies

$$(1.1) \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F(a))}{ba^r} = 1.$$

- *Heavy-tailed F (type II)*: for some $m > 0$, F satisfies

$$(1.2) \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F(a))}{m \log a} = 1.$$

A typical example of a distribution of type II is the Pareto distribution with the distribution function

$$F(x) = (1 - x^{-m})I[x \geq 1].$$

Applying the l'Hospital rule to (1.2) and taking the von Mises condition into account (see [2], Chapter 3), we get that the distributions of type II satisfy

$$(1.3) \quad 1 - F(x) = x^{-m}L(x), \quad x \in R$$

where $L(x)$ is a function, slowly varying at infinity.

We would like to test the hypothesis:

$$\mathbf{H}_{m_0} : F \text{ is of type II and } \underline{\lim}_{x \rightarrow \infty} [x^{m_0}(1 - F(x))] \geq 1$$

against the alternative

\mathbf{K}_{m_0} : the right tail of F is lighter than that of Pareto's distribution with index m_0 .

Generally, the problem of identifying the tails is semiparametric in nature, involving a nuisance slowly varying function.

Jurečková (2000) proposed a class of tests on the Pareto-type tail index of the distribution of the errors of the regression data, based on the extreme regression quantiles. Because there are not many tests in the literature, distinguishing between heavy and light tails even in the case of the i.i.d. observations, we construct analogous tests on the Pareto index in the location model, where we can apply the test proposed by Jurečková, after transforming the observations Y_1, \dots, Y_n into two samples, differing by a shift in location. A similar trick was used by Hájek (1970) for a construction of a partially adaptive rank test.

Let us modify the observations Y_1, \dots, Y_n , $n = 2\nu$, in the following way: Fix $\Delta > 0$ and put

$$(1.4) \quad Y_{in}^* = Y_i + c_{in}\Delta, \quad c_{in} = \begin{cases} +1, & i = 1, \dots, \nu \\ -1, & i = \nu + 1, \dots, n. \end{cases}$$

Hence, $Y_{1n}^*, \dots, Y_{nn}^*$ follow the linear regression model

$$(1.5) \quad Y_{in}^* = \theta + c_{in}\Delta + U_i, \quad i = 1, \dots, n$$

with $(p = 2)$ -dimensional parameter (θ, Δ) , where the i.i.d. errors U_i have d.f. F (and $\theta = 0$). Following Portnoy and Jurečková (1999), we shall define the *maximal regression quantile* for the model (1.5) as the solution $(\hat{\theta}, \hat{\Delta})$ of the minimization

$$(1.6) \quad \hat{\theta} = \min \quad \text{subject to} \quad \hat{\theta} + c_{in}(\hat{\Delta} - \Delta) \geq Y_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Solution of this simple minimization takes on the form

$$(1.7) \quad \hat{\theta} = \frac{Y_n^{(1)} + Y_n^{(2)}}{2},$$

$$(1.8) \quad \hat{\Delta} = \Delta + \frac{Y_n^{(1)} - Y_n^{(2)}}{2}$$

where $Y_n^{(1)} = \max\{Y_1, \dots, Y_\nu\}$ and $Y_n^{(2)} = \max\{Y_{\nu+1}, \dots, Y_n\}$.

Let us repeat the sample of size n independently N times, or partition the given data set into N independent samples of sizes n . Split every sample in the above manner and calculate the extremes of the respective subsamples. The test of \mathbf{H}_{m_0} is based on the empirical distribution functions of the averaged extremes of the splitted subsamples. The asymptotic power of the test is equal to 1 against the exponential tails and the test is consistent against the alternatives of lighter tails. The asymptotic null distribution of the test criterion is normal.

Another test of \mathbf{H}_{m_0} , based on the subsample extremes, is constructed by the same authors in [6].

The performance of the tests is illustrated on the simulated data; we see that they distinguish well the tails even for moderate samples. The proposed test is described in Section 2 along with the asymptotic null distributions of the test criterion and with a numerical illustration. The asymptotic null distribution is proved in Section 3 and Section 4 contains some consistency considerations.

2. THE TEST AND ITS NUMERICAL ILLUSTRATION

The test criterion for the hypothesis \mathbf{H}_{m_0} is based on the following construction:

Observe N independent samples of the fixed sizes $n = 2\nu$ and each of them order randomly; without loss of generality, let $\mathbf{Y}_j = (Y_{j1}, \dots, Y_{jn})'$, $j = 1, \dots, N$ denote already the samples after random permutations. Let

$$(2.1) \quad \hat{\theta}_j = \frac{1}{2}(\hat{Y}_j^{(1)} + \hat{Y}_j^{(2)}),$$

$$\hat{Y}_j^{(1)} = \max(Y_{j1}, \dots, Y_{j\nu}), \quad \hat{Y}_j^{(2)} = \max(Y_{j,\nu+1}, \dots, Y_{jn}), \quad j = 1, \dots, N.$$

Then $(\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_N)$ is a random sample from distribution F^* (say); denote \hat{F}_N^* the corresponding empirical distribution function, *i.e.*

$$(2.2) \quad \hat{F}_N^*(a) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N I[\hat{\theta}_j \leq a].$$

Put

$$(2.3) \quad a_{N,m} = \frac{1}{2} N^{\frac{1-\delta}{m}} n^{\frac{1}{m}}, \quad 0 < \delta < 1, \quad m > 0.$$

We propose the test with the critical region

$$(2.4) \quad \left\{ (\mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_N) : \text{either } 1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) = 0 \right. \\ \left. \text{or } 1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) > 0 \quad \text{and} \right. \\ \left. N^{\delta/2} \left[-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N \right] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha) \right\}$$

for testing \mathbf{H}_{m_0} against \mathbf{K}_{m_0} ; Φ is the standard normal *d.f.* and $\alpha \in (0, 1)$ is the asymptotic significance level. The asymptotic distribution of the test criterion (2.4) under \mathbf{H}_{m_0} is given in the following theorem:

Theorem 2.1. *Let $\mathbf{Y}_j = (Y_{j1}, \dots, Y_{jn})'$, $j = 1, \dots, N$ be independent, randomly ordered samples from a population with distribution function F and density f ,*

$F(x) < 1$, $\forall x \in \mathbb{R}$ and F being strictly monotone on the set $\{x : 0 < F(x) < 1\}$.
Let $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_N$ be the statistics defined in (2.1).

Then, if $x^{m_0}(1 - F(x)) \rightarrow 1$ as $x \rightarrow \infty$,

$$(2.5) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} P_{m_0} \left(0 < \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) < 1 \right) = 1, \quad a_{N,m_0} = \frac{1}{2} N^{\frac{1-\delta}{m_0}} n^{\frac{1}{m_0}}, \quad 0 < \delta < 1$$

and

$$(2.6) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} P_{m_0} \left\{ N^{\delta/2} \left[-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N \right] \geq x, \right. \\ \left. 0 < \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) < 1 \right\} = 1 - \Phi(x), \quad x \in \mathbb{R}.$$

The test rejecting $\mathbf{H}_{m_0} : 0 < m \leq m_0$ provided

$$(2.7) \quad N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha)$$

has the asymptotic size α for the whole \mathbf{H}_{m_0} , i.e.

$$(2.8) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} P \left\{ N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha) \right\} \leq \alpha$$

for all F satisfying \mathbf{H}_{m_0} .

Proof: The proof of the theorem is postponed to Section 3.

Let us illustrate the performance of the test on the simulated random samples:
The replications ($N=25$, $N=50$ and $N=100$) of samples with sizes $n = 10$, $n = 20$,
 $n = 50$ were simulated 1000 times from the following distributions:

$$\text{Normal } \mathcal{N}(0, 1) \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad x \in \mathbb{R}$$

$$\text{Student } t_m, \quad m = 2, 5 \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{m} B\left(\frac{1}{2}, \frac{m}{2}\right)} \left(1 + \frac{x^2}{m}\right)^{-(m+1)/2}, \quad x \in \mathbb{R}$$

$$\text{Pareto } m = 1, 3 \quad f(x) = \frac{m}{x^{m+1}}, \quad x \geq 1$$

$$\text{Cauchy } (0, 1) \quad f(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Notice that $\lim_{x \rightarrow \infty} x^m(1 - F(x)) = A_m = \frac{\frac{m}{2} - 1}{B\left(\frac{m}{2}, \frac{1}{2}\right)}$ for the Student t_m .

Tables 1 – 4 give the numbers of non-rejections (among 1000 tests) of \mathbf{H}_{m_0} for $m_0 = 1, \dots, 5$, for the above distributions of observations, for $\delta = 0.1$ and 0.5 , and for various n a N . The bold digits in the tables mean that \mathbf{H}_{m_0} is satisfied for the distribution under the simulation.

Table 1.
Numbers of non-rejections of \mathbf{H}_{m_0} among 1000 cases on level $\alpha = 0.05$
 $N=25, n=10$

Real distribution	δ	$m_0 = 1$	$m_0 = 2$	$m_0 = 3$	$m_0 = 4$	$m_0 = 5$	$m_0 = 6$
Normal	0.1	0	0	0	0	1	2
	0.5	0	0	0	0	0	0
Student- t_2	0.1	35	428	817	952	984	995
	0.5	6	424	819	938	970	984
Student- t_5	0.1	0	3	42	155	303	440
	0.5	0	0	12	63	136	220
Pareto- $m=1$	0.1	981	1000	1000	1000	1000	1000
	0.5	1000	1000	1000	1000	1000	1000
Pareto- $m=3$	0.1	1	79	384	707	880	947
	0.5	0	58	441	778	909	964
Cauchy	0.1	694	992	1000	1000	1000	1000
	0.5	819	1000	1000	1000	1000	1000

Table 2.
Numbers of non-rejections of \mathbf{H}_{m_0} among 1000 cases on level $\alpha = 0.05$
 $N=25, n=20$

Real distribution	δ	$m_0 = 1$	$m_0 = 2$	$m_0 = 3$	$m_0 = 4$	$m_0 = 5$	$m_0 = 6$
Normal	0.1	0	0	0	0	2	10
	0.5	0	0	0	0	2	2
Student- t_2	0.1	60	740	987	1000	1000	1000
	0.5	76	923	998	1000	1000	1000
Student- t_5	0.1	0	5	109	403	670	840
	0.5	0	1	138	452	712	847
Pareto- $m=1$	0.1	1000	1000	1000	1000	1000	1000
	0.5	1000	1000	1000	1000	1000	1000
Pareto- $m=3$	0.1	3	191	697	956	997	1000
	0.5	1	345	938	997	1000	1000
Cauchy	0.1	932	1000	1000	1000	1000	1000
	0.5	997	1000	1000	1000	1000	1000

Table 3.
Numbers of non-rejections of \mathbf{H}_{m_0} among 1000 cases on level $\alpha = 0.05$
 $N=50, n=20$

Real distribution	δ	$m_0 = 1$	$m_0 = 2$	$m_0 = 3$	$m_0 = 4$	$m_0 = 5$	$m_0 = 6$
Normal	0.1	0	0	0	0	0	3
	0.5	0	0	0	0	0	0
Student- t_2	0.1	33	733	993	1000	1000	1000
	0.5	6	952	1000	1000	1000	1000
Student- t_5	0.1	0	1	74	328	642	866
	0.5	0	0	52	418	789	930
Pareto- $m=1$	0.1	1000	1000	1000	1000	1000	1000
	0.5	1000	1000	1000	1000	1000	1000
Pareto- $m=3$	0.1	0	134	660	970	999	1000
	0.5	0	168	962	999	1000	1000
Cauchy	0.1	924	1000	1000	1000	1000	1000
	0.5	999	1000	1000	1000	1000	1000

Table 4.
Numbers of non-rejections of \mathbf{H}_{m_0} among 1000 cases on level $\alpha = 0.05$
 $N=100, n=50$

Real distribution	δ	$m_0 = 1$	$m_0 = 2$	$m_0 = 3$	$m_0 = 4$	$m_0 = 5$	$m_0 = 6$
Normal	0.1	0	0	0	0	0	1
	0.5	0	0	0	0	0	0
Student- t_2	0.1	43	980	1000	1000	1000	1000
	0.5	24	1000	1000	1000	1000	1000
Student- t_5	0.1	0	4	129	650	976	1000
	0.5	0	0	439	999	1000	1000
Pareto- $m=1$	0.1	1000	1000	1000	1000	1000	1000
	0.5	1000	1000	1000	1000	1000	1000
Pareto- $m=3$	0.1	1	236	959	1000	1000	1000
	0.5	0	693	1000	1000	1000	1000
Cauchy	0.1	1000	1000	1000	1000	1000	1000
	0.5	1000	1000	1000	1000	1000	1000

3. PROOF OF THE ASYMPTOTIC NULL DISTRIBUTION

Let Y_1, \dots, Y_n be randomly ordered observations, $n = 2\nu$ and let $\hat{\theta}$ be defined in (1.7). Define the measure of the tail behavior of $\hat{\theta}$ as the function

$$(3.2) \quad B^*(a) = \frac{-\log P_\theta \left(\frac{1}{2}(\hat{\theta} - \theta) \geq a \right)}{-\log(1 - F(a))} = \frac{-\log P_0(Y^{(1)} + Y^{(2)} \geq 4a)}{-\log(1 - F(a))}, \quad a \geq 0.$$

Similar measure was considered in [4] and later in [8] in the context of *extreme regression quantiles*, to which $\hat{\theta}$ closely relates. We shall first show that the tail behavior of $\hat{\theta}$ (1.7) distinguishes sharply between the two types of tails, while the extreme of the whole sample is insensitive to the tails.

Lemma 3.1. *Assume that the distribution function F of $Y_i - \theta$, $i = 1, \dots, n$ satisfies $F(x) < 1$, $x \in \mathbb{R}$ and is strictly increasing on the set $\{x : 0 < F(x) < 1\}$. Then*

$$(3.3) \quad 2^r \leq \underline{\lim}_{a \rightarrow \infty} B^*(a) \leq \overline{\lim}_{a \rightarrow \infty} B^*(a) \leq 2^{r+1} \quad \text{for } F \text{ of type I}$$

$$\lim_{a \rightarrow \infty} B^*(a) = 1 \quad \text{for } F \text{ of type II.}$$

On the other hand,

$$(3.4) \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{-\log P_0(\max(Y_1, \dots, Y_n) \geq a)}{-\log(1 - F(a))} = 1$$

for F of both types I and II.

Proof. We have

$$(3.5) \quad P_0(Y^{(1)} + Y^{(2)} > 4a) \leq P_0(Y^{(1)} > 2a) + P_0(Y^{(2)} > 2a) = 2(1 - F^\nu(2a)),$$

hence

$$(3.6) \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{-\log P_0(Y^{(1)} + Y^{(2)} > 4a)}{-\log(1 - F(a))} \geq \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{-\log(1 - F(2a))}{-\log(1 - F(a))}.$$

On the other hand,

$$(3.7) \quad P_0(Y^{(1)} + Y^{(2)} > 4a) \geq P_0(Y^{(1)} > 2a) P_0(Y^{(2)} > 2a) = (1 - F^\nu(2a))^2,$$

hence

$$(3.8) \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{-\log P_0(Y^{(1)} + Y^{(2)} > 4a)}{-\log(1 - F(a))} \leq \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{-2 \log(1 - F(2a))}{-\log(1 - F(a))}.$$

and that leads to (3.3) for F of type I and II, respectively.

For the maximum of the whole sample we get

$$(3.9) \quad P_0 \left(\max_{1 \leq i \leq n} Y_i \geq a \right) = 1 - F^n(a) = (1 - F(a))(1 + F(a) + \dots + F^{n-1}(a))$$

hence

$$1 - F(a) \leq P_0 \left(\max_{1 \leq i \leq n} Y_i \geq a \right) \leq n(1 - F(a)),$$

what implies (3.4). □

Remark. Lemma 3.1 shows that the tail behavior of the sample maximum does not distinguish between types I and II.

Proof of Theorem 2.1. Let first F have exactly the Pareto tail with index m_0 , i.e.

$$(3.10) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} [x^{m_0}(1 - F(x))] = 1.$$

Then, because $\hat{\theta}_1$ is an average of two extremes, it follows e.g. from Lemma 1.3.1 in [3] (see also Lemma A3.26 in [2]) that *d.f.* F^* satisfies

$$(3.11) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} [x^{m_0}(1 - F^*(x))] = \frac{n}{2^{m_0}}.$$

$(\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_N)$ is a random sample from *d.f.* F^* and F^* belongs to the maximum domain of attraction of the Fréchet distribution with the distribution function

$$(3.12) \quad \Phi_{m_0}(x) = \exp \left\{ -\frac{1}{x^{m_0}} \right\} I[x > 0]$$

hence,

$$(3.13) \quad P\left(\xi_N^{-1}\hat{\theta}_1 \leq x\right) \rightarrow \Phi_{m_0}(x)$$

as $N \rightarrow \infty$ with ξ_N satisfying $\lim_{N \rightarrow \infty} [N(1 - F^*(\xi_N))] = 1$; thus $\xi_N = \frac{1}{2}(nN)^{1/m_0}$. Denote $\hat{\theta}^{(N)} = \max\{\hat{\theta}_j, j = 1, \dots, N\}$ and $\hat{\theta}^{(1)} = \min\{\hat{\theta}_j, j = 1, \dots, N\}$. Then (3.13) implies that

$$(3.14) \quad P_m\left(\hat{\theta}^{(N)} < a_{N,m_0}\right) = P_m\left(\xi_N^{-1}\hat{\theta}^{(N)} \leq 2N^{-\delta/m_0}\right) \rightarrow 0 \quad \text{as } N \rightarrow \infty$$

for a_{N,m_0} defined in (2.3). Similarly we conclude that $P_m\left(\hat{\theta}^{(1)} > a_{N,m_0}\right) \rightarrow 0$ as $N \rightarrow \infty$. This further implies that (2.5) holds provided F has Pareto tails with index m_0 .

If $1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) > 0$, then

$$(3.15) \quad \begin{aligned} & N^{1/2} \left(\frac{1 - F^*(a_{N,m_0})}{F^*(a_{N,m_0})} \right)^{1/2} \left\{ -\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) + \log(1 - F^*(a_{N,m_0})) \right\} \\ &= N^{1/2} [F^*(a_{N,m_0})(1 - F^*(a_{N,m_0}))]^{-1/2} [\hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) - F^*(a_{N,m_0})] \\ & \quad + O_p(N^{-\delta/2}). \end{aligned}$$

If we apply Theorem 4, Chapter VIII, in [7] (Cramér type large deviations) to the triangular array $(I[\hat{\theta}_1 \leq 2a_{N,m_0}] - F^*(a_{N,m_0}), \dots, I[\hat{\theta}_N \leq 2a_{N,m_0}] - F^*(a_{N,m_0}))$, $N = 1, 2, \dots$ and take (2.5) into account, we conclude that, given $\varepsilon > 0$, there exists N_0 such that, for $N > N_0$,

$$(3.16) \quad \begin{aligned} & P_{m_0} \left\{ N^{1/2} \left(\frac{1 - F^*(a_{N,m_0})}{F^*(a_{N,m_0})} \right)^{1/2} \left[-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \log(1 - F^*(a_{N,m_0})) \right] \geq x \right\} \\ & \leq P_{m_0} \left\{ N^{1/2} \left(\frac{1 - F^*(a_{N,m_0})}{F^*(a_{N,m_0})} \right)^{1/2} \left[-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \log(1 - F^*(a_{N,m_0})) \right] \geq x, 1 - F^*(a_{N,m_0}) > 0 \right\} + \varepsilon \\ & = [1 - \Phi(x)](1 + o(1)) + \varepsilon \end{aligned}$$

for $x = o(N^{1/6})$. Hence, regarding (3.11), we conclude

$$\begin{aligned} & P_{m_0} \left\{ N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq x, 1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) > 0 \right\} \\ & \rightarrow (1 - \Phi(x)) \quad \text{as } N \rightarrow \infty, x \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

and we arrive at (2.6). Further,

$$(3.17) \quad P_{m_0} \left\{ N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha) \right\} \rightarrow \alpha$$

as $N \rightarrow \infty$. If F has a heavier tail than Pareto with index m_0 , then $1 - F_N^*$ is ultimately stochastically larger than in the exact Pareto case, hence

$$(3.18) \quad \begin{aligned} & P \left\{ N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha) \right\} \\ & \leq P_{m_0} \left\{ N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha) \right\} \rightarrow \alpha \end{aligned}$$

as $N \rightarrow \infty$; this means that the test (2.4) is of asymptotic size α for the whole hypothesis \mathbf{H}_{m_0} . \square

4. CONSISTENCY OF THE TEST

If F has a lighter right tail than Pareto with index m_0 , then $1 - \hat{F}_N^*$ is ultimately stochastically smaller than in the exact Pareto case and it follows from (3.17) that

$$(4.1) \quad \begin{aligned} & \underline{\lim}_{n \rightarrow \infty} P \left\{ N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha) \right\} \\ & \geq \alpha, \end{aligned}$$

hence the test is asymptotically unbiased against alternative K_{m_0} .

Let now F be of type II (1.2) with index $m > m_0$; let F^* be the corresponding distribution function of $\hat{\theta}$. Then Lemma 3.1 implies that, given an $\varepsilon > 0$, there exists N_0 such that, for $N > N_0$,

$$(4.2) \quad a_{N,m_0}^{-m(1+\varepsilon)} \leq 1 - F^*(a_{N,m_0}) \leq a_{N,m_0}^{-m(1-\varepsilon)}$$

If $1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) = 0$, we reject the hypothesis. Let $1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0}) > 0$; then it follows from [1] that there exists a Brownian bridge \mathcal{B}_N depending on $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_N$ such that for $N > N_0$

$$(4.3) \quad \begin{aligned} & N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \\ & = N^{\delta/2} \left[-\log \left(\frac{1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})}{1 - F^*(a_{N,m_0})} - 1 + 1 \right) \right] \\ & + N^{\delta/2} \left(\frac{-\log(1 - F^*(a_{N,m_0}))}{m \log a_{N,m_0}} m \log a_{N,m_0} - (1 - \delta) \log N \right) \\ & \geq N^{-\frac{1-\delta}{2}} \left| \mathcal{B}_N(F^*(a_{N,m_0})) \right| a_{N,m_0}^{m(1-\varepsilon)} \\ & + (1 - \delta) N^{\delta/2} \log N \left((1 - \varepsilon) \frac{m}{m_0} - 1 \right) + O_p(N^{-\delta/2}) \end{aligned}$$

hence

$$(4.4) \quad P \left\{ N^{\delta/2} [-\log(1 - \hat{F}_N^*(a_{N,m_0})) - (1 - \delta) \log N] \geq \Phi^{-1}(1 - \alpha) \right\} \rightarrow 1$$

as $N \rightarrow \infty$, and we reject \mathbf{H}_{m_0} with probability tending to 1.

REFERENCE

- [1] Csörgő, M. and Révész, P. (1981), *Strong Approximations in Probability and Statistics* (Akadémiai Kiadó, Budapest).
- [2] Embrechts, P., Klüppelberg, C. and Mikosch, T. (1997), *Modelling of Extremal Events in Insurance and Finance* (Springer).
- [3] Feller, W. (1971), *An Introduction to Probability Theory and its Applications II* (Wiley).
- [4] He, X., Jurečková, J., Koenker, R. and Portnoy, S. (1990), Tail behavior of regression estimators and their breakdown points, *Econometrica* **58**, 1195–1214.
- [5] Jurečková, J. (2000), Test of tails based on extreme regression quantiles, *Statist. & Probab. Letters* **49**, 53–61.
- [6] Jurečková, J., Picek, J. (2000), A class of tests on the tail index, *Extremes* (to appear).
- [7] Petrov, V. V. (1972), *Sums of Independent Random Variables* (in Russian) (Nauka, Moscow).
- [8] Portnoy, S. and Jurečková, J. (1999), On extreme regression quantiles, *Extremes* 2:3, 227–243).

DEPARTMENT OF APPLIED MATHEMATICS, TECHNICAL UNIVERSITY OF LIBEREC, HÁLKOVA 6,
CZ–461 17 LIBEREC, CZECH REPUBLIC

E-mail address: jan.picek@vslib.cz

CHARLES UNIVERSITY OF PRAGUE, DEPARTMENT OF PROBABILITY AND STATISTICS, SOKOLOVSKÁ 83,
CZ–186 75 PRAHA 8, CZECH REPUBLIC

E-mail address: jana.jureckovak@karlin.mff.cuni.cz

METODA SUBSAMPLING A JEJÍ APLIKACE V ČASOVÝCH ŘADÁCH

ZUZANA PRÁŠKOVÁ

ABSTRAKT. In the paper, some basic results concerning subsampling in time series are reviewed. The method is then applied to estimate parameters of autoregressive model with heteroscedasticities and consistency of such estimators is proved.

Резюме: В этой статье изучается применение метода подвыборки к анализу временных рядов. Показывается состоятельность оценок параметров процесса авторегрессии в случае неодинакового распределённых ошибок.

1. ÚVOD

Mějme pozorování náhodných veličin X_1, \dots, X_n , které nutně nemusí být nezávislé a stejně rozdělené; nechť $\hat{\theta}_n$ je odhad neznámého parametru θ spočtený z pozorování X_1, \dots, X_n , tj. $\hat{\theta}_n = \hat{\theta}_n(X_1, \dots, X_n)$, a nechť $R_n = R_n(X_1, \dots, X_n)$ je statistika, na které je založeno statistické usuzování o $\hat{\theta}_n$.

V našem příspěvku budeme uvažovat statistiku $R_n = \tau_n(\hat{\theta}_n - \theta)$, kde τ_n je konstanta závislá jen na n ; nejčastěji se volí $\tau_n = \sqrt{n}$. Zabývat se budeme aproximací distribuční funkce statistiky R_n a odhadem rozptylu $\hat{\theta}_n$ metodou subsampling.

Na rozdíl od metody bootstrap, která je založena na mnohonásobném opakování prostého náhodného výběru s vracením ze souboru X_1, \dots, X_n (čtenáře, který se chce více dozvědět o metodě bootstrap, zde odkazujeme na monografie Efron a Tibshirani (1993) nebo Shao a Tu (1995)), spočívá metoda subsampling v práci s menšími soubory dat, které vybereme určitým způsobem z X_1, \dots, X_n . Způsob, jakým budou tyto podsoubory pořízeny, je jiný pro nezávislá pozorování a jiný pro závislá data, např. pro časové řady. Těmi se budeme zabývat podrobněji, nejdříve však uvedeme základní známé výsledky metody subsampling pro nezávislá pozorování.

2. METODA SUBSAMPLING PRO NEZÁVISLÁ POZOROVÁNÍ

Nechť X_1, \dots, X_n jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny s distribuční funkcí F , $\theta = \theta(F)$ je neznámý parametr a $\hat{\theta}_n$ jeho odhad. Nechť $\mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_N$ jsou všechny možné podsoubory o rozsahu $b < n$ pořízené prostým náhodným výběrem bez vracení ze souboru X_1, \dots, X_n , tj.

$$\mathbf{Y}_i = (X_1^{(i)}, \dots, X_b^{(i)}), \quad i = 1, \dots, N,$$

kde $N = N_{n,b} = \binom{n}{b}$. Nechť $\hat{\theta}_{n,b,i}$ je odhad θ spočtený z výběru \mathbf{Y}_i . Potom rozdělení

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62F40; Secondary 62M10.

Klíčová slova. Subsampling; strong mixing.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR č. 201/00/0769 a výzkumného záměru MŠMT č. MSM 113200008.

$$(1) \quad H_n(x) = P[\tau_n(\hat{\theta}_n - \theta) \leq x]$$

je aproximováno empirickým rozdělením založeným na hodnotách $\tau_b(\hat{\theta}_{n,b,i} - \hat{\theta}_n)$, tj. empirickou distribuční funkcí

$$(2) \quad L_{n,b}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N I[\tau_b(\hat{\theta}_{n,b,i} - \hat{\theta}_n) \leq x],$$

kde $I[A]$ značí indikátor množiny A .

Poznámka 1. V náhodném výběru s vrácením, který teoreticky připouští metoda bootstrap, je $N = n^n$.

Konzistence tohoto postupu je zaručena následující větou (Politis, Romano a Wolf (1999), Theorem 2.2.1).

Věta 1. *Nechť H je distribuční funkce taková, že*

$$H_n \rightarrow H \text{ slabě, když } n \rightarrow \infty,$$

dále nechť $b \rightarrow \infty$, $\frac{b}{n} \rightarrow 0$, $\frac{\tau_b}{\tau_n} \rightarrow 0$. Platí následující tvrzení.

(i) *Jestliže x je bod spojitosti H , potom*

$$L_{n,b}(x) \rightarrow H(x) \text{ v pravděpodobnosti.}$$

(ii) *Jestliže H je spojitá, potom*

$$\sup_x |L_{n,b}(x) - H_n(x)| \rightarrow 0 \text{ v pravděpodobnosti.}$$

(iii) *Nechť $\alpha \in (0, 1)$ a nechť $c(1 - \alpha)$ je $(1 - \alpha)$ -kvantil rozdělení H a $c_{n,b}(1 - \alpha)$ je $(1 - \alpha)$ -kvantil rozdělení $L_{n,b}$. Jestliže H je spojitá v $c(1 - \alpha)$, potom*

$$P[\tau_n(\hat{\theta}_n - \theta) \leq c_{n,b}(1 - \alpha)] \rightarrow 1 - \alpha.$$

3. SUBSAMPLING VE STACIONÁRNÍCH ČASOVÝCH ŘADÁCH

Nyní předpokládejme, že X_1, \dots, X_n jsou pozorování striktně stacionární náhodné posloupnosti $\{X_t\}_{-\infty}^{\infty}$, která má vlastnost *strong mixing* (jinak též *α -mixing*), tj. platí $\alpha_X(m) \rightarrow 0$ pro $m \rightarrow \infty$, kde koeficient $\alpha_X(m)$ je definovaný předpisem

$$\alpha_X(m) = \sup_n \sup_{A \in \mathcal{F}_{-\infty}^n, B \in \mathcal{F}_{m+n}^{\infty}} |P(A \cap B) - P(A)P(B)|,$$

a $\mathcal{F}_n^m = \sigma\{X_n, \dots, X_m\}$ je σ -algebra generovaná náhodnými veličinami X_n, \dots, X_m . Z předpokladu striktní stacionarity plyne, že všechny náhodné veličiny X_t mají stejné rozdělení, nemusí však být nezávislé.

Pořadí náhodných veličin je v tomto případě důležité, proto chceme-li použít metodu subsampling, nelze postupovat jako v případě nezávislých stejně rozdělených náhodných veličin a uvažovat všechny možné výběry bez vrácení o rozsahu b ze souboru X_1, \dots, X_n . V tomto případě se uvažují klouzavé bloky délky b , $(X_1, \dots, X_b), \dots, (X_{n-b+1}, \dots, X_n)$, v bloku (X_t, \dots, X_{t+b-1}) se stanoví odhad $\hat{\theta}_{n,b,t}$ parametru θ a rozdělení H_n definované v (1) se aproximuje rozdělením

$$(3) \quad L_{n,b}(x) = \frac{1}{n-b+1} \sum_{t=1}^{n-b+1} I[\tau_b(\hat{\theta}_{n,b,t} - \hat{\theta}_n) \leq x].$$

Náhodné vektory (X_t, \dots, X_{t+b-1}) pro $t = 1, \dots, n - b + 1$ mají vzhledem ke striktní stacionaritě stejné rozdělení a lze ukázat, že tvrzení (i) – (iii) Věty 1 platí i pro striktně stacionární posloupnosti s vlastností strong mixing a pro distribuční funkci (3) (viz Politis, Romano a Wolf (1999), Theorem 3.2.1).

Rozptyl empirického rozdělení (3) je $(n - b + 1)^{-1} \sum_{t=1}^{n-b+1} \tau_b^2 (\hat{\theta}_{n,b,t} - \bar{\theta}_b)^2$, kde

$$\bar{\theta}_b = \frac{1}{n - b + 1} \sum_{t=1}^{n-b+1} \hat{\theta}_{n,b,t},$$

je tedy přirozené odhadnout rozptyl $\hat{\theta}_n$ jako

$$(4) \quad \hat{V}_{n,b}^{(1)} = \frac{\tau_b^2}{\tau_n^2} \frac{1}{n - b + 1} \sum_{t=1}^{n-b+1} (\hat{\theta}_{n,b,t} - \bar{\theta}_b)^2.$$

Pro $n = kb$ a nepřekrývající se bloky délky b , tj. pro vektory $(X_{(i-1)b+1}, \dots, X_{ib})$ a $i = 1, \dots, k$, dostaneme odhad

$$(5) \quad \hat{V}_{n,b}^{(2)} = \frac{\tau_b^2}{\tau_n^2} \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (\hat{\theta}_{n,b,i} - \tilde{\theta}_b)^2,$$

kde

$$\tilde{\theta}_b = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \hat{\theta}_{n,b,i}$$

a $\hat{\theta}_{n,b,i}$ je odhad v i -tém bloku. Podmínky konzistence těchto odhadů byly studovány různými autory a jsou shrnuty v Politis, Romano a Wolf (1999), Lemma 3.8.1.

Při použití metody subsampling vzniká problém jak stanovit délku bloku, neboť věty o konzistenci jsou formulovány za předpokladu $b \rightarrow \infty$ a $\frac{b}{n} \rightarrow \infty$ pro $n \rightarrow \infty$.

Např. rozptyl výběrového průměru $\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$, kde X_1, \dots, X_n jsou pozorování striktně stacionární posloupnosti se střední hodnotou $E X_1 = \theta$ a autokovarianční funkcí $R(k) = E(X_{k+1} - \theta)(X_1 - \theta)$, je

$$(6) \quad \text{Var} \bar{X}_n = \frac{1}{n} \left[R(0) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} \left(1 - \frac{k}{n}\right) R(k) \right]$$

a $n \text{Var} \bar{X}_n \rightarrow \sigma_\infty^2$ pro $n \rightarrow \infty$ a $\sum_{k=-\infty}^{\infty} |R(k)| < \infty$, kde $\sigma_\infty^2 = \sum_{k=-\infty}^{\infty} R(k)$ (Brockwell a Davis (1991), Věta 7.1.1). Pokud autokovarianční funkci neznáme, můžeme $\text{Var} \bar{X}_n$ odhadnout tak, že do vzorce (6) dosadíme výběrové autokovariance

$$\hat{R}(k) = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n-k} (X_t - \bar{X}_n)(X_{t+k} - \bar{X}_n).$$

Pro velké hodnoty k (blízké n) však jsou odhady $\hat{R}(k)$ značně nepřesné.

Pro odhady (4) a (5) zkráceně označené jako $\hat{V}^{(1)}$, $\hat{V}^{(2)}$ v tomto případě platí, že $n \hat{V}^{(1)}$ a $n \hat{V}^{(2)}$ jsou konzistentními odhady σ_∞^2 , a délka bloku, která minimalizuje asymptotickou střední kvadratickou chybu těchto odhadů, je přibližně

$$(7) \quad b \approx \left(\frac{(\sum_{k=-\infty}^{\infty} |k| R(k))^2}{c \sigma_\infty^4} \right)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{1}{3}},$$

kde $c = \frac{2}{3}$ pro odhad $\hat{V}^{(1)}$ a $c = 1$ pro odhad $\hat{V}^{(2)}$ (Politis, Romano a Wolf (1999), kap. 9). Je zřejmé, že takto lze délku bloku stanovit jen při známé autokovarianční

n	$\text{Var}\bar{X}_n$	$\hat{V}^{(1)}$	$b^{(1)}$	$\hat{V}^{(2)}$	$b^{(2)}$
50	0.04460	0.03300 (0.00910)	2	0.03333 (0.00936)	2
100	0.02240	0.01840 (0.00444)	3	0.01700 (0.00343)	2
200	0.01122	0.00975 (0.00178)	4	0.00972 (0.00194)	4
400	0.00562	0.00504 (0.00070)	5	0.00493 (0.00070)	4
500	0.00450	0.00406 (0.00051)	5	0.00396 (0.00050)	4
1000	0.00225	0.00208 (0.00022)	7	0.00203 (0.00020)	5
2000	0.00125	0.00106 (7.85e-005)	8	0.00105 (7.25e-005)	8
5000	0.00045	0.00043 (2.34e-005)	10	0.00043 (2.77e-005)	10

TABULKA 1. Odhad rozptylu průměru metodou subsampling při optimální délce bloku.

funkci $R(k)$.

V tabulce 1 jsou uvedeny výsledky simulací, které srovnávají skutečnou hodnotu rozptylu spočtenou podle vzorce (6) a jeho odhady $\hat{V}^{(1)}$ a $\hat{V}^{(2)}$ metodou subsampling pro různé počty pozorování n a odpovídající délky bloku $b^{(1)}, b^{(2)}$ počítané podle (7) a zaokrouhlené na celá čísla. Posloupnost X_1, \dots, X_n byla generována jako MA(1) podle předpisu $X_t = Y_t + \frac{1}{2}Y_{t-1}$, kde $\{Y_t\}$ byl striktně stacionární bílý šum s rozdělením $\mathcal{N}(0, 1)$. Směrodatné odchylky pro 1000 opakování jsou uvedeny v závorkách.

Dále jsme studovali chování odhadu rozptylu $\text{Var}\bar{X}_n$ metodou subsampling v závislosti na délce bloku při pevném počtu pozorování.

Byly generovány posloupnosti

$$(8) \quad MA(1) : X_t = Y_t + \frac{1}{2}Y_{t-1}$$

$$(9) \quad MA(2) : X_t = Y_t + Y_{t-1} + Y_{t-2}$$

$$(10) \quad AR(1) : X_t = \beta X_{t-1} + Y_t, \quad \beta = 0.3 \text{ a } \beta = 0.8$$

pro rozsahy $n = 100, n = 160, n = 200$ a $n = 400$. Posloupnost Y_t byla ve všech případech generována jako striktní bílý šum s rozdělením $\mathcal{N}(0, 1)$.

Poznámka 2. Takto definované posloupnosti jsou striktně stacionární a mají vlastnost strong mixing (Davidson (1994), věta 14.9).

Pro každou řadu byl spočten odhad rozptylu průměru metodou subsampling pro klouzavé bloky (odhad $\hat{V}^{(1)}$) a nepřekrývající se bloky (odhad $\hat{V}^{(2)}$). Pro každou

délku bloku bylo provedeno 1000 opakování a spočten průměr a směrodatná odchylka. Výsledky byly porovnány se skutečnou hodnotou rozptylu, která byla spočtena podle (6). Na obrázcích je skutečná hodnota rozptylu vyznačena +, hodnota odhadu $\widehat{V}^{(1)}$ jako • a hodnota odhadu $\widehat{V}^{(2)}$ jako *. U nepřekrývajících se bloků se rozsah, při kterém bylo dosaženo nejlepší shody se skutečnou hodnotou, pohyboval mezi 2 – 5, u klouzavých bloků ve většině případů mezi 10 – 20, ale odhady měly v některých případech velkou směrodatnou odchylku. Výsledky simulací pro rozsahy $n = 100$ a $n = 400$ jsou demonstrovány na obrázcích 1 a 2. Z obrázků je patrná určitá stabilita odhadů získaných metodou klouzavých bloků, které mají i jinou než optimální délku.

Na obrázku 3 je pro ilustraci také aproximace skutečného rozdělení metodou subsampling z jedné výběrové realizace.

Určitým řešením jak zvolit délku bloku, i když nedává optimální výsledky, je použít kalibrační metodu nebo metodu minimální volatility. Obě metody jsou popsány v Politis, Romano a Wolf (1999).

4. SUBSAMPLING V NESTACIONÁRNÍCH ČASOVÝCH ŘADÁCH

Nyní předpokládejme, že posloupnost $\{X_t\}_{-\infty}^{\infty}$ není striktně stacionární, ale má vlastnost strong mixing. Podobně jako v předchozím odstavci je metoda subsampling pro odhad obecného parametru θ založena na klouzavých blocích (X_t, \dots, X_{t+b-1}) pro $t = 1, \dots, n - b + 1$. Tyto náhodné vektory však již nemají stejné rozdělení. Nechť $\widehat{\theta}_n, \widehat{\theta}_{n,b,t}$ a $L_{n,b}$ jsou definovány stejně jako pro stacionární posloupnosti, H_n je definovaná v (1), nechť

$$(11) \quad H_{b,t}(x) = P[\tau_b(\widehat{\theta}_{n,b,t} - \theta) \leq x].$$

O konzistenci $L_{n,b}$ lze dokázat následující větu (Politis, Romano, Wolf (1999), Theorem 4.2.1).

Věta 2. *Nechť $\{X_t\}_{-\infty}^{\infty}$ je náhodná posloupnost s vlastností strong mixing. Předpokládejme, že existuje distribuční funkce H taková, že*

- (a) $H_n \rightarrow H$ slabě, když $n \rightarrow \infty$,
- (b) V každém bodě spojitosti H a pro každou posloupnost indexů t_b platí

$$H_{b,t_b}(x) \rightarrow H(x), \text{ když } b \rightarrow \infty.$$

Nechť dále $\frac{t_b}{n} \rightarrow 0$ a nechť $L_{n,b}$ je empirická distribuční funkce definovaná v (3). Potom platí tvrzení (i) – (iii) Věty 1.

Poznámka 3. Předpoklad (b) lze nahradit slabším předpokladem

- (b') V každém bodě spojitosti H a pro $n \rightarrow \infty, b \rightarrow \infty$ a $\frac{b}{n} \rightarrow 0$

$$\frac{1}{n-b+1} \sum_{t=1}^{n-b+1} H_{b,t}(x) \rightarrow H(x).$$

Výsledky lze zobecnit na vícerozměrný parametr.

Nyní uvažujme pozorování X_1, \dots, X_n autoregresní posloupnosti AR(1) definované jako

$$(12) \quad X_t = \beta X_{t-1} + Y_t, \quad t = 0, \pm 1, \dots,$$

kde $|\beta| < 1$ a Y_t jsou nezávislé náhodné veličiny s nulovou střední hodnotou a rozptyly σ_t^2 . Posloupnost (12) není obecně stacionární. Nechť $\hat{\beta}_n$ je odhad parametru β spočtený metodou nejmenších čtverců z pozorování X_1, \dots, X_n , tj.

$$\hat{\beta}_n = \frac{\sum_{t=2}^n X_t X_{t-1}}{\sum_{t=2}^n X_{t-1}^2}.$$

Ukážeme, že rozdělení $\sqrt{n}(\hat{\beta}_n - \beta)$ je možné aproximovat metodou subsampling. Máme tedy $\tau_n = \sqrt{n}$, $H_n(x) = P[\sqrt{n}(\hat{\beta}_n - \beta) \leq x]$. Nechť $\hat{\beta}_{n,b,t}$ je odhad β z pozorování X_t, \dots, X_{t+b-1} , tj.

$$\hat{\beta}_{n,b,t} = \frac{\sum_{j=t+1}^{t+b-1} X_j X_{j-1}}{\sum_{j=t+1}^{t+b-1} X_{j-1}^2},$$

$$H_{b,t}(x) = P[\sqrt{b}(\hat{\beta}_{n,b,t} - \beta) \leq x],$$

a

$$L_{n,b}(x) = \frac{1}{n-b+1} \sum_{t=1}^{n-b+1} I[\sqrt{b}(\hat{\beta}_{n,b,t} - \hat{\beta}_n) \leq x].$$

Nyní lze zformulovat podmínky konzistence.

Věta 3. *Nechť X_t je definovaná v (12), kde $|\beta| < 1$, Y_t jsou nezávislé s nulovou střední hodnotou, rozptyly σ_t^2 a stejnoměrně ohraničenými momenty 4. řádu a mají hustoty f_t pro které platí*

$$(13) \quad \sup_t \frac{1}{|a|} \int_{-\infty}^{\infty} |f_t(z+a) - f_t(z)| dz \leq M \text{ pro všechna } |a| < \gamma$$

kde M, γ jsou kladné konstanty. Nechť dále platí

$$(14) \quad \frac{1}{k} \sum_{j=t}^{t+k-1} \sigma_j^2 \rightarrow \sigma^2 > 0 \text{ stejnoměrně v } t, \text{ když } k \rightarrow \infty,$$

$$(15) \quad \frac{1}{k} \sum_{j=t+1}^{t+k-1} \sigma_j^2 \mathbf{E} X_{j-1}^2 \rightarrow \bar{\sigma}^2 > 0 \text{ stejnoměrně v } t, \text{ když } k \rightarrow \infty.$$

Potom pro odhad parametru β metodou subsampling platí

$$\sup_x |L_{n,b}(x) - H_n(x)| \rightarrow 0 \text{ v pravděpodobnosti}$$

jestliže $n \rightarrow \infty, b \rightarrow \infty, \frac{b}{n} \rightarrow 0$ a $L_{n,b}$ a H_n jsou distribuční funkce definované výše.

Důkaz. Stačí ověřit předpoklady Věty 2. Podmínka $|\beta| < 1$, předpoklad o stejnoměrně ohraničených momentech a podmínka (13) zaručují, že posloupnost $\{X_t\}$ má vlastnost strong mixing (Davidson (1994), věta 14.9.)

Dále uvažujeme schéma náhodných veličin

$$\begin{aligned} \xi_{t_b,v} &= X_{t_b+v-1} & t_b &= 1, \dots, n-b+1, v = 1, \dots, b-1, \\ \nu_{t_b,v} &= Y_{t_b+v} & t_b &= 1, \dots, n-b+1, v = 1, \dots, b-1, \\ \zeta_{t_b,v} &= X_{t_b+v-1} Y_{t_b+v} & t_b &= 1, \dots, n-b+1, v = 1, \dots, b-1, \end{aligned}$$

kde $b = b(n)$ a $b \rightarrow \infty$, když $n \rightarrow \infty$. Zřejmě je

$$(16) \quad \sqrt{b}(\hat{\beta}_{n,b,t_b} - \beta) = \sqrt{b} \frac{\sum_{j=t_b+1}^{t_b+b-1} X_{j-1} Y_j}{\sum_{j=t_b+1}^{t_b+b-1} X_{j-1}^2} = \frac{\frac{1}{\sqrt{b}} \sum_{v=1}^{b-1} \zeta_{t_b,v}}{\frac{1}{b} \sum_{v=1}^{b-1} \xi_{t_b,v}^2}.$$

Pro každý index t_b jsou náhodné veličiny $\nu_{t_b,v}$ nezávislé, s nulovou střední hodnotou, s rozptyly $E(\nu_{t_b,v})^2 = \sigma_{t_b+v}^2$ a se stejnoměrně ohraničenými momenty 4. řádu, tedy podle zákona velkých čísel a podmínky (14) platí

$$(17) \quad \frac{1}{b} \sum_{v=1}^{b-1} \nu_{t_b,v}^2 \rightarrow \sigma^2 \text{ pro } b \rightarrow \infty \text{ skoro jistě.}$$

Náhodné veličiny $\zeta_{t_b,v}$ tvoří posloupnost martingalových diferencí, pro které podle Prášková (1997), viz též Basu a Sen Roy (1990) a za platnosti podmínky (15) platí

$$(18) \quad \mathcal{L} \left(\frac{1}{\sqrt{b}} \sum_{v=1}^{b-1} \zeta_{t_b,v} \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, \bar{\sigma}^2) \text{ pro } b \rightarrow \infty$$

pro každý index t_b .

Konečně, když využijeme (12), dostaneme

$$(19) \quad (1 - \beta^2) \frac{1}{b} \sum_{v=1}^{b-1} \xi_{t_b,v}^2 = \frac{1}{b} (X_{t_b}^2 - X_{t_b+b-1}^2) + 2\beta \frac{1}{b} \sum_{v=1}^{b-1} \zeta_{t_b,v} + \frac{1}{b} \sum_{v=1}^{b-1} \nu_{t_b,v}^2.$$

První člen na pravé straně (19) konverguje v pravděpodobnosti k nule pro $b \rightarrow \infty$ vzhledem k předpokladu o stejnoměrně ohraničených čtvrtých momentech Y_t (lze snadno ukázat, že potom i X_t mají stejnoměrně ohraničené momenty 4. řádu.) Druhý člen konverguje v pravděpodobnosti k nule podle zákona velkých čísel pro martingalové diference $\zeta_{t_b,v}$, což spolu s (17) implikuje, že

$$\frac{1}{b} \sum_{v=1}^{b-1} \xi_{t_b,v}^2 \rightarrow \frac{\sigma^2}{1 - \beta^2} \text{ v pravděpodobnosti pro } b \rightarrow \infty$$

pro každý index t_b . Odtud tedy plyne, že pro každý index t_b a $b \rightarrow \infty, n \rightarrow \infty$ má $\sqrt{b}(\hat{\beta}_{n,b,t_b} - \beta)$ asymptoticky normální rozdělení $\mathcal{N}(0, \Delta^2)$, kde

$$\Delta^2 = \frac{(1 - \beta^2)^2 \bar{\sigma}^2}{\sigma^4},$$

tj. $H_{b,t_b}(x) \rightarrow H(x) = \Phi\left(\frac{x}{\Delta}\right)$ stejnoměrně v x a pro každý index t_b , což je podmínka (b) Věty 2. Podmínka (a) je splněna, položíme-li $b = n, t_b = 1$. \square

Uvažujeme-li model $AR(1)$ s nenulovou střední hodnotou, tj. model

$$(20) \quad X_t - \mu = \beta(X_{t-1} - \mu) + Y_t, t = 0, \pm 1, \dots,$$

potom momentové odhady parametrů jsou

$$\hat{\mu}_n = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n X_t = \bar{X}_n, \quad \hat{\beta}_n = \frac{\sum_{t=2}^n (X_t - \bar{X}_n)(X_{t-1} - \bar{X}_n)}{\sum_{t=2}^n (X_{t-1} - \bar{X})^2}$$

a jejich rozdělení lze opět aproximovat metodou subsampling. Označíme-li jako $\hat{\mu}_{n,b,t}$ a $\hat{\beta}_{n,b,t}$ odhady spočtené z bloku pozorování X_t, \dots, X_{t+b-1} , lze zformulovat následující tvrzení o konzistenci.

Věta 4. *Nechť X_1, \dots, X_n jsou pozorování, která se řídí modelem (20) a necht' jsou splněny podmínky věty 3. Necht' $n \rightarrow \infty, b \rightarrow \infty$ a $\frac{b}{n} \rightarrow 0$. Potom platí*

$$\sup_x |P[\sqrt{n}(\hat{\mu}_n - \mu) \leq x] - L_{n,b}^\mu(x)| \rightarrow 0 \text{ v pravděpodobnosti}$$

a

$$\sup_x |P[\sqrt{n}(\hat{\beta}_n - \beta) \leq x] - L_{n,b}^\beta(x)| \rightarrow 0 \text{ v pravděpodobnosti}$$

kde

$$L_{n,b}^\mu(x) = \frac{1}{n-b+1} \sum_{t=1}^{n-b+1} I[\sqrt{b}(\hat{\mu}_{n,b,t} - \hat{\mu}_n) \leq x],$$

a $L_{n,b}^\beta(x)$ má stejný význam pro odhady $\hat{\beta}_n$ a $\hat{\beta}_{n,b,t}$.

Důkaz. Stejným způsobem jako v předchozí větě se ukáže, že za podmínky (14) platí stejnoměrně v x a pro každý index t_b , že $P[\sqrt{n}(\hat{\mu}_{n,b,t_b} - \mu) \leq x] \rightarrow H^\mu(x)$, kde $H^\mu(x)$ je distribuční funkce normálního rozdělení $\mathcal{N}(0, \sigma^2(1-\beta)^{-2})$ (Prášková (1997)). Dále se aplikuje postup z věty 3 na pozorování $X_t - \mu$. \square

Tvrzení věty 3 lze dále zobecnit na model autoregrese vyššího řádu

$$(21) \quad X_t = \sum_{j=1}^p \beta_j X_{t-j} + Y_t, \quad t = 0, \pm 1, \dots$$

Model lze psát ve vektorovém zápisu jako

$$(22) \quad X_t = \mathbf{X}(t-1)^T \boldsymbol{\beta} + Y_t,$$

kde $\mathbf{X}(t)$ je vektor $(X_t, X_{t-1}, \dots, X_{t-p+1})^T$ a $\boldsymbol{\beta}$ je vektor autoregresních parametrů $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^T$. Odhad parametru $\boldsymbol{\beta}$ metodou nejmenších čtverců spočtený z pozorování X_1, \dots, X_n je

$$(23) \quad \hat{\boldsymbol{\beta}}_n = \left[\sum_{t=2}^n \mathbf{X}(t-1) \mathbf{X}(t-1)^T \right]^{-1} \sum_{t=2}^n \mathbf{X}(t-1) Y_t.$$

Věta 5. *Uvažujme model (21). Předpokládejme, že náhodné chyby Y_t jsou nezávislé s hustotami a momenty, které splňují podmínky věty 3 a dále necht' kořeny polynomu*

$$\lambda^p - \beta_1 \lambda^{p-1} + \dots + \beta_p$$

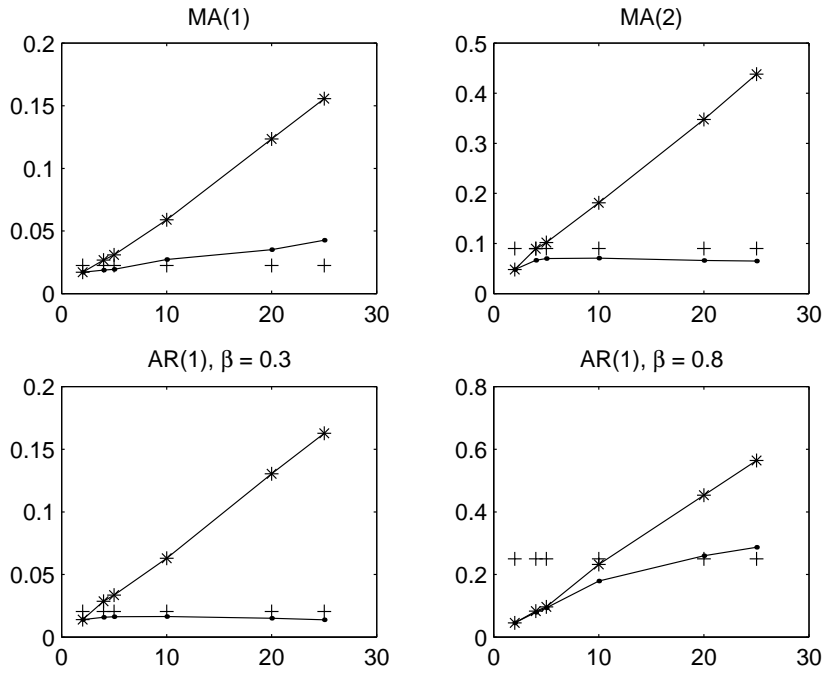
jsou v absolutní hodnotě ostře menší než 1. Předpokládejme, že platí podmínka (14) a podmínka

$$(24) \quad \frac{1}{k} \sum_{j=t+1}^{t+k-1} \sigma_j^2 \mathbf{E} \mathbf{X}(j-1) \mathbf{X}(j-1)^T \rightarrow \overline{\boldsymbol{\Sigma}} \text{ stejnoměrně v } t, \text{ když } k \rightarrow \infty,$$

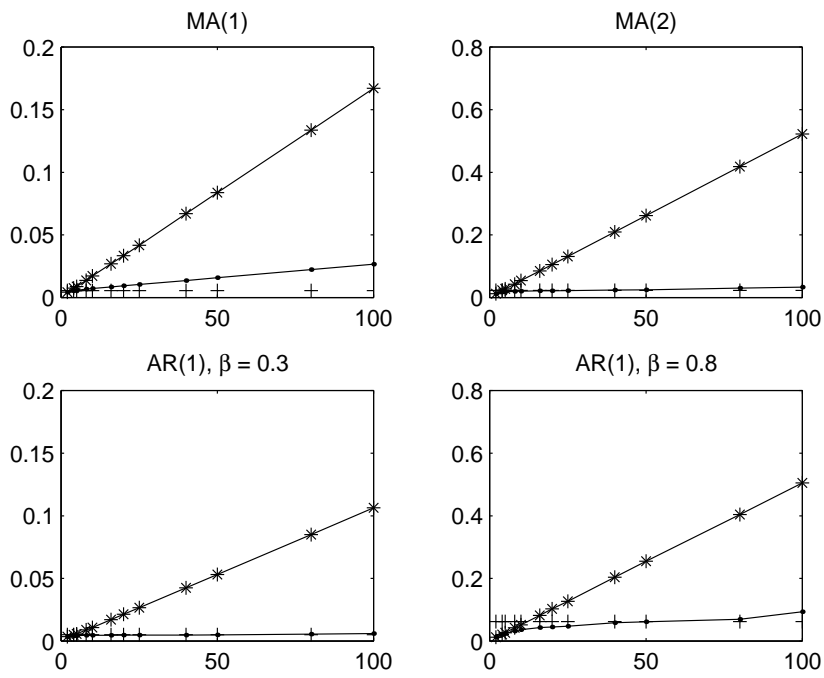
kde $\overline{\boldsymbol{\Sigma}}$ je pozitivně definitní nenulová matice.

Potom rozdělení náhodného vektoru $\sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_n - \boldsymbol{\beta})$ lze aproximovat empirickým rozdělením spočteným z hodnot $\sqrt{b}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{n,b,t} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_n)$, $t = 1, \dots, n-b+1$.

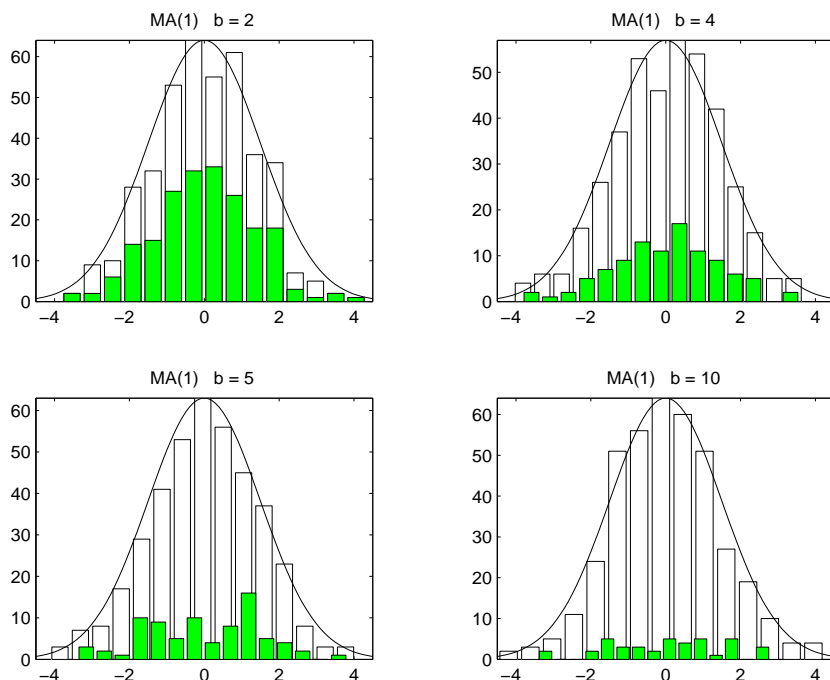
Důkaz. Postupuje se stejně jako v jednorozměrném případě. Podmínka na kořeny spolu s podmínkou (13) zaručují, že posloupnost (21) má vlastnost strong mixing (Davidson (1994), Corollary 14.13). Dále se využije vlastnosti vektoru martingalových diferencí $\mathbf{X}(t-1)Y_t$ a jeho asymptotické normality podle Tjøstheim a Paulssen (1985) (tam dokázané Lemma 3.1 platí i za našich předpokladů) a ukáže se, že jsou splněny předpoklady 4.3.2 z Romano, Politis a Wolf (1999) (str. 106-107). \square



OBRÁZEK 1. Závislost odhadu rozptylu průměru na délce bloku, 100 pozorování.



OBRÁZEK 2. Závislost odhadu rozptylu průměru na délce bloku, 400 pozorování.



OBRÁZEK 3. Aproximace rozdělení odhadu rozptylu metodou subsampling, 400 pozorování. Tmavě jsou označeny nepřekrývající se bloky.

Literatura

- 1 Basu, A. K., Sen Roy, S. (1990): On rates of convergence in the central limit theorem for parameter estimation in general autoregressive model. *Statistics*, 21, 461-470
- 2 Brockwell, P. J., Davis, R. A. (1991): *Time Series: Theory and Methods*. Springer, New York
- 3 Davidson, J. (1994): *Stochastic Limit Theory*. Oxford University Press, Oxford
- 4 Efron, B., Tibshirani, R. J. (1993): *An Introduction to the Bootstrap*. Chapman & Hall, New York, London
- 5 Politis, D. N., Romano, J. P., Wolf, M. (1999): *Subsampling*. Springer, New York
- 6 Prášková, Z. (1997): Bootstrapping in autoregression with heteroscedasticity. Submitted.
- 7 Shao, J., Tu, D. (1995): *The Jackknife and Bootstrap*. Springer, New York
- 8 Tjøstheim, D., Paulsen, J. (1985): Least squares estimates and order determination procedures for autoregressive process with a time dependent variance. *J. Time Ser. Anal.*, 6, 117-138

BAYESŮV PRINCIP

ZDENĚK PŮLPÁN

ABSTRAKT. Poukážeme na možnost rozhodování pomocí Bayesova principu. Ten vychází z odhadu podmíněné pravděpodobnosti a z předpokladu disjunkt-ního rozkladu základní množiny (nebo z předpokladu disjunkt-nosti vzhledem k zavedené pravděpodobnosti). Navrhujeme jedno jeho rozšíření i pro fuzzy množiny.

Резюме: В этой статье изучается применение метода Баеса и фазы множеств.

1. KLASICKÝ BAYESŮV PRINCIP

Mějme dány základní množinu Ω , jevové pole \mathcal{A}_Ω na Ω a pravděpodobnost P na \mathcal{A}_Ω . Pak podmíněnou pravděpodobnost $p(A/B)$ za podmínky $B \in \mathcal{A}_\Omega$, indukovanou pravděpodobností P , definujeme pro každé $A \in \mathcal{A}_\Omega$ vztahem

$$(1) \quad p(A/B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}, \quad \text{když } P(B) > 0 \\ = 0, \quad \text{když } P(B) = 0.$$

O tom, že $A \rightarrow p(A/B)$ je pravděpodobnost, se můžeme snadno přesvědčit:

$$p(B/B) = 1; \quad p(A/B) \geq 0; \quad p(\cup_i A_i/B) = \sum_i p(A_i/B),$$

kde A_i jsou navzájem disjunkt-ní prvky z \mathcal{A}_Ω , $i \in I$ a I je nejvýše spočetná množina.

Budeme používat rozkladu prostoru Ω . Rozklad prostoru Ω je takový, nejvýše spočetný systém neprázdných množin $B_i \in \mathcal{A}_\Omega$, $i \in I$, kde I je nejvýše spočetná indexová množina a platí

- a) $B_i \cap B_j = \emptyset$ pro $i \neq j$ (vzájemná disjunkt-nost)
- b) $\cup_{i \in I} B_i = \Omega$ (pokrytí množiny Ω).

Mějme nyní jistý rozklad $S = \{B_i\}_{i \in I}$ množiny Ω , kde $B_i \in \mathcal{A}_\Omega$, $i \in I$, a libovolné $A \in \mathcal{A}_\Omega$. Pak platí vzhledem k (1) a vlastnostem P na \mathcal{A}_Ω

$$(2) \quad P(A) = P(A \cap \Omega) = P(A \cap (\cup_i B_i)) = P(\cup_i (A \cap B_i)) = \\ = \sum_{i \in I} P(A \cap B_i) = \sum_{i \in I} P(B_i) \cdot p(A/B_i)$$

a také pak

$$(3) \quad p(B_i/A) = \frac{P(B_i \cap A)}{P(A)} = \frac{P(B_i) \cdot p(A/B_i)}{\sum_i P(B_i) \cdot p(A/B_i)}, \quad \text{když } P(A) > 0 \\ = 0, \quad \text{když } P(A) = 0.$$

Vztah (2) se nazývá vztahem pro úplnou pravděpodobnost a vztah (3) je Bayesův.

2000 *Mathematics Subject Classification.* 62C10.

Klíčová slova. Bayesův princip, fuzzy množiny.

Příklad 1: Uvažujme \mathcal{X} jako konečnou množinu určitých symptomů. Označme znakem $\Omega = 2^{\mathcal{X}}$ množinu všech podmnožin množiny \mathcal{X} a vytvořme rozklad množiny Ω například tak, že některé prvky rozkladu budou reprezentovat přítomnost resp. nepřítomnost základních symptomů jen jedné určité choroby; mezi jistými chorobami a třídami rozkladu B_i tak bude vzájemně jednoznačný vztah.

Jsou-li odhadnutelné pravděpodobnosti jednotlivých uvažovaných diagnóz $P(B_i)$ a podmíněné pravděpodobnosti $p(A/B_i)$ souboru pozorovaných symptomů A při každé z uvažovaných diagnóz $B_i, i \in I$, můžeme stanovit podle (3) pro každé $i \in I$ podmíněnou pravděpodobnost $p(B_i/A)$. Rozhodování zvažujeme vzhledem ke vzájemným hodnotám $p(B_i/A), i \in I$.

Konkrétněji, nechť $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_k\}$ je konečná množina základních symptomů (např. x_1 „zvýšená teplota“, x_2 „bolesti břicha“, ..., x_k „artróza kyčelního kloubu“) a přiřadíme vzájemně jednoznačně každému prvku $\omega \subset \Omega = 2^{\mathcal{X}}$ k -rozměrný vektor $\vec{v}(\omega) = (a_1, a_2, \dots, a_k)$ tak, že $a_i = 1$ resp. 0 , když je $x_i \in \omega$ resp. $x_i \notin \omega$. Je-li systém symptomů vzhledem k chorobám $n_1, n_2, \dots, n_l, l < 2^k$, dobře vytvořen, je možné stanovit takový rozklad S na Ω (resp. na množině všech k -členných 0-1 posloupností), že některé jeho třídy rozkladu mohou být ztotožněny s chorobami n_1, n_2, \dots, n_l . Nechť $S = \{B_i\}_{i=1}^q$, kde q je počet prvků rozkladu S ; B_i jsou tvořeny jistými k -prvkovými posloupnostmi $\vec{v}(\omega)$, které jsou diagnózami. Bodové odhady pravděpodobností $P(B_i)$ dostaneme součtem relativních četností diagnóz obsažených v B_i . Podobně dostaneme bodové odhady podmíněných pravděpodobností $p(A/B_i)$ jako součty relativních četností diagnóz z A v množině diagnóz patřících k B_i .

Máme zde však několik problémů. Jeden spočívá v tom, že bodové odhady pravděpodobností jsou spolehlivé jen když pocházejí z dostatečně rozsáhlého náhodného výběru. Vzhledem k tomu, že např. v lékařských rozhodováních potřebujeme i velké množství dílčích diagnóz, je potřebné odhady provádět z relativně velmi rozsáhlého výběru. Druhý problém spočívá v hodnocení dílčích diagnóz, které pro serióznější celkovou diagnózu musí vycházet z přesnější charakterizace stavu než např., že pacient „má“ nebo „nemá bolesti břicha“. Nahradíme-li například položku x_1 číselnou hodnotou tělesné teploty, např. s přesností $\pm 0,1^\circ\text{C}$, máme zde místo odhadu dvou možných stavů i kolem 50 nových možností tělesných teplot. To znamená, že již např. při 3 podobných diagnózách máme zjišťovat odhady pravděpodobností pro 125 000 možných stavů! A to zřejmě není možné. \square

Poznámka: Podmínku rozkladu množiny Ω pro platnost Bayesova vztahu (3) lze oslabit podmínkou P -rozkladu takto:

- Systém $T = \{B_i\}_{i \in I}$ množin $B_i \in \mathcal{A}_\Omega$ je systémem P -disjunktních množin, když
- $P(B_i \cap B_j) = 0$ pro $i \neq j$,
 - $P(\cup_i B_i) = 1$,
 - $P(B_i) > 0, i \in I$.

Platnost (3) za podmínek (4) vyplývá z toho, že ze (4) plyne pro $P(A)$ vztah (5):

$$(4) \quad P(A) = P(A \cap \cup_i B_i) = \sum_{i \in I} P(A \cap B_i).$$

Viděli jsme, že užití Bayesova rozhodování při větším počtu odhadovaných položek předpokládá rozsáhlá výběrová šetření. Přitom si uvědomujeme, že některé diagnostikované položky mají podobu vágních dat. Zkusme proto nahradit rozsáhlé měření expertními odhady funkcí náležitostí fuzzy množin \tilde{A} a $\tilde{B}_i, i \in I$.

2. FUZZY BAYESŮV PRINCIP

Předpokládejme, že máme opět základní prostor Ω , jevové pole \mathcal{A}_Ω a pravděpodobnost P na \mathcal{A}_Ω . Postupujeme analogicky s klasickým případem.

Fuzzy jevem vzhledem k \mathcal{A}_Ω je každá fuzzy (pod)množina \tilde{A} množiny Ω , pro jejíž funkci příslušnosti μ_A platí

$$(5) \quad \mu_A^{-1}(I) \in \mathcal{A}_\Omega$$

pro každý interval $I \subset \langle 0; 1 \rangle$.

Pravděpodobnost fuzzy jevu \tilde{A} s funkcí příslušnosti μ_A definujeme vztahem

$$(6) \quad \mathcal{P}(\tilde{A}) = \int_{\Omega} \mu_A dP = E(\mu_A).$$

Podmíněná pravděpodobnost q pro fuzzy jev \tilde{A} za podmínky fuzzy jevu \tilde{B} je definována podobně jako v klasickém případě ([4])

$$(7) \quad q(\tilde{A}/\tilde{B}) = \frac{\mathcal{P}(\tilde{A} \cap \tilde{B})}{\mathcal{P}(\tilde{B})}, \text{ když } \mathcal{P}(\tilde{B}) > 0$$

$$= 0, \quad \text{když } \mathcal{P}(\tilde{B}) = 0.$$

Mějme nyní dány nejvýše spočetnou posloupnost $\{\tilde{B}_i\}_I$ fuzzy jevů množiny Ω . Platnost fuzzy Bayesova principu je pak podmíněna splněním ekvivalentních vztahů (9) a (10) pro jakýkoliv fuzzy jev \tilde{A} množiny Ω :

$$(8) \quad \mathcal{P}(\tilde{A}) = \sum_{i \in I} \mathcal{P}(\tilde{A} \cap \tilde{B}_i)$$

$$(9) \quad q(\tilde{B}_i/\tilde{A}) = \frac{\mathcal{P}(\tilde{B}_i) \cdot q(\tilde{A}/\tilde{B}_i)}{\sum_j \mathcal{P}(\tilde{B}_j) \cdot q(\tilde{A}/\tilde{B}_j)}, \quad i \in I.$$

Hledejme proto podmínku pro fuzzy množiny \tilde{B}_i , $i \in I$, k platnosti (9) pro každou fuzzy množinu \tilde{A} množiny Ω . Systém fuzzy množin $\{\tilde{B}_i\}_{i \in I}$, který splňuje (9) pro každou fuzzy množinu \tilde{A} nazveme systémem fuzzy disjunktních množin.

Rozebereme si problém fuzzy disjunktnosti nejprve na příkladech.

Příklad 2: Mějme $\Omega = \langle 0; 10 \rangle$ a na ní rozložení pravděpodobností dané hustotou $f(x)$

$$f(x) = \frac{1}{25}x; \quad 0 \leq x \leq 5$$

$$= -\frac{1}{25}x + \frac{2}{5}; \quad 5 < x \leq 10.$$

Systém fuzzy množin $\{\tilde{B}_i^1\}_{i=1,2,3}$ bude nejprve systémem ostrých množin (zapsaných ovšem jako fuzzy množiny) s funkcemi příslušnosti:

$$\mu_{B_1^1}(x) = 1 \text{ pro } x \in \langle 0; 3 \rangle$$

$$= 0 \text{ pro } x \notin \langle 0; 3 \rangle,$$

$$\mu_{B_2^1}(x) = 1 \text{ pro } x \in \langle 3; 6 \rangle$$

$$= 0 \text{ pro } x \notin \langle 3; 6 \rangle,$$

$$\mu_{B_3^1}(x) = 1 \text{ pro } x \in \langle 6; 10 \rangle$$

$$= 0 \text{ pro } x \notin \langle 6; 10 \rangle.$$

Pak je $\mathcal{P}(\tilde{B}_1^1) = \int_{\Omega} \mu_{B_1^1}(x) f(x) dx = 0,18$, $\mathcal{P}(\tilde{B}_2^1) = 0,50$, $\mathcal{P}(\tilde{B}_3^1) = 0,32$; je jasné, že zde musí být $\sum_{i=1}^3 \mathcal{P}(\tilde{B}_i^1) = 1$.

Pro fuzzy množinu \tilde{A} :

$$\begin{aligned}\mu_A(x) &= \frac{1}{3}x - \frac{1}{3}; 1 \leq x \leq 4 \\ &= -\frac{1}{3}x + \frac{7}{3}; 4 \leq x \leq 7 \\ &= 0 \text{ jinde,}\end{aligned}$$

výpočtem dostaneme $\mathcal{P}(\tilde{A}) = \int_{\Omega} \mu_A(x) \cdot f(x) dx = 0,444$.

Uvažujeme-li průnik dvou fuzzy množin buď ve smyslu Zadehovy nebo Lukasiewiczovy (nebo i jiné) definice dostaneme v našem případě volby systému $\{\tilde{B}_i^1\}_{i=1,2,3}$ stejné hodnoty $P(\tilde{B}_1^1 \cap \tilde{A}) = 0,062$, $P(\tilde{B}_2^1 \cap \tilde{A}) = 0,357$, $P(\tilde{B}_3^1 \cap \tilde{A}) = 0,024$. Zde skutečně platí (9). Náš systém fuzzy množin $\{\tilde{B}_i^1\}_{i=1,2,3}$, který je systémem disjunktálních množin ve smyslu disjunktosti ostrých množin je i systémem fuzzy disjunktálních množin (ve smyslu zmíněných definic průniku fuzzy množin) a platí zde fuzzy Bayesův princip.

Zavedeme si nyní jiný systém fuzzy množin $\{\tilde{B}_i^2\}_{i=1,2,3}$ definovaných takto:

$$\mu_{B_1^2}(x) = -\frac{1}{3}x + 1; 0 \leq x \leq 3$$

= 0; jinde

$$\mu_{B_2^2}(x) = \frac{1}{4}x - \frac{3}{2}; 6 \leq x \leq 10$$

= 0; jinde

$$\mu_{B_3^2}(x) = \frac{1}{5}x - \frac{1}{5}; 1 \leq x \leq 6$$

= $-x + 7$; $6 \leq x \leq 7$

= 0; jinde.

Můžeme si představit, že daný systém fuzzy množin reprezentuje jistou neostrou klasifikaci na Ω . Dané fuzzy množiny nejsou disjunktí ve smyslu Zadehovy (zde je $\mu_{A \cap B}(x) = \min(\mu_A(x), \mu_B(x))$) ani Lukasiewiczovy definice (zde je $\mu_{A \odot B}(x) = \max(\mu_A(x) + \mu_B(x) - 1; 0)$) průniku dvou fuzzy množin.

Pro tento systém fuzzy množin $\{\tilde{B}_i^2\}_{i=1,2,3}$ máme

$$\mathcal{P}(\tilde{B}_1^2) = 0,06; \quad \mathcal{P}(\tilde{B}_2^2) = 0,107; \quad \mathcal{P}(\tilde{B}_3^2) = 0,043.$$

Vidíme tedy, že $\sum_{i=1}^3 \mathcal{P}(\tilde{B}_i^2) \neq 1$.

Pro průniky fuzzy množin, určených ze Zadehovy definice minima máme

$$\mathcal{P}(\tilde{A} \cap \tilde{B}_1^2) = 0,027; \quad \mathcal{P}(\tilde{A} \cap \tilde{B}_2^2) = 0,010; \quad \mathcal{P}(\tilde{A} \cap \tilde{B}_3^2) = 0,347.$$

Platí tedy $\sum_{i=1}^3 \mathcal{P}(\tilde{A} \cap \tilde{B}_i^2) = 0,384 \neq 0,444 = \mathcal{P}(\tilde{A})$.

Provedeme-li výpočet průniku fuzzy množiny \tilde{A} s fuzzy množinami \tilde{B}_i^2 , $i = 1, 2, 3$, pomocí Lukasiewiczovy spojky, dostaneme za předpokladu stejné základní pravděpodobnostní míry dané hodnotou $f(x)$:

$$\mathcal{P}(\tilde{A} \odot \tilde{B}_1^2) = 0; \quad \mathcal{P}(\tilde{A} \odot \tilde{B}_3^2) = 0,198; \quad \mathcal{P}(\tilde{A} \odot \tilde{B}_2^2) = 0.$$

Zde je $\sum_{i=1}^3 \mathcal{P}(\tilde{A} \odot \tilde{B}_i^2) = 0,198 \neq \mathcal{P}(\tilde{A})$.

V obou uvedených případech tedy fuzzy Bayesův princip (9) neplatí. Vidíme, že jsou sice případy, kdy (9) platí, ale v situaci, která je pro praxi důležitá, tento princip neplatí. \square

Pokusme se nyní zeslabit podmínku (9) tak, aby fuzzy Bayesův princip zahrnoval i všechny klasické případy (3) disjunktních nonfuzzy množin systému $\{\tilde{B}_i\}_{i \in I}$, který pokrývá Ω .

Pro fuzzy - Bayesovské rozhodování je důležité vhodně odhadnout $q(\tilde{B}_i/\tilde{A})$, kde $\tilde{B}_i, i \in I$, jsou různé fuzzy množiny, jejichž sjednocení nosičů je Ω ; jak jsme připomněli, ačkoliv v klasickém (nonfuzzy) případě tvoří $B_i, i \in I$, rozklad Ω , zde, vzhledem k obecnějšímu užití, se nesnažíme předpokládat pro fuzzy množiny $\tilde{B}_i, i \in I$, jejich vzájemnou fuzzy disjunktnost vzhledem k některé definici průniku ([5]).

Mějme dáno jevové pole \mathcal{A}_Ω a pravděpodobnost P na \mathcal{A}_Ω . Dále mějme dán systém fuzzy množin $\{\tilde{B}_i\}_{i \in I}$, jejichž nosiče pokrývají Ω a nechtě $\tilde{B}_i, i \in I$, jsou fuzzy jevy. Pro každou fuzzy množinu $\tilde{B}_i, i \in I$ určíme novou fuzzy množinu \tilde{B}_i^0 takto

$$(10) \quad \mu_{B_i^0}(x) = \inf_{j \neq i, j \in I} \max(\mu_{B_i}(x) - \mu_{B_j}(x); 0); \quad x \in \Omega; i \in I.$$

Je jasné, že \tilde{B}_i^0 je pak také fuzzy jev vzhledem k \mathcal{A}_Ω .

Nyní definujeme podmíněnou pravděpodobnost $q(\tilde{B}_i/\tilde{A})$ fuzzy jevu \tilde{B}_i za podmínky libovolného fuzzy jevu \tilde{A} (vzhledem k \mathcal{A}_Ω) nově vztahem (12):

$$(11) \quad q_1(\tilde{B}_i/\tilde{A}) = \frac{\mathcal{P}(\tilde{B}_i^0 \cap \tilde{A})}{\mathcal{P}(\tilde{A})}; \quad i \in I.$$

Jsou-li fuzzy množiny $\tilde{B}_i, i \in I$ interpretovatelné jako disjunktní normální množiny z \mathcal{A}_Ω , pokrývající Ω , je $\tilde{B}_i^0 = \tilde{B}_i, i \in I$, a platí (2) i (3).

Průnik fuzzy množin ve výrazu pro pravděpodobnost v čitateli výrazu (12) můžeme konstruovat podle různých definic; použití závisí na problému, který se zkoumá a na zkušenosti uživatele.

Příklad 3: Počítejme pro data z příkladu 2 hodnoty $q_1(B_i^{10}/\tilde{A})$ a $q_1(B_i^{20}/\tilde{A})$ pro $i = 1, 2, 3$ podle (12) a užívejme Zadehovy interpretace fuzzy průniku.

Nejprve určíme příslušné fuzzy množiny: Platí $\tilde{B}_i^{10} = \tilde{B}_i, i = 1, 2, 3$. Dále jsme vypočetli

\tilde{B}_1^{20} :

$$\mu_{B_1^{20}}(x) = \begin{cases} \mu_{B_1^2}(x) & \text{pro } x \in \langle 0; 1 \rangle \\ -\frac{8}{15}x + \frac{6}{5} & \text{pro } x \in \langle 1; \frac{9}{4} \rangle \\ 0 & \text{jinde;} \end{cases}$$

\tilde{B}_2^{20} :

$$\mu_{B_2^{20}}(x) = \begin{cases} = 0 & \text{pro } x \leq \frac{34}{5} \\ \frac{5}{4}x - \frac{17}{2} & \text{pro } \frac{34}{5} < x \leq 7 \\ \mu_{B_2^2}(x) & \text{pro } 7 < x \leq 10 \end{cases}$$

\tilde{B}_3^{20} :

$$\mu_{B_3^{20}}(x) = \begin{cases} \frac{8}{15}x - \frac{6}{5} & \text{pro } \frac{9}{4} < x \leq 3 \\ \mu_{B_3^2}(x) & \text{pro } 3 < x \leq 6 \\ -\frac{5}{4}x + \frac{17}{2} & \text{pro } 6 < x \leq \frac{34}{5} \\ 0 & \text{jinde.} \end{cases}$$

Pak je v prvním případě podle (12)

$$q_1(\tilde{B}_1^1/\tilde{A}) = \frac{1}{\mathcal{P}(\tilde{A})} \cdot \int_{\Omega} \min(\mu_{B_1^{20}}(x), \mu_A(x)) \cdot f(x) dx = \frac{0,062}{0,444} = 0,14$$

$$q_1(\tilde{B}_2^1/\tilde{A}) = 0,90; \quad q_1(B_3^1/\tilde{A}) = 0,02.$$

Ve druhém případě je podle (12)

$$q_1(\tilde{B}_1^2/\tilde{A}) = 0,02; \quad q_1(\tilde{B}_2^2/\tilde{A}) = 0,00; \quad q_1(\tilde{B}_3^2/\tilde{A}) = 0,68. \quad \square$$

Je jasné, že vzhledem k definici fuzzy množin \tilde{B}_i^0 a k (12) nemůžeme očekávat obecnou platnost vztahu $\sum_{i \in I} q_1(\tilde{B}_i/\tilde{A}) = 1$, analogického ke vztahu pro non fuzzy podmíněné pravděpodobnosti v žádné z interpretací fuzzy průniku.

Hodnoty $q_1(B_i/\tilde{A})$, $i \in I$, můžeme chápat jako míry správnosti rozhodnutí pro alternativu \tilde{B}_i za podmínky \tilde{A} a uvažovat o vektoru \vec{Q}_A (když $\text{card}(I) = n$)

$$(12) \quad \vec{Q}_A = (q_1(\tilde{B}_1/\tilde{A}), q_1(B_2/\tilde{A}), \dots, q_1(B_n/\tilde{A})).$$

Tento vektor je možné normovat tak, aby každé $q_1(B_i/\tilde{A})$ přešlo v $q_1^*(\tilde{B}_i/\tilde{A}) \geq 0$ tak, aby

$$(13) \quad \sum_{i \in I} q_1^*(\tilde{B}_i/\tilde{A}) = 1.$$

Normované hodnoty $q_1^*(\tilde{B}_i/\tilde{A})$ pak mohou být interpretovány jako váhy jednotlivých rozhodnutí \tilde{B}_i za předpokladu znalosti \tilde{A} (např. předchozího rozhodnutí \tilde{A}).

Nabízí se však ještě druhá možnost určení $q(\tilde{B}_i/\tilde{A})$, a to vztahem (15)

$$(14) \quad q_2(\tilde{B}_i/\tilde{A}) = \frac{\mathcal{P}(\tilde{B}_i^0 \cap \tilde{A})}{\sum_{j \in I} \mathcal{P}(\tilde{B}_j^0 \cap \tilde{A})}; \quad i \in I.$$

Zde bereme v úvahu, že jmenovatel ve (14) nemusí nabývat hodnoty $\mathcal{P}(\tilde{A})$ a příslušné $q_2(\tilde{B}_i/\tilde{A})$ je pak mírou zastoupení hodnoty $\mathcal{P}(\tilde{B}_i^0 \cap \tilde{A})$ v součtu $\sum_{j \in I} \mathcal{P}(\tilde{B}_j^0 \cap \tilde{A})$. Pro q_2 z (15) však ale přímo platí

$$\sum_{j \in I} q_2(\tilde{B}_j/\tilde{A}) = 1.$$

Příklad 4: Pro data z předcházejících příkladů 2 a 3 a opět pro Zadehovu interpretaci průniku fuzzy množin máme

$$q_1^*(\tilde{B}_1^2/\tilde{A}) = 0,03 \doteq q_2(\tilde{B}_1^2/\tilde{A})$$

$$q_1^*(\tilde{B}_2^2/\tilde{A}) = 0,00 \doteq q_2(\tilde{B}_2^2/\tilde{A})$$

$$q_1^*(\tilde{B}_3^2/\tilde{A}) = 0,97 \doteq q_2(\tilde{B}_3^2/\tilde{A}).$$

V našem případě jsou oba výsledky téměř identické. \square

3. ZÁVĚR

Byly naznačeny problémy, které vznikají ve snaze zavést Bayesův princip i pro fuzzy jevy analogicky s tímto principem v klasické teorii pravděpodobnosti. Je uvedeno jedno z možných řešení tohoto problému „úpravou“ fuzzy množin \tilde{B}_i , $i \in I$, tvořících pak „fuzzy pokrytí“ základní množiny Ω . Je také možné využít tohoto principu v rozhodování, zobrazitelném stromovým grafem.

Literatura

- 1 Hintikka J., Suppes P.: Information and Inference, D. Riedel Publ., Dordrecht, 1970.
- 2 Zimmermann H.-J.: Fuzzy Set Theory and its Application, Kluwer Academic Publishers, Boston, 1996.
- 3 Cox E.: The Fuzzy Systems, Handbook, 2nd ed., AP Professional, Academic Press, New York, 1999.
- 4 Mesiar R. a Piasecki K.: Fuzzy disjunktnost indukovaná Bayesovým principem, Teória a aplikácie fuzzy množín IV - VII, JSMF, VVTŠ Liptovský Mikuláš, Praha, 1989
- 5 Púlpán Z.: K problematice vágnosti v humanitních vědách, Academia, Praha, 1997

Conclusion

We have described the possibilities of decision making with the help of the fuzzy - Bayes formula.

Konkludo

En tio artikolo ni evolugis la fuzzy - Bayes formula. Ni uzas tion formulon en la decida procedo egz. en la medicino.

UNIVERZITA HRADEC KRÁLOVÉ, KATEDRA MATEMATIKY PdF, VÍTA NEJEDLÉHO 573, 500 38 HRADEC KRÁLOVÉ

E-MAIL: zdenek.pulpan@uhk.cz

KLASIFIKACE V PROGRAMOVÝCH SYSTÉMECH PRO ANALÝZU DAT

HANA ŘEZANKOVÁ A DUŠAN HÚSEK

ABSTRAKT. The current classification methods are categorized. Their theoretical capabilities are discussed. The work includes the classification of cases, variables and categories. Moreover, implementation of these methods in six statistical packages (MINITAB, S-PLUS, SPSS, STATGRAPHICS, STATISTICA and SYSTAT) and their additional software systems (SPSS Answer Tree, STATISTICA Neural Networks) is described.

Проводится разбивка на категории существующих методов статистической классификации. Обсуждаются их теоретические основы. В работе рассматривается классификация случаев, переменных и категорий. Более того, дается описание использования этих методов в шести статистических пакетах прикладных программ (MINITAB, S-PLUS, SPSS, STATGRAPHICS, STATISTICA и SYSTAT) и в их дополнительных программных системах (SPSS Answer Tree, STATISTICA Neural Networks).

1. ÚVOD

Pojem *klasifikace* používaný při analýze dat je spojen s širokým okruhem metod, kterým věnují značnou pozornost jak statistikové, tak odborníci specializující se na takové oblasti jako jsou data mining, získávání znalostí z databází, včetně specialistů na neuronové sítě. V některých zemích existují odborné společnosti zabývající se touto tematikou, které jsou sdruženy do mezinárodní společnosti *International Federation of Classification Societies* (IFCS). Pod záštitou IFCS se konají konference *Data Science, Classification, and Related Methods*. Existuje také specializovaný časopis *Journal of Classification*.

Klasifikační metody můžeme charakterizovat následujícím způsobem. Sledujeme určité objekty, které se více či méně navzájem odlišují, takže může existovat několik skupin těchto objektů. Cílem je zařadit buď některé z objektů nebo všechny objekty do skupin.

2. KLASIFIKACE KLASIFIKAČNÍCH METOD

Metody obsažené v programových systémech můžeme roztřídit podle různých hledisek. Dále budou uvedena některá z nich, budou specifikovány příslušné skupiny metod, případně bude uveden konkrétní postup, který je buď jediným nebo charakteristickým zástupcem dané skupiny. U členění podle třetího hlediska pak budou vyjmenovány jednotlivé metody a postupy, které můžeme nalézt v programových systémech pro analýzu dat.

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62H30.

Klíčová slova. Klasifikační metody.

Tato práce vznikla v rámci grantu No.LN00B096 – Centrum aplikované kybernetiky.

1. Jedním z hledisek je *předmět klasifikace*. Při analýze dat můžeme rozlišit následující předměty klasifikace:
 - 1.1. Objekty, tj. statistické jednotky
 - 1.2. Proměnné, tj. statistické znaky
 - 1.3. Kategorie proměnných
 - 1.3.1. Jedné proměnné (např. shluková analýza)
 - 1.3.2. Dvou proměnných (dvourozměrná shluková analýza, korešpondenční analýza)
 - 1.3.3. Více proměnných (optimální škálování)
2. Jiné hledisko může sledovat, *kdy a jakým způsobem je stanoven počet skupin*. Podle něho můžeme rozlišit následující kategorie:
 - 2.1. Počet skupin musí být stanoven před analýzou, jejímž cílem je klasifikace
 - 2.1.1. Dáno názorem uživatele, který analyzuje data (nehierarchická shluková analýza)
 - 2.1.2. Dáno počtem hodnot vysvětlované proměnné (diskriminační analýza). V této skupině můžeme dále rozlišit, zda vysvětlovaná proměnná je dichotomická (logistická regresní analýza), nominální (multinomická logistická regrese) či ordinální (ordinální regrese), u které se bere v úvahu, zda jsou kategorie rovnoměrně zastoupeny, nebo jsou více zastoupeny nižší či vyšší hodnoty, případně jsou více zastoupeny extrémní hodnoty.
 - 2.2. Počet skupin je zjišťován analýzou, jejíž cílem je klasifikace
 - 2.2.1. Metodou může být navržen konkrétní počet (faktorová analýza)
 - 2.2.2. Počet stanovuje uživatel na základě výsledků analýzy (hierarchická shluková analýza)
3. Nejčastěji používaným hlediskem je zřejmě to, *zda se můžeme při klasifikaci řídit nějakým vzorem* (existuje „učitel“) *nebo ne*. Podle toho rozlišujeme
 - 3.1. Učení s učitelem (supervised learning), které se vztahuje pouze na klasifikaci objektů a známý počet skupin (na základě vzoru je vytvořen model, který umožňuje zařazování objektů do skupin); slouží k odhadu hodnoty vysvětlované proměnné, která je kategoriální. V literatuře zaměřující se na data mining jsou jako klasifikační označovány pouze tyto metody, jde tedy o *klasifikaci v užším významu*:
 - 3.1.1. Diskriminační analýza
 - 3.1.1.1. Logistická regresní analýza
 - 3.1.1.2. Multinomická logistická regresní analýza
 - 3.1.1.3. Ordinální regresní analýza
 - 3.1.2. Zobecněný lineární model - GLM (Generalized Linear Model)
 - 3.1.2.1. Logistická regresní analýza
 - 3.1.2.2. Multinomická logistická regresní analýza
 - 3.1.2.3. Ordinální regresní analýza
 - 3.1.3. Kategoriální regresní analýza
 - 3.1.4. Klasifikační stromy
 - 3.1.4.1. Metoda CHAID (Chi-squared Automatic Interaction Detection) - vysvětlovaná proměnná může být jak nominální, tak ordinální (metoda je používána i v případě spojité vysvětlované proměnné)
 - 3.1.4.2. Metoda Exhaustive CHAID

- 3.1.4.3. Metoda C&RT (Classification and Regression Trees) - vysvětlovaná proměnná může být jak nominální, tak ordinální (metoda je používána i v případě spojité vysvětlované proměnné)
- 3.1.4.4. Metoda QUEST (Quick, Unbiased, Efficient Statistical Tree) - lze použít pouze pro nominální vysvětlovanou proměnnou
- 3.1.4.5. Další metody (CART, CLS, ID3, C4.5, AID, TREEDISC)
- 3.1.5. Neuronové sítě
 - 3.1.5.1. MLP (MultiLayer Perceptrons) - vícevrstvý perceptron
 - 3.1.5.2. RBF (Radial Basis Functions) - radiální bazické funkce
 - 3.1.5.3. PNN (Probabilistic Neural Networks) - pravděpodobnostní neuronové sítě
 - 3.1.5.4. LNN (Linear Neural Networks) - lineární neuronové sítě
 - 3.1.5.5. LVQ (Learning Vector Quantization) - vektorová kvantizace
- 3.1.6. GUHA¹
- 3.2. Učení bez učitele (unsupervised learning), které zahrnuje jednak shlukování či segmentaci (objektů, proměnných i kategorií), jednak redukci dat (proměnných či kategorií). V literatuře zaměřující se na data mining se tyto metody neoznačují jako klasifikační, ale spadají do skupiny postupů, jejichž cílem je *shlukování*, případně segmentace:
 - 3.2.1. Shluková analýza
 - 3.2.1.1. Hierarchická shluková analýza
 - 3.2.1.2. Nehierarchická shluková analýza
 - 3.2.1.3. Dvourozměrná shluková analýza (two-way joining)
 - 3.2.2. Faktorová analýza
 - 3.2.3. Vícerozměrné škálování
 - 3.2.4. Korespondenční analýza
 - 3.2.5. Optimální škálování (analýza homogeneity, kategoriální analýza hlavních komponent)
 - 3.2.6. Neuronové sítě
 - 3.2.6.1. AR (Adaptive Resonance Theory)
 - 3.2.6.2. KFM (Kohonen Feature Maps) - Kohonenovy mapy

¹K metodám klasifikace můžeme dále zařadit metody, které *analyzují vztahy mezi kategoriemi* různých proměnných. Základem je asociační algoritmus pro odvozování pravidel typu If X , then Y , tj. implikace typu IF (logická kombinace fakt) THEN fakt, přičemž *fakt* je elementární logický výrok. Je zjišťováno, kolik procent z určité logické kombinace fakt (antecedentu) implikuje fakt na pravé straně pravidla (succedent) a kolik procent záznamů se vyskytuje v této asociaci. Příkladem programového systému, který je určen pro výše uvedené analýzy, je např. GUHA +- (General Unary Hypotheses Automaton). Na základě analyzovaných vztahů lze pro určitou kombinaci kategorií některých vysvětlujících proměnných předpovědět hodnotu (kategorii) vysvětlované proměnné (obdobně jako při použití klasifikačních stromů). Metodu lze tedy využít pouze pro kategorizované proměnné.

3.2.6.3. HNN (Hopfield like Neural Network) - síť Hopfieldova typu

3.2.7. Genetické algoritmy

3. POROVNÁNÍ MOŽNOSTÍ STATISTICKÝCH PROGRAMOVÝCH SYSTÉMŮ V OBLASTI KLASIFIKACE

Sledovány byly vybrané možnosti šesti statistických programových systémů, kterými jsou MINITAB 13 (demo verze), S-PLUS 4.5, SPSS 10.0, STATGRAPHICS Plus 4.0 (demo verze), STATISTICA 5.1 a SYSTAT 9.0 (demo verze), a jich rozšiřujících systémů (SPSS Answer Tree 2.0, STATISTICA Neural Networks 3.0). Metody klasifikace byly rozděleny do dvou základních skupin, které lze charakterizovat jako - předpovídání hodnot kategoriální vysvětlované proměnné a - shlukování.

Do podrobnějšího hodnocení v rámci první skupiny nebyl zahrnut systém S-PLUS, neboť neobsahuje diskriminační analýzu a při logistické regresní analýze nabídkový režim neposkytuje většinu ze sledovaných možností. Zjištěné skutečnosti jsou uvedeny v tabulkách 1 a 2, sledovány jsou následující možnosti.

Možnost	Vysvětlení
Výběr prom.	nabídka metod, které umožňují vybrat z množiny vysvětlujících proměnných takovou podmnožinu, jež nejlépe vysvětluje hodnoty vysvětlované proměnné (obvykle jsou nabízeny postupy forward a backward)
Váhy dle počtu	jednotlivým skupinám lze přiřadit váhy dle počtu objektů v dané skupině
Váhy dle uživat. Tab. úspěšnosti	jednotlivým skupinám lze přiřadit váhy dle uživatele
- cross validation	výstup obsahuje tabulku sdružených četností pro skutečné a předpovězené hodnoty vysvětlované proměnné
Předpovědi	známý objekt, pro který chceme získat předpověď, není zahrnut do analýzy
- text. výstup	způsob záznamu předpovědí hodnot vysvětlované proměnné
- výstupní tab.	předpovědi jsou zobrazeny jako textový výstup
- do dat. editoru	předpovědi jsou zobrazeny ve výstupní tabulce
- nový soub.	předpovědi jsou hodnoty nové proměnné, která je přidána do datového editoru ke zdrojovým datům
- pro zadané h.	předpovědi jsou uloženy do nového datového souboru
- pravděp.	předpovědi jsou počítány pro nový případ (zadaný vektor hodnot) jako výsledky jsou uváděny pravděpodobnosti
Grafy	počet nabízených typů grafů
Překód. Y (0 a 1)	vysvětlovaná proměnná může nabývat jiných hodnot než 0 a 1
- automat.	překódování provádí systém v případě potřeby automaticky
Kód. kat. prom.	kategoriální proměnná nabývající k kategorií je převedena na k-1 pomocných proměnných
Mezní hodnota	lze zadat hodnotu od 0,01 do 0,99 - jestliže je vypočítána hodnota větší než zadaná mezní, je předpověď vysvětlované proměnné rovna jedné
Úspěšnost	způsob posuzování úspěšnosti při předpovědích

Co se týče grafů, které ilustrují výše uvedené analýzy, pak stejný počet grafů neznámá stejné typy. Obvykle se grafické výstupy u jednotlivých programových systémů poněkud liší.

V systému *S-PLUS*, který nebyl do výše uvedeného přehledu zahrnut, je k dispozici logistická regresní analýza (předpovědi lze uložit do nového datového souboru, nabídka obsahuje 8 typů grafů) a Poissonova regresní analýza. Součástí systému jsou dále klasifikační a regresní stromy, které zahrnují 2 metody (jednu pro kvalitativní, druhou pro kvantitativní vysvětlovanou proměnnou). Neuronové sítě obsaženy nejsou.

Pokud jde o programové produkty umožňující provádět analýzu dat pomocí neuronových sítí, pak autoři měli k dispozici pouze *STATISTICA Neural Networks*. Tento systém poskytuje pro předpovídání hodnot kategoriální vysvětlované proměnné 4 typy neuronových sítí, které jsou ve druhé kapitole označeny jako 3.1.5.1 až 3.1.5.4. Pro MLP (vícevrstvý perceptron) je k dispozici 5 algoritmů: back propagation (zpětné šíření), conjugate gradient descent algoritmus, Levenbergův-Marquardtův algoritmus, quick propagation (rychlé šíření) a Delta-bar-Delta propagation. Možnosti jsou tedy poměrně značné. Binární proměnné musí být kódovány číslicemi 0 a 1, produkt poskytuje tabulku úspěšnosti a předpovědi. Zvláštností systému je, že tabulka úspěšnosti zahrnuje kromě statistických jednotek zařazených do daných kategorií také statistické jednotky nezařazené.

Tab. 1 Předpovídání hodnot kategoriální vysvětlované proměnné

	MINITAB	SPSS	STAT GRAPHICS	STATISTICA	SYSTAT
<i>Diskriminační analýza</i>					
Výběr prom.	Ne	5 metod	Forward, backw.	Forward, backw.	Forward, backw.
Váhy dle počtu	Ne	Ano	Ano	Ano	Ne
Váhy dle uživat.	Ano	Ne	Ano	Ano	Ne
Tab. úspěšnosti	Ano	Ano	Ano	Ano	Ano
- cross validation	Ano	Ano	Ne	Ne	Ano
Předpovědi	Do dat. editoru Text. výst. (pro zadané hodnoty)	Do dat. editoru	Text. výst.	Výst. tab. Nový soub.	Nový soub.
Grafy	0	3	3	3	0
<i>Logistická regresní analýza (binární)</i>					
Překód. Y (0 a 1)	Automat.	Automat.	Ne	Lze zadat	Automat.
Výběr prom.	Ne	3 forw., 3 backw.	Forward, backw.	Ne	Ne
Kód. kat. prom.	Ano	Ano	Ano	Ne	Ano
Mezní hodnota	Ne	Ano	Ano	Ne	Ne
Úspěšnost	Chí-kvadrát test	Tabulka úspěšnosti	Chí-kvadrát test	Ne	Tabulka úspěšnosti
Předpovědi	Ne	Do dat. editoru	Ne	Ne	Nový soub. (pravděp.)
Grafy	8	1	7	7	0
<i>Klasifikační stromy</i>					
Produkt	Ne	Answer Tree	Ne	Součást paketu	Součást paketu
Možnosti	x	4 metody	x	3 metody	6 funkcí
<i>Neuronové sítě</i>					
Produkt	Ne	Neural Connection	Ne	Neural Networks	Ne

Poznámky. Produkt *Answer Tree* zahrnuje metody označené v kapitole 2 jako 3.1.4.1 až 3.1.4.4. Kvalita modelu je posuzována na základě tabulky, která je obdobou tabulky úspěšnosti, avšak celkově je charakterizována podílem chybných předpovědí. V systému *SYSTAT* lze v rámci klasifikačních stromů vybírat z šesti typů ztrátových funkcí.

MINITAB umožňuje kromě výše uvedených analýz provádět též nominální a ordinální regresní analýzu, avšak neposkytuje žádné ze sledovaných možností.

Systém *SPSS* nabízí kromě dvou výše uvedených postupů také kategoriální regresní analýzu. Některé možnosti jsou porovnány v tabulce 2.

Tab. 2 Další možnosti systému SPSS z oblasti regresní analýzy (RA)

	<i>Multinomialní RA (nominální)</i>	<i>Ordinální RA</i>	<i>Kategoriální RA</i>
Výběr prom.	Ne	Ne	Ne
Tab. úspěšnosti	Ano	Ne	Ne
Předpovědi	Ne	Ano	Ne
Graf	Ne	Ne	Ano

Pokud jde o oblast *shlukování*, porovnání je uvedeno v tabulce 3. Je založeno především na možnostech nabídkových režimů, ve dvou případech jsou též zmíněny možnosti dostupné pomocí příkazů, pomocí nichž lze dále získat například více typů grafů (SPSS). Byly sledovány následující možnosti:

Možnost	Vysvětlení
<i>Faktorová analýza</i>	
Metody extrakce	počet metod extrakce
Metody rotace	počet metod rotace
Grafy	počet nabízených typů grafů
<i>Hierarchická shluková analýza</i>	
Z matice vzdál.	vstupem pro analýzu může být matice vzdáleností
Shluk. prom.	lze provádět shlukování proměnných (sloupců v datové matici)
Standard. hodnot	lze zadat transformaci vstupních hodnot – standardizaci (obvykle odečtení aritmetického průměru a vydělení směrodatnou odchylkou, v systému S-PLUS je místo směrodatné odchylky používána absolutní odchylka), příp. jiné transformace (např. převedení do intervalu od -1 do 1 či od 0 do 1)
Míry vzdál.	počet měř vzdálenosti
Míry podob.	počet měř podobnosti
Míry nepod.	počet měř nepodobnosti
Míry pro bin. pr.	počet měř pro binární proměnné
Transf. měř	lze zadat transformaci měř (absolutní hodnoty, převedení do int. od 0 do 1)
Aglomer. metody	počet aglomerativních postupů
Metody dělení	počet metod pro dělení shluků
Přísl. ke shlukům	způsob záznamu příslušnosti ke shlukům (možnosti viz Předpovědi v předcházející skupině metod), v SPSS lze příslušnosti zaznamenat do datového editoru pouze v případě, že jsou shlukovány objekty
- tab. v text. výst.	příslušnosti jsou zaznamenány do tabulky, která je součástí textového výstupu
Icicle graf (banner plot)	směr kreslení grafu (pokud je obsažen) - vertikální nebo horizontální
Dendrogram (tree plot)	směr kreslení dendrogramu - vertikální nebo horizontální
<i>Nehierarchická shluková analýza</i>	
Metody	konkrétní metoda (k -means = k -průměrů) nebo počet metod

Tab. 3 Shlukování

	MINITAB	S-PLUS	SPSS	STAT GRAPHICS	STATISTICA	SYSTAT
<i>Faktorová analýza</i>						
Metody extrakce	2	2	7	2	6	3
Metody rotace	4	12	5	3	8	5
Grafy	3	2	2	2	2	2
<i>Hierarchická shluková analýza</i>						
Z matice vzdál.	Ano	Ano	Příkaz	Ne	Ano	Ano
Shluk. prom.	Ano	Ne	Ano	Ano	Ano	Ano
Standard. hodnot	1	1(+ 3)	6	1	0	0
Míry vzdál.	5	2	5	3	6	8
Míry podob.	2	0	2	0	1	0
Míry nepod.	0	Příkaz	2	0	0	0
Míry pro bin. pr.	0	2	26	0	0	0
Transf. měř	0	0	3	0	0	0
Aglomer. metody	7	5	7	6	7	6
Metody dělení	0	2	0	0	0	0
Přísl. ke shlukům	Do dat. editoru	Nový soub.	Tab.výst. v text. výst. Do dat. editoru	Text. Do dat. editoru	Ne	Text. výstup Do dat. editoru
Icicle graf (banner plot)	Ne	Horiz.	Vert. + horiz.	Ne	Ne	Ne
Dendrogram (tree plot)	Vert.	Vert.	Horiz.	Vert. + vert.	Horiz.	Ne
Jiné grafy	0	0	0	3	0	Polární
<i>Nehierarchická shluková analýza</i>						
Metody	<i>k</i> -means	3 (vč. fuzzy)	<i>k</i> -means	<i>k</i> -means (i prom.)	<i>k</i> -means (i prom.)	<i>k</i> -means (8 měř)
<i>Jiné techniky shlukové analýzy</i>						
	Ne	Ne	Ne	Ne	Dvourozm.	Additive tree
<i>Vícerozměrné škálování</i>						
	Ne	Ne	Ano	Ne	Ano	Ano
<i>Korespondenční analýza</i>						
	Ne	Ne	Ano	Ne	Ano	Ano
<i>Analýza homogenity</i>						
	Ne	Ne	Ano	Ne	Ano	Ne
<i>Kategoriální analýza hlavních komponent</i>						
	Ne	Ne	Ano	Ne	Ne	Ne

Poznámky.

V *S-PLUS* je při shlukové analýze jiná nabídka pro transformaci vstupních hodnot u konkrétních analýz (pouze standardizace) a jiná u výpočtu matice vzdáleností (3 další možnosti - podle typů proměnných).

V systémech *MINITAB* a *SYSTAT* jsou do měř vzdáleností zahrnuty i transformované míry podobnosti (Pearsonův korelační koeficient). *SYSTAT* poskytuje míry vzdálenosti pro různé typy dat - intervalová, ordinální a nominální data a četnosti.

Systémy *STATGRAPHICS* a *STATISTICA* umožňují aplikovat algoritmus *k*-průměrů také

na proměnné, *STATGRAPHICS* a *SYSTAT* poskytují v rámci tohoto shlukování zvolit míru vzdálenosti.

Pokud jde o systém *STATISTICA Neural Networks*, pak z typů sítí uvedených v 3.2.6 tento produkt poskytuje pouze Kohonenovy mapy. Pro shlukování a redukci dat však mohou být využity rovněž neuronové sítě uvedené v 3.1.5, například lineární neuronové sítě se používají pro analýzu hlavních komponent. Pomocí radiálních bazických funkcí lze provádět shlukovou analýzu odpovídající algoritmu k -průměrů, k dispozici je též algoritmus k -nejbližšího souseda. K výběru podmnožiny vhodných vysvětlujících proměnných lze použít genetické algoritmy.

4. ZÁVĚR

V příspěvku byla věnována pozornost vybraným možnostem některých programových systémů pro analýzu dat. U základních metod byl sledován především komfort nabízený uživateli z hlediska požadavků na vstupní data, například možnost překódování hodnot dichotomické vysvětlované proměnné či převedení nominální vysvětlující proměnné na pomocné proměnné přímo v rámci klasifikační procedury, a dále z hlediska poskytovaných výstupů, např. zobrazení tabulky úspěšnosti a předpovědi hodnot vysvětlované proměnné. Důležité jsou též grafy, které hrají významnou úlohu při snadné interpretaci výsledků.

Jestliže programový systém tyto možnosti neposkytuje, uživatel musí získávat dodatečné informace jinými způsoby. Například uživateli nejde obvykle o to, aby si vytiskl parametry modelu, ale o to, aby mohl zařadit neznámý objekt do některé ze známých skupin objektů, což některé procedury bohužel neumožňují.

V oblasti shlukování bylo sledováno spíše množství různých měr a algoritmů. Z hlediska měr podobností či nepodobností je třeba vyzdvihnout systém *SPSS* s jeho 26 mírami pro binární proměnné. Je však otázkou, kolik procent uživatelů některou z těchto měr využije a zda použije míru správnou, neboť ani manuál ani nápověda neposkytuje základní informace o typech binárních proměnných (symetrických a asymetrických).

Existuje samozřejmě celá řada dalších faktorů, podle kterých lze hodnotit programové systémy. Kromě snadnosti ovládání je to například možnost výpočtů s daty obsahující chybějící údaje. V odborných kruzích jsou preferovány systémy *S-PLUS* a *SPSS*, které poskytují jednak rozsáhlou nabídku metod, jednak možnost programování. Ve speciálních případech však můžeme zjistit, že ani jeden z nich nelze použít.

Jestliže například chceme shlukovat asymetrické binární proměnné, matice vzdáleností může obsahovat chybějící hodnoty i v případě, kdy se ve zdrojových datech chybějící údaje nevyskytují. *S-PLUS* hlásí, že se nesmí vyskytovat žádná chybějící hodnota, pro *SPSS* je na závadu, když chybějících hodnot je mnoho. Řešením je v tomto případě vypočítat matici vzdáleností pomocí některého z těchto produktů (*SPSS* je přijatelnější z hlediska ovládání) a shlukování nechat provést v systému *STATISTICA*. Postup je sice poněkud komplikován tím, že systém *STATISTICA* vyžaduje matici vzdáleností ve speciálním tvaru (musí obsahovat navíc 3 řádky, které charakterizují soubor), nicméně je zřejmě jediným řešením dané úlohy.

Z hlediska množství typů metod využitelných pro úlohy klasifikace lze nejlépe hodnotit systém *SPSS*, za nímž následují systémy *STATISTICA* a *SYSTAT*. Nejméně typů metod zahrnuje *STATGRAPHICS*. Jednoznačně však nelze doporučit žádný systém, neboť každý ze sledovaných zahrnuje buď určitý postup či speciální grafy, které v jiných systémech zahrnuté nejsou. Jako příklady lze uvést speciální postupy

regresní analýzy a speciální míry vzdáleností v *SPSS*, dvourozměrnou shlukovou analýzu v systému *STATISTICA*, metodu additive tree joining a polární graf u shlukové analýzy v systému *SYSTAT*, Poissonovu regresní analýzu a speciální postupy ve shlukové analýze (fuzzy přiřazování do shluků a postupy pro dělení shluků) v *S-PLUS*.

V současné době již výše uvedené programové systémy poskytují nabídkový režim pro snadné ovládání. Bohužel u některých produktů (*S-PLUS*, *SPSS*) nezahrnuje tento nabídkový režim všechny analytické možnosti systému a dokonce některé základní možnosti musí být někdy zadávány pomocí příkazů (2D graf u faktorové analýzy v *SPSS*).

Pro každý typ analýzy je nezbytnou součástí práce s daty, přičemž základní možností je výběr proměnných pro analýzu. Z tohoto hlediska je dle našeho názoru nejméně přizpůsoben potřebám běžného uživatele systém *S-PLUS*. Obtížnější na ovládání jsou pro uživatele statistických programových systémů též speciální produkty jako *Neural Networks*, neboť vyžadují specifický způsob zadávání.

Jak potvrzují diskuse s kolegy, kteří se zabývají analýzou dat, obvykle nelze vystačit s jediným programovým systémem, je nutné mít nejméně dva a při výpočtech je kombinovat. Pokud lze výsledky získat prostřednictvím různých produktů, měly by být porovnány, neboť softwarové produkty se mohou lišit z hlediska spolehlivosti výpočtů.

LITERATURA

- [1] *Answer Tree 2.0 User's Guide*. SPSS Inc., Chicago 1998.
- [2] Bigus, J. P.: *Data Mining with Neural Networks*. McGraw-Hill, 1996.
- [3] Cabena, P., Hadjinian, P., Stadler, R., Verhees, J., Zanasi, A.: *Discovering Data Mining: From Concept to Implementation*. Prentice Hall PTR, New Jersey 1998.
- [4] Groth, R.: *Data Mining: A Hands-On Approach for Business Professionals*. Prentice Hall PTR, New Jersey 1998.
- [5] Hartigan, J. A.: *Clustering Algorithms*. John Wiley & Sons, New York 1975.
- [6] Húsek, D., Řezanková, H., Frolov A. A.: Neural Networks Capable of Boolean Factor Analysis. In: *COMPSTAT 2000. Proceedings in Computational Statistics - Short Communications and Posters* (Ed. Jansen, W., Bethlehem, J. G.). Statistics Netherlands, Voorburg 2000, 41-42.
- [7] Klaschka, J., Antoch, J.: Jak rychle pěstovat stromy. *ROBUST'96*. JČMF, Praha 1997, 91-106.
- [8] Řezanka, T., Řezanková, H.: Characterization of fatty acids and triacylglycerols in vegetable oils by gas chromatography and statistical analysis. *Analytica Chimica Acta*, **398** (1999), 253-261.
- [9] Řezanková, H.: Cluster Analysis Algorithms in Software Systems. In: *Socio-Economical Applications of Statistical Methods* (Ed. Ostasiewicz, W.). University of Economics, Wrocław 2000, 154-162.
- [10] Řezanková, H., Húsek, D.: Metody pro redukci znaků sledovaných při analýze dat. *8. mezinárodní seminár Výpočtová statistika*, SŠDS, Bratislava 1999, 84-87.
- [11] Řezanková, H., Húsek, D.: Modeling technique for Data Mining. *Acta Oeconomica Pragensia*, **8** (2000), No. 3, 125-132.
- [12] *SPSS Advanced Models 10.0*. SPSS Inc., Chicago 1999.
- [13] *SPSS Categories*. SPSS Inc.
- [14] *STATISTICA*. StatSoft Inc, Tulsa 1998
- [15] *STATISTICA Neural Networks*. StatSoft Inc., Tulsa 1998
- [16] *S-PLUS 4 Guide to Statistics*. MathSoft Inc., Seattle 1997.
- [17] Tvrđík, J.: Logistická regrese a vyhledávání modelů. *ROBUST'98*, JČMF, Praha 1998, 187-194.

VŠE, KSTP, NÁM. W. CHURCHILA 4, 130 00 PRAHA 3
E-MAIL: rezanka@vse.cz

ÚI, AV ČR, POD VODÁRENSKOU VĚŽÍ 2, 182 07 PRAHA
E-MAIL: dusan@cs.cas.cz

ENTROPY OF FUZZY DYNAMICAL SYSTEMS

BELOSLAV RIEČAN

ABSTRACT. Using fuzzy partitions instead of set partitions we have defined a new invariant of dynamical systems. In this communication we discuss the notion and show how it can be modified to be useful.

Резюме: Изучается динамическая инвариантная система которая использует “фазы” разладку на месте классической разладки множеств.

1. FUZZY ENTROPY

Entropy of dynamical systems has been introduced for distinguishing some non-isomorphic dynamical systems. The notion is based on the notion of the entropy

$$-\sum p_i \log p_i$$

of a set partition. Here we shall consider fuzzy dynamical systems defined by the following way.

Definition. Let (Ω, \mathcal{S}, P) be a probability space, \mathcal{F} be the set of all \mathcal{S} -measurable functions from Ω to $[0,1]$. Fuzzy dynamical system is the triple (\mathcal{F}, m, U) , where $m : \mathcal{F} \rightarrow [0,1]$ is defined by the equality

$$m(f) = \int_{\Omega} f dP$$

and $U : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$ is a mapping satisfying the following conditions:

- (1) If $f + g \leq 1_{\Omega}$, then $U(f + g) = U(f) + U(g)$.
- (2) $U(1_{\Omega}) = 1_{\Omega}$.
- (3) $m(U(f)) = m(f)$ for any $f \in M$.
- (4) $U(f \cdot g) = U(f) \cdot U(g)$ for any $f, g \in \mathcal{F}$.

A fuzzy partition is a set $A = \{f_1, \dots, f_n\} \subset \mathcal{F}$ such that

$$\sum_{i=1}^n f_i = 1_{\Omega}.$$

If $A = \{f_1, \dots, f_n\}$, then $U^i(A) = \{U^i(f_1), \dots, U^i(f_n)\}$, where $U^0(f) = f$, $U^{i+1}(f) = U(U^i(f))$.

It is easy to see that $U(A)$ is a partition for any partition A . As usual define the entropy function $\varphi : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ by the formula

$$\varphi(x) = -x \log x,$$

if $x > 0$,

$$\varphi(0) = 0.$$

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 28E10; Secondary 37-99.

Key words and phrases. Fuzzy partitions, dynamic systems, entropy.

If $A = \{f_1, \dots, f_n\}, B = \{g_1, \dots, g_k\}$ are two fuzzy partitions then we define

$$A \vee B = \{f_i \cdot g_j; i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, k\},$$

the entropy

$$H(A) = \sum_{n=1}^n \varphi(m(f_i))$$

and the conditional entropy

$$H(A|B) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k m(g_j) \varphi\left(\frac{m(f_i \cdot g_j)}{m(g_j)}\right),$$

where the summands with $m(g_j) = 0$ are omitted.

The entropy of a fuzzy dynamical system has been defined by the following formulas:

$$h(A, U) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} H\left(\bigvee_{i=1}^{n-1} U^i(A)\right).$$

Finally, if $G \subset \mathcal{F}$ and \mathcal{P} is the family of all fuzzy partitions, then

$$h_G(U) = \sup\{h(A, U); A \in \mathcal{P}, A \subset G\}.$$

The following generalization of the celebrated Kolmogorov - Sinaj theorem holds:

Theorem. Let $C = \{C_1, \dots, C_n\}$ be a measurable set partition of Ω such that the σ -algebra \mathcal{S} is generated by the set $\bigcup_{i=1}^{\infty} U^i(C)$. Then for every fuzzy partition $A = \{g_1, \dots, g_k\}$ there holds

$$h(A, U) \leq h(C, U) + \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^k \varphi(g_i)\right) dP.$$

Of course, the definition has the following defect: If G contains all constant functions, then $h_G(U) = \infty$. This defect is eliminated by the following correction.

2. HUDETZ ENTROPY

If $A = \{f_1, \dots, f_n\}$ is a fuzzy partition, then we define its Hudetz entropy

$$H^b(A) = \sum_{i=1}^k \varphi(m(f_i)) - m\left(\sum_{i=1}^k \varphi(f = i)\right),$$

$$h^b(U) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} H^b\left(\bigvee_{i=0}^{n-1} U^i(A)\right),$$

and for any $G \subset \mathcal{F}$ we define

$$h_G^b(U) = \sup\{h^b(A, U); A \subset G, A \in \mathcal{Q}\}$$

where \mathcal{Q} is the set of all fuzzy partitions. Then the following theorem holds:

Theorem. Let $(\Omega, \mathcal{S}, P, T)$ be a dynamical system, \mathcal{F} be the set of all functions $f : \Omega \rightarrow [0, 1]$ measurable with respect to \mathcal{S} , $U : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$, $U(f) = f \circ T$. Let $C \subset G \subset \mathcal{F}$. Then

$$h_G^b(U) = h^b(C, U) = h(C, U).$$

3. REFERENCES

- [1] Maličský P., Riečan B.: On the entropy of dynamical systems. In: Proc. Ergodic Theory and Related Topics II. Taubner, Leipzig 1987, 135–138.
- [2] Hudetz T.: Quantum topological entropy. In: Quantum Probability and related Topics VIII. World Scientific, Singapore 1993, 237–261.
- [3] Riečan B., Neubrunn T.: Integral, Measure, and Ordering. Kluwer, Dordrecht and Ister, Bratislava, 1997.

SLOVAK ACADEMY OF SCIENCES, MATHEMATICAL INSTITUTE, ŠTEFÁNIKOVA 49, SK – 800 00 BRATISLAVA,
SLOVAKIA

E-mail address: `riecan@mat.savba.sk`

SROVNÁNÍ APROXIMAČNÍCH METOD V TEORII RIZIKA

MARTIN ROTKOVSKÝ

ABSTRAKT. One of the main terms of the risk theory is so called individual model, which describes for example total aggregate claim from n insurance policies.

$$S^{ind} := \sum_{i=1}^n X_i = \sum_{i=1}^n C_i D_i$$

For evaluating of distribution of S^{ind} we must calculate convolutions of higher order, what is impossible in general case and very computationally difficult in case of discrete distributions, so it is not the optimal way to get good (and fast) results. We can approximate this model by various methods. In this contribution I will compare different approximations. First theoretically and later for a concrete example, where X_i are i.i.d. with distribution $C_i \sim Exp(\theta)$ and $D_i \sim A(p)$.

Резюме: Одним из основных понятий теории риска является так называемая индивидуальная модель, которая описывает например аккумулярованную потерю из числа n страховых полисов.

$$S^{ind} := \sum_{i=1}^n X_i = \sum_{i=1}^n C_i D_i$$

Для определения распределения S^{ind} мы должны были бы сосчитать многократные конволюции, что, учитывая сложность расчета дискретных случайных величин и почти невозможность расчета общих распределений, не являясь оптимальным путем. Поэтому эта модель бывает часто аппроксимирована с помощью разных методов. В настоящей статье мы занимаемся сравнением этих методов. Сначала на теоретическом уровне, и потом отдельные методы сравниваются на конкретном примере, когда X_i н.о.р.с.в. с распределением $C_i \sim Exp(\theta)$ и $D_i \sim A(p)$.

1. ÚVOD

Jedním ze základních pojmů teorie rizika je takzvaný individuální model, který popisuje kumulovanou ztrátu z n pojistných smluv. Vychází z toho, že i -tá pojistná smlouva s určitou nenulovou pravděpodobností $1 - p_i$ nepřinese ani jednu škodu a s doplňkovou pravděpodobností přinese ztrátu, jejíž rozdělení je dáno distribuční funkcí V_i . Celkovou ztrátu z i -té smlouvy je tedy možno zapsat $X_i = C_i D_i$, kde C_i má d.f. V_i a D_i má alternativní rozdělení s parametrem p_i . Celková škoda z n smluv je tedy

$$S^{ind} := \sum_{i=1}^n X_i = \sum_{i=1}^n C_i D_i$$

Pro určení rozdělení S^{ind} bychom museli počítat mnohonásobné konvoluce, což je výpočtově náročné pro diskrétní a téměř nemožné pro obecně rozdělené náhodné

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62P05.

Klíčová slova. Teorie rizika, individuální model, aproximace, kumulovaná ztráta.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 113200008.

veličiny. Proto je tento model často aproximován různými metodami. V tomto příspěvku se zabýváme jejich srovnáním. Nejdříve teoreticky a pak jsou jednotlivé metody srovnány pro konkrétní příklad, kdy X_i jsou i.i.d. s rozdělením $V_i \sim \text{Exp}(\theta)$ a $D_i \sim A(p)$. V tomto, v praxi hojně používaném, příkladě lze totiž určit poměrně snadno konvoluci libovolného počtu náhodných veličin a tím se dobrat i k poměrně slušným výsledkům. Na závěr je provedeno srovnání aproximace exponenciálním rozdělením vůči reálným datům konkrétní pojišťovny.

0 - 1 Hrubá výpočetní síla

Věta 0 - 1: Jsou-li X a Y diskrétní náhodné veličiny s n a m body nespojitosti má $X + Y$ diskrétní rozdělení s nejméně $n + m - 1$ a nejvíce $n \cdot m$ bodů nespojitosti.

Pokud tedy děláme konvoluci 2^k i.i.d. náhodných veličin s řešetovitým rozdělením, které má body nespojitosti pouze v bodech $0, \dots, m\delta$ dosáhneme u konvoluce přibližně $m2^k$ bodů nespojitosti. Pro výpočet konvoluce dvou veličin s m body nespojitosti potřebujeme udělat řádově m^2 operací. Přibližný celkový počet aproximací při této metodě je dán následující tabulkou:

m/k	1	2	3	5	10	15
2	4	16	64	1024	1048576	1073741824
5	25	100	400	6400	6553600	6710886400
10	100	400	1600	25600	26214400	26843545600
50	2500	10000	40000	640000	655360000	6,71089E+11
100	10000	40000	160000	2560000	2621440000	2,68435E+12

Vzhledem k obvyklému rozsahu počtu smluv $> 2^{13}$ by bylo spočtení konvoluce pro dostatečně jemná dělení nedostupné v reálném čase.

Pozn. 1: Zabýváme se pouze počty $m = 2^k$, pro ostatní m je možné výsledek dosáhnout tak, že

$$m = \sum_{k=0}^{\infty} a_k 2^k, \quad \text{kde } a_k = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases},$$

$$X^{*m} = X^{*k_1} \otimes \dots \otimes X^{*k_l},$$

kde k_1 je odpovídá prvnímu k , pro něž $a_k = 1$ a podle dvojkového rozkladu m odpovídají i další k_i , $i = 1, \dots, l$ výskytům jedničky ve dvojkovém zápise m .

0-2 Jak porovnávat aproximace

Pro určování kvality různých druhů aproximací S^{ind} je potřeba stanovit metriku, která bude stanovovat "vzdálenost" od původního modelu.

Standardní volbou je tzv. stopp-loss metrika řádu 1:

$$d_1(X, Y) := \sup_t \left| \int_t^{\infty} (x - t) d(F_X(x) - F_Y(x)) \right| = \sup_t |E(X - t)_+ - E(Y - t)_+|$$

Ve výše uvedeném příkladu pojistných smluv tato metrika určuje odchylku dvou stopp-loss pojistných odpovídajících jednotlivým modelům (Gerber 1981, str. 71). Existuje zobecnění d_1 na $d_m, m \in \mathbb{N}$, která je takzvanou ideální metrikou řádu m , což znamená:

Definice 0-1: Pro náhodné veličiny X_1, X_2, Z , kde (X_1, X_2) je nezávislý se Z a nenulovou konstantu c platí:

(i) $d_m(X_1 + Z, X_2 + Z) \leq d_m(X_1, X_2)$ a

$$(ii) \quad d_m(cX_1, cX_2) = |c|^m d_m(X_1, X_2).$$

a tím platí i

Lemma 0-2:

(a) Pro X_1, \dots, X_n nezávislé a Y_1, \dots, Y_m nezávislé a $c_i > 0$

$$d_m \left(\sum_{i=1}^n c_i X_i, \sum_{i=1}^n c_i Y_i \right) \leq \sum_{i=1}^n c_i^m d_m(X_i, Y_i).$$

(b) Pokud $E(X^j - Y^j) = 0, 1 \leq j \leq m$, potom

$$d_m(X, Y) \leq \frac{k_m(X, Y)}{m!} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|x|^{m-1}}{(m-1)!} |F_X(x) - F_Y(x)| dx \leq E |X|^{m-1} - Y|Y|^{m-1}|$$

Důkaz : (a) Z trojúhelníkové nerovnosti a ideality. (b) Rachev 1991, str. 320.

2. TEORETICKÁ POROVNÁNÍ

Pro aproximaci individuálního modelu se často používá tzv. kolektivní model, který lze zapsat následujícím způsobem:

$$S^{coll} := \sum_{i=1}^N Z_i,$$

kde Z_i jsou i.i.d. s $Z_i \sim V$ a $N \sim Po(\mu)$ a Z_i, N jsou nezávislé.

$$\mu := \sum_{i=1}^n p_i, \quad V := \sum_{i=1}^n \frac{p_i}{\mu} V_i$$

V příkladě pojistných smluv lze N nahlížet jako celkový počet pojistných událostí z n smluv a Z_i jako výši konkrétní škody. S^{coll} můžeme tedy zapsat

$$S^{coll} = \sum_{i=1}^n S_i^{coll}, \quad (+)$$

kde $S_i^{coll} = \sum_{j=1}^{N_i} Z_{ij}$, kde $N_i \sim Po(p_i)$ a $Z_{ij} \sim V_i$.

Pozn. 1: $ES^{ind} = ES^{coll}$, ale $VarS^{ind} = \sum_{i=1}^n p_i Var(C_i) + \sum_{i=1}^n p_i(1-p_i)(EC_i)^2 <$

$$< VarS^{coll} = \sum_{i=1}^n p_i Var(C_i) + \sum_{i=1}^n p_i (EC_i)^2.$$

Pozn. 2: Vyjádření (+) lze upravit tak, aby se shodovaly oba momenty. Tento model budu dále označovat S_{param}^{coll} . Při $a_i := EC_i$ a $b_i := EC_i^2$ vypadá takto:

$$S_i^{coll} = \sum_{j=1}^{N_i} Z_{ij}, \quad Z_{ij} \sim u_i C_i, \quad N_i \sim Po(\mu_i) \quad \mu_i := \frac{p_i b_i}{b_i - p_i a_i^2}, \quad u_i := \frac{p_i}{\mu_i}$$

I - 0 Specifické výpočty pro exponenciální model

Nejprve provedeme několik pomocných výpočtů pro případ výše zmíněného homogenního ($p_i = p$) exponenciálního ($V_i \sim Exp(\theta)$) modelu, ty využijeme později v praktických příkladech

$$d_1(X_1, S_1^{coll}) = \sup_t \left| \int_t^{\infty} (x-t) d(F_{X_1}(x) - F_{S_1^{coll}}(x)) \right| \leq \left| \int_0^{\infty} x \sum_{k=0}^{\infty} f_{\Gamma(\theta, k)}(x) c_k dx \right| = \odot$$

kde $f_{\Gamma(\theta,k)}(x)$ je hustota Γ rozdělení s příslušnými parametry (pro $k = 0$ uvažujeme δ -funkci a

$$c_k = \begin{cases} |1 - p - e^{-p}| & k = 0 \\ p(1 - e^{-p}) & k = 1 \\ \frac{e^{-p}p^k}{k!} & k \geq 2 \end{cases}$$

což odpovídá rozdílu mezi jednotlivými pravděpodobnostmi k -tých konvolucí C_i tvořících X_1 a S_1^{coll} . Odtud dostáváme

$$\odot \leq \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} |xc_k f_{\Gamma(\theta,k)}(x)| dx \stackrel{(a)}{=} p(1 - e^{-p})\theta + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{e^{-p}p^k}{k!} k\theta = 2p(1 - e^{-p})\theta.$$

Při přechodu (a) jsme využili znalost o Γ rozdělení. Podobně spočteme i d_2 :

$$\begin{aligned} d_2(X_1, S_1^{coll}) &= \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} |x^2 c_k f_{\Gamma(\theta,k)}(x)| dx = p(1 - e^{-p})2\theta^2 + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{e^{-p}p^k}{k!} \theta^2 (k + k^2) = \\ &= 4p\theta^2(1 - e^{-p}) + p \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-p}p^k}{k!} \theta^2 (k + 1) = p^2\theta^2 + 4p\theta^2(1 - e^{-p}) \end{aligned}$$

Nyní uvažujme ještě parametrizovaný model S_{param}^{coll} . Vzhledem k tomu, že je formální zápis stejný i pro tento model a liší se pouze parametry, proto spočteme hodnotu těchto parametrů a poté je dosadíme do výsledků z předešlého modelu:

$$\mu' := \mu_i = \frac{p_i b_i}{b_i - p_i a_i} = \frac{2p}{2 - p} \implies u = u_i = \frac{p_i}{\mu_i} = \frac{2 - p}{2}$$

Rozdělení zachovávají typ a mění pouze parametr, tzn. $Z_{ij} \sim \frac{2-p}{2} Exp(\theta) \sim Exp(\frac{2-p}{2}\theta)$ a $N_i \sim Po\left(\frac{2p}{2-p}\right)$. Odtud dosazením do výsledků pro jednoduchý model obdržíme:

$$d_1(X_1, S_{param1}^{coll}) = 2p(1 - e^{-\frac{2-p}{2}p})\theta, \quad d_2(X_1, S_{param1}^{coll}) = p^2\theta^2 + 4\frac{2-p}{2}p\theta^2(1 - e^{-\frac{2-p}{2}p})$$

I - 1 Prosté využití vlastností metriky d_1

Zde i v dalších odstavcích je S^{coll} použito pro teoretické vyjádření obou modelů, protože jejich rozklad je formálně shodný. Pokud použijeme lemma 0-2 b) dostáváme:

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) \leq \sum_{i=1}^n d_1(X_i, S_i^{coll})$$

Pro homogení model dostáváme:

$$= n d_1(X_1, S_1^{coll}),$$

pokud bychom neměli informaci o exponencialitě rozdělení V_i mohli bychom rozdíl odhadnout podle lemmatu 0-2 takto:

$$\leq n(E|X_1| + E|S_1^{coll}|) \leq 2np\theta \quad (1)$$

Pokud využijeme jemnější odhad d_1 z bodu I-0 dostaneme. Pro jednoduchý model:

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) \leq 2np(1 - e^{-p})\theta \quad (2)$$

Pro parametrizovaný model:

$$d_1(S^{ind}, S_{param}^{coll}) \leq 2np(1 - e^{-\frac{2-p}{2}p})\theta \quad (3)$$

I-2 Využití ideality metriky d_2

Poněkud sofistikovanější metodou je využít vztahu mezi d_1 a d_2 , kterou popisuje následující lemma:

Lemma I - 1: Pokud $E(X^j - Y^j) = 0$, $j = 1, 2$ platí následující vztah

$$d_1(X, Y) \leq \frac{4}{\sqrt{\pi}} d_2(X, Y)$$

Z nutnosti shody prvních dvou momentů lze odhad použít pouze pro parametrizovaný model. Budeme tedy nejprve odhadovat $d_2(S^{ind}, S^{coll})$:

$$d_2(S^{ind}, S^{coll}) \leq \sum_{i=1}^n d_2(X_i, S_i^{coll})$$

pro homogení model tedy platí $= n d_2(X_1, S_1^{coll})$, bez znalosti rozdělení můžeme opět pouze podle lemmatu 0-2 odhadnout:

$$d_2(X_1, S_1^{coll}) \leq \frac{1}{2} (EX_1^2 + E(S_1^{coll})^2) = EX_1^2 = pb$$

Pro parametrizovaný model by tento hrubý odhad odpovídal:

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) \leq \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{2np\theta^2} \quad (4)$$

Při použití jemnějšího odhadu z bodu I - 0 dostaneme:

$$d_1(S^{ind}, S_{param}^{coll}) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{n \left[p^2\theta^2 + 4 \frac{2-p}{2} p\theta^2 (1 - e^{-\frac{2}{2-p}p}) \right]} \quad (5)$$

I - 3 Využití vlastností d_1 a Poissonova rozdělení

V následujících dvou odstavcích budeme využívat k odhadu podobnost rozdělení Z_{ij} s C_i ($Z_{ij} = u_i C_i$) a tím danou podobnost jejich příslušných konvolucí společně s využitím znalostí o Poissonově rozdělení. Následující věta dává tedy jistým způsobem optimální odhad pokud nevíme nic o rozdělení C_i .

Věta I - 2: Pro parametrizovaný model a $C_i \geq 0$ s.j. platí pro $\forall \Delta_i \geq 1$:

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) \leq \sum_{i=1}^n p_i^2 \tau_i,$$

kde

$$\begin{aligned} \tau_i &:= a_i + \Delta_i v_i + \max(\Delta_i a_i v_i, 2a_i \tilde{v}_i + (1 + \Delta_i a_i v_i p_i) u_i), \\ v_i &:= \frac{a_i^2}{b_i} \leq \frac{1}{p_i}, \quad p_i v_i \leq 1 - \Delta_i^{-1}, \quad \tilde{v}_i := \frac{a_i^2}{b_i - p_i a_i^2} \end{aligned}$$

Důkaz: Rachev 1991, str. 329-331.

Po dosazení všech parametrů dostaneme pro exponenciální model:

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) \leq np^2\theta \left[1 + \frac{2}{2-p} + \frac{p}{2} \right] + np^2 \left[\frac{1}{2-p} + \frac{2-p}{2} \right] \quad (6)$$

I - 4 Využití vlastností d_2 a Poissonova rozdělení

Analogicky jako v odstavci I - 2 odhadneme nejprve d_2 a z něj pak pomocí lemmatu I - 1 i d_1 . Postup odhadu d_2 bude analogický odhadu jako v I-3:

Věta I - 3: Pro $C_i \geq 0$ s.j. platí pro parametrizovaný model:

$$d_2(S^{ind}, S^{coll}) \leq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n p_i^2 \tau_i^*$$

kde $\tau_i^* = b_i + 3a_i^2 + \Delta_i a_i^2 + 2\tilde{v}_i b_i^2 + b_i u_i^2 + \Delta_i a_i p_i$, kde Δ_i, \tilde{v}_i jsou stejné jako ve větě I-2.

Tím máme

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) \leq \frac{4}{\sqrt{2\pi}} \left(\sum_{i=1}^n p_i^2 \tau_i^* \right)^{\frac{1}{2}}$$

Důkaz: Rachev 1991, str. 331-333

Po dosazení dostaneme

$$\tau_1^* = 2\theta^2 + 3\theta^2 + \theta^2 \frac{2}{2-p} + \theta^4 \frac{8}{2-p} + 2\theta^2 \left(\frac{2-p}{2} \right)^2 + \theta \frac{2}{2-p} p$$

a tedy

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) \leq \frac{4}{\sqrt{2\pi}} \left[np^2 \left(\frac{8}{2-p} \theta^4 + \left(7 + \frac{2}{2-p} - 2p + \frac{p^2}{2} \right) \theta^2 + \frac{2p}{2-p} \theta \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

I - 5 Vyžití všech znalostí o modelu

Postup výpočtu bude podobný jako u neuvedených důkazů z předešlých dvou odstavců. S tím, že na rozdíl od obecného případu jsme schopni přesně napočítat k -té konvoluce $C_i \sim Exp(\theta)$, které mají gama rozdělení $C_1^k \sim \Gamma(\theta, k)$ a tak dostaneme velmi přesný odhad $d_1(S^{ind}, S^{coll})$ pro tento model.

$$d_1(S^{ind}, S^{coll}) = \sup_t \left| \int_t^\infty (x-t) d(F_{S^{ind}}(x) - F_{S^{coll}}(x)) \right| \leq \left| \int_0^\infty (x-t) \sum_{k=1}^\infty c_k f_{\Gamma(\theta, k)}(x) dx \right| \leq \sum_{k=1}^\infty c_k E_{\Gamma(\theta, k)} X = \sum_{k=1}^\infty c_k k \theta \quad (8)$$

kde pro neparametrizovaný model platí

$$c_k = \left| \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} - \frac{e^{-np} (np)^k}{k!} \right|$$

I - 6 Aproximace homogéního modelu pomocí normálního rozdělení

V tomto odstavci bude na rozdíl od všech ostatních daleko těžší využít plnou sílu věty při znalosti konkrétního rozdělení C_i a horní mez z věty budeme pro tento typ rozdělení pouze odhadovat.

Věta I - 4: Pokud jsou X_i i.i.d. náhodné veličiny s $a := a_1$ a $\sigma^2 := Var(C_1)$, $p := p_1$, pak platí

$$d_1(S^{ind}, S_{param}^{coll}) \leq 11, 5 [p\sigma^2 + p(1-p)a^2]^{\frac{1}{2}} \left[\tau_3(X_1, Y) + \tau_3 \left(\sum_{i=1}^{N_1} C_i, Y \right) \right]$$

kde $Y \sim N(0, 1)$, $N_1 \sim Po(\mu_1)$ a při označení

$$\tau_3(X, Y) := \max((E|\tilde{X}| + E|Y|), \frac{1}{3}(E|\tilde{X}|^3 + E|Y|^3)), \quad \tilde{X} := \frac{X - EX}{\sqrt{Var(X)}}$$

Důkaz: [2], str. 328 a v [5], str. 27 lze nalézt určité zpřesnění (zpřesnění)

Nejprve uvedme absolutní momenty normálního rozdělení.

$$E|Y| = \sqrt{\frac{2}{\pi}}, \quad E|Y|^3 = \sqrt{\frac{8}{\pi}}$$

Pro normalizaci je potřeba znát hodnotu rozptylu, ta je (Gerber 1981, str. 50)

$$\text{Var} X_1 = (1-p)p\theta^2 + p\theta^2 = (2-p)p\theta^2$$

Nyní spočteme momenty:

$$\begin{aligned} E|X_1 - EX_1| &= p(1-p)\theta + p \left[\int_{-p\theta}^0 -x \frac{1}{\theta} e^{-x/\theta} dx + \int_0^\infty x \frac{1}{\theta} e^{-x/\theta} dx \right] \\ &= p(1-p)\theta + p\theta e^{p\theta} (1 - e^p(1-p)) = p\theta [1 - p + e^{p\theta}(1 - e^p(1-p))] \end{aligned}$$

Spočíst lze i hodnotu $E|\tilde{X}|^3$, ale použijeme odhad:

$$E|X_1 - EX_1|^3 \leq (p\theta)^3 + pEC_1^3 \leq (p\theta)^3 + 6p\theta^3$$

v prostředním členu odpovídá první sčítanec záporné a druhý kladné části rozdělení $X_1 - EX_1$.

Podobným trikem budeme postupovat i pro odhad $\tau_3(S_1^{\text{coll}}, Y)$. Vzhledem k parametrizaci zvolené tak, aby se shodovali první dva momenty je rozptyl stejný jako pro X_i

$$E|S_1^{\text{coll}} - ES_1^{\text{coll}}| \leq p\theta + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-p} p^k}{k!} k\theta \leq 2p\theta$$

a pro výpočet třetího momentu uvedeme nejprve hodnotu třetího momentu $\Gamma(\theta, k)$ rozdělení:

$$E_{\Gamma(\theta, k)} X^3 = \theta^3(k^3 + 3k^2 + 2k)$$

s tímto vyjde

$$E|S_1^{\text{coll}} - ES_1^{\text{coll}}|^3 \leq (p\theta)^3 + \theta^3 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-p} p^k}{k!} (2k + 3k^2 + k^3) = \theta^3(2p^3 + 6p^2 + 6p)$$

Výraz, který by vzniknul po dosazení do věty I - 4 budeme označovat (9).

3. NUMERICKÉ APROXIMACE

Věta 0 - 1 říká kolik bodů nespojitosti má konvoluce diskretních n.v. a víme, že minimálního počtu lze dosáhnout v případě řetovitého rozdělení. Ovšem i pro toto rozdělení nám počet bodů nespojitosti roste velmi rychle. Proto bude vhodné rozdělení konvoluce aproximovat novou náhodnou veličinou, která má méně bodů nespojitosti.

Nejprve zvolme diskretní náhodnou veličinu K_i aproximující rozdělení C_i , aby se od C_i ve smyslu metriky d_1 příliš nevzdálila. Pokud rozdělení C_i nemá příliš těžký chvost zvolím δ tak, aby pro použitelné n platilo $\int_{n\delta}^{\infty} (x - n\delta) dx \leq \delta$, pak rozdělení K_i volím s následující distribuční funkcí

$$F_{K_i}(x) = \sum_{i=0}^n I_{[x \leq i\delta]} P_{i\delta}(\delta), \quad \text{kde } P_{i\delta}(\delta) = P(C_1 \in [i\delta, (i+1)\delta])$$

Vzhledem k tomu, že $C_i \stackrel{st}{\geq} K_i$ můžeme odhadnout

$$d_1(C_1, K_1) \leq \sum_{k=0}^{n-1} \int_{k\delta}^{(k+1)\delta} xF_{C_1}(dx) - i\delta P_{i\delta}(\delta) + \int_{n\delta}^{\infty} (x - n\delta)F_{C_1}(dx) \leq 2\delta$$

I pokud volíme malý krok $\delta \leq EX/1000$ nebude pro rozdělení s nerostoucí intenzitou poruch problém najít n dostatečně malé ($n \leq 10000$) požadované vlastnosti.

Vlastní algoritmus pro redukci počtu bodů nespojitosti je takový, že při každém kroku vynechám liché násobky délky předešlého kroku a jejich pravděpodobnost přidáme nejbližšímu nižšímu sousedovi. Samozřejmě, že lepším způsobem redukce bodů by bylo rozdělit pravděpodobnost mezi oba sousedy rovným dílem (jak ukazuje tabulka na této stránce), ale pak bychom ztratili jistotu o tom, kterým směrem se vzdalujeme od originální náhodné veličiny.

Tím získáme rozdělení, které má opět pouze n bodů nespojitosti je řešitelné a algoritmus nenabývá na výpočtové náročnosti.

Počet veličin	k	d_1	Očištěná pro $p = 0, 1$	Oběma sousedům
2	1	1	0,19	1
8	3	12	4,41373116	8
128	7	448	312,4872656	256
1024	10	5120	4035,898124	2816
8192	13	53248	44575,185	28672

Nyní ještě zbývá popsat metodu jak získat m -té konvoluce pro libovolné $m \in \mathbb{N}$. Nejprve najdu největší l takové, že $2^l | m$ a pro něj najdu aproximaci $m/2^l$ -té konvoluce. Tu najdeme tak, že ve všech dříve vytvořených aproximacích 2^i -tých konvolucí vynecháme body a přeneseme jejich pravděpodobnosti do nejbližších nižších sousedů, násobků kroku $2^{m/2^l}\delta$. Toto shluknutí nám způsobí u každé veličiny chybu $2^{m/2^{l-1}}\delta$. Konvoluce takto vzniklých aproximací nám pak dáva aproximaci požadované konvoluce $2^{m/2^l}$, na kterou pak provedeme l kroků původního algoritmu. Při tomto postupu se zvyšuje počet bodů, ale ten nikdy nepřesáhne $2n$.

Záleží tedy pouze na zvoleném δ jak přesná bude tato aproximace. Algoritmus je možné uvažovat za spočitatelný pro n řádu 10^4 , neboť má výpočtovou složitost přibližně $(2n)^2k$.

V případě exponenciálního rozdělení je potřeba uvažovat ještě distanci původní náhodné veličiny $C_i \sim \text{Exp}(\theta)$ od její aproximace K_i a jejich příslušných konvolucí

$$d_1(C_i^{*2^k}, K_i^{*2^k}) \leq 2^{k+1}\delta,$$

vzhledem k vlastnostem metriky d_1 platí i pro obecné m vztah $d_1(C_1^{*m}, K_1^{*m}) \leq 2m\delta$. Škoda $X_i := C_i D_i$ má nenulovou pravděpodobnost $P(X_i = 0)$. Proto při jednotlivých krocích algoritmu bude mít neshluknutá náhodná veličina určitou pravděpodobnost toho, že je rovna nule. S touto pravděpodobností shluknutí nic neudělá. O tuto hodnotu je proto možné odhad očistit (viz. příklad v tabulce).

4. SROVNÁNÍ APROXIMAČNÍCH METOD

Pro konkrétní příklady zvolme různé počty smluv n , rozdělení s různou pravděpodobností výskytu škody p , ale její výši ponechme stejnou tak, jak vyjde v příkladu uvedeném ve IV-té kapitole, t.j. $\theta = 0, 13$.

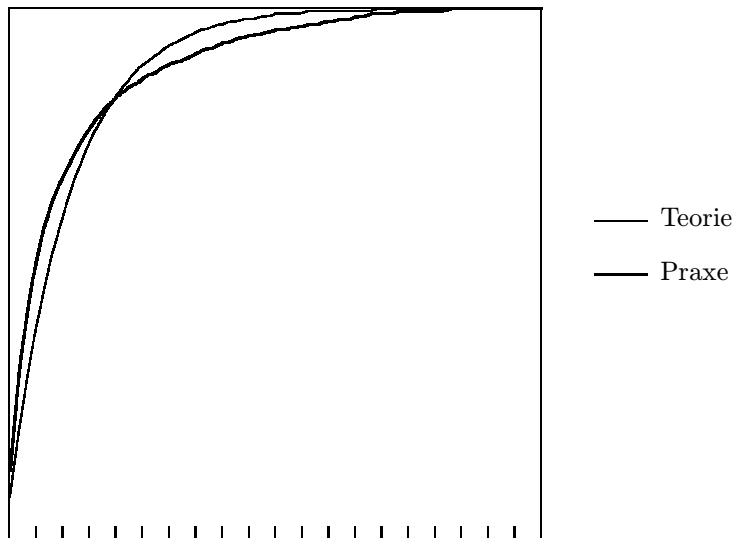
Formulka číslo	1	2	3	4
n	10000	10000	1000	1000
p	0,1	0,01	0,1	0,01
θ	0,13	0,13	0,13	0,13
(1)	260,00	26,000	26,000	2,6000
(2)	24,74	0,259	2,474	0,0259
(3)	25,98	0,260	2,598	0,0260
(4)	13,12	4,149	4,149	1,3120
(5)	6,42	0,655	2,032	0,207
(6)	174,97	1,759	17,497	0,1759
(7)	6,13	0,592	1,939	0,187
(8)	6,63	0,065	0,663	0,0065
(9)	4,01	3,244	4,006	3,2445
Numericky	5,19	3,851	0,288	0,1865

Je zřejmé, že neexistuje univerzální odhad nejlepší pro všechny kombinace n a p . Pro vysoká n a p je nejlepším odhadem aproximace přes normální rozdělení (9), pro malá p je nejlepší odhad přes metriku d_2 (5) a (7), či přímý odhad (8).

5. PŘÍKLAD Z PRAXE

V předešlých kapitolách jsme se zabývali rozdílem pro exponenciální rozdělení C_i . Nebyla ovšem řešena otázka jak dobrou aproximací je použití tohoto rozdělení místo skutečného rozdělení. Následující graf ukazuje jak vypadá rozdíl distribučních funkcí výše škody získané z dat jedné pojišťovny (z havarijního pojištění aut) vůči exponenciálnímu rozdělení se stejnou střední hodnotou.

Poznamenejme, že hodnota metriky d_1 pro skutečnou výši škod a její exponenciální aproximaci zachovávající střední hodnotu je 0,005183, což představuje 4,4589% střední hodnoty výše škod.



6. LITERATURA

- [1] Gerber, H. (1981): An Induction to Mathematical Risk Theory. Huebner Foundation Monograph.
- [2] Rachev, S.T.(1991): Probability Metrics and the Stability of Stochastic Models. John Wiley & Sons
- [3] Rotkovský, M.(1999): WDS'99 Proceedings of contributed papers. Matfyzpress
- [4] Zolotarev, V. M.(1976): Metric distances in spaces of random variables and their distributions. Math. USSR sb. 30
- [5] Zolotarev, V. M.(1986): Contemporary Theory of Summation of Random Variables. Nauka, Moscow. (In Russian) and their distributions. Math. USSR sb. 30

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSKÁ 83, 186 75 PRAHA 8
E-mail address: `rotkovsk@karlin.mff.cuni.cz`

OPTIMÁLNÍ KLASIFIKAČNÍ STROMY

PETR SAVICKÝ, JAN KLASCHKA A JAROMÍR ANTOCH

ABSTRAKT. Classification and regression trees have been traditionally grown by recursive partitioning, i.e. by a top-down search for “locally optimal” splits. The “local”, or “one-step”, optimization of splits can to some extent, using the present power of computer hardware, be substituted by the full optimization of whole trees. In this paper, two bottom-up tree optimization algorithms are outlined. Since our procedures guarantee the minimum classification error on the training data only, some results of experiments aimed at the investigation of the generalization properties of the optimal trees are presented.

Резюме: Методы анализа данных при помощи моделей в форме дерева развиваются с 60-ых лет нашего века. Классификационные и регрессионные деревья конструируемые в прошлых десятилетиях не обладали глобальной оптимальностью, поскольку вычислительная техника не позволяла больше чем оптимизацию индивидуальных ветвлений. Благодаря неуклонному прогрессу технологии, оптимизация деревьев все-таки стала в самом конце тысячелетия реализуемой задачей. В статье изучаются два алгоритма построения классификационных деревьев обладающих минимальной ошибкой классификации используемых в процессе конструкции дерева данных. Точность построенных нашими алгоритмами деревьев при классификации других независимых данных обсуждается на основе эксперимента.

1. ÚVOD: STROMY VČERA A DNES

Na obr. 1 je naznačena úloha analýzy dat: Dva typy objektů, kolečka a křížky, mají být od sebe odděleny na základě hodnot vysvětlujících proměnných X_1 a X_2 . Na obr. 2 je klasifikační strom, který problém dokonale řeší. Na první pohled je tedy vidět, že úloha je pro klasifikační stromy jako stvořená. Na druhý pohled už věc není tak jednoduchá. Klasifikační strom, který je perfektním řešením, existuje, ale není jisté, jestli by se jej obvyklými metodami konstrukce klasifikačních stromů podařilo najít. Větvení podle X_1 v kořeni totiž nepřináší žádný bezprostřední efekt – pro $X_1 = 0$ i $X_1 = 1$ jsou relativní četnosti koleček a křížků stejné. Teprve následné rozvětvení podle X_2 vede k oddělení obou druhů objektů. Záleží tedy na tom, jakým způsobem se řešení v množině všech možných klasifikačních stromů hledá. Pokud metoda sleduje jen bezprostřední efekt větvení “jeden krok vpřed”, může “minout” velmi dobrý klasifikátor.

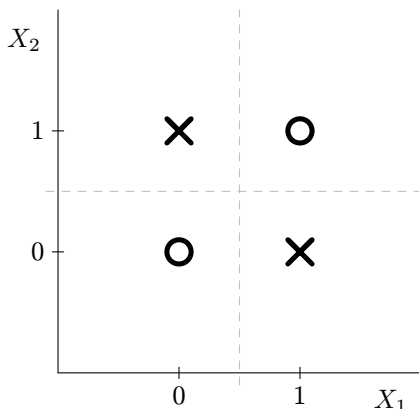
Prakticky všechny metody analýzy dat založené na stromech, které se objevily od 60. let do současnosti, mají jedno společné: *Vytvářejí stromy “shora dolů”*. Nejdříve vyberou vhodné větvení kořenového uzlu a určí jeho “potomky” (dva nebo více, podle toho, o jakou metodu se jedná), potom hledají co nejlepší větvení pro tyto

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62H30; Secondary 62-07.

Klíčová slova. Klasifikační stromy, kombinovaná ztráta, optimální stromy, algoritmy, procedury zdola-vzhůru.

Práce prvních dvou autorů byla podporována grantem GA ČR 201/00/1482, práce třetího autora grantem GA ČR 201/00/0769 a MSM 113200008.

“potomky”, atd. Přitom je dobře známo, že stromy, které tímto způsobem vznikají, nejsou obecně “globálně” optimální. Jinými slovy: Pokud existuje vynikající klasifikační strom, k jehož konstrukci jsou třeba, jako v situaci na obr. 1, kroky, jejichž efekt se neprojeví okamžitě, může se snadno stát, že tento strom nebude nalezen, a přednost dostane méně kvalitní klasifikátor.

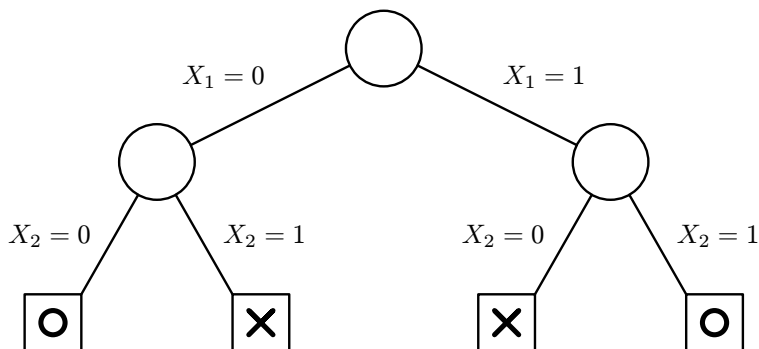


Obr. 1. Jednoduchá modelová situace: Kolečka a křížky se mají oddělit na základě hodnot proměnných X_1 a X_2 .

Breiman *et al.* (1984) obhajují tento přístup ve své klasické monografii o klasifikačních a regresních stromech (viz paragraf 2.5.8) slovy: “*At this stage of computer technology, an overall optimal tree growing procedure does not appear feasible for any reasonably sized data set.*” Také Gelfand *et al.* (1991) říkají o optimalizaci stromů skepticky: “*... it is clear that computing cost has some relevance in classification tree design: nobody seriously suggests designing truly optimal trees (optimizing over all possible sequences of splits, etc.).*”

Výkonnost počítačů od poloviny 80. let (i od začátku 90. let) řádově vzrostla, takže dnes si můžeme *do určité míry* dovolit “pěstovat” stromy optimálně. V tomto článku budou popsány dva nové algoritmy umožňující při nepříliš velkém počtu vysvětlujících proměnných konstruovat klasifikační stromy, které *mají mezi všemi možnými binárními klasifikačními stromy téže velikosti nejmenší chybu klasifikace* na trénovacích datech. Naše dosavadní experimentální zkušenosti ukazují, že stromy, které jsou v uvedeném smyslu optimální, mají často také dobré generalizační vlastnosti (tj. dobře se chovají na datech, která nebyla použita ke konstrukci stromu). V několika příkladech klasifikačních úloh, kde vztah mezi prediktory a závisle proměnnou je složitý, byly generalizační vlastnosti optimálních stromů prokazatelně lepší než u stromů vytvořených “klasicky”. Není úplně jasné, jestli by Breiman *et al.* uznali, že v úlohách, které jsme dnes schopni pomocí optimálních klasifikačních stromů řešit, se vyskytují “any reasonably sized data sets”, popř. zda by Gelfand *et al.* shledali, že optimální stromy navrhujeme “seriously”.

Kromě klasické (zejména Breiman *et al.*, 1984) a novější (např. Siciliano, 1998) “stromové” literatury inspirovaly náš výzkum také práce z poslední doby (např. Pijls & Bioch, 1999), které reprezentují nový trend: *Některé problémy analýzy dat jsou sice velmi časově a prostorově složité (např. jsou NP-těžké, popř. mají exponenciální složitost), ale “rozumně velké” úlohy se dají v únosném čase řešit, když se veškerá data uloží do operační paměti.*



Obr. 2. Klasifikační strom, který řeší úlohu z obr. 1.

2. ZÁKLADNÍ POJMY A ZNAČENÍ: KRYCHLE, STROMY A CHYBY

Budeme se zabývat klasifikačními modely s $P \geq 1$ prediktory (nezávisle proměnnými) X_1, \dots, X_P nabývajících hodnot z $\{0, 1\}$ a $K \geq 2$ třídami C_1, \dots, C_K . (Zobecnění pro vícehodnotové prediktory je možné např. s použitím pomocných binárních proměnných.)

Data jednotlivého případu sestávají z *vektoru prediktorů* $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_P) \in \{0, 1\}^P$ a *kódu třídy* $C \in \{C_1, \dots, C_K\}$. Množina $\{0, 1\}^P$ je *prostor prediktorů*.

Velmi frekventovaným pojmem je v této práci *krychle*. *Krychlemi* zde nazýváme takové podmnožiny $B = A_1 \times \dots \times A_P$ prostoru prediktorů, že pro každý index i je buďto $A_i = \{0\}$, nebo $A_i = \{1\}$, nebo $A_i = \{0, 1\}$.

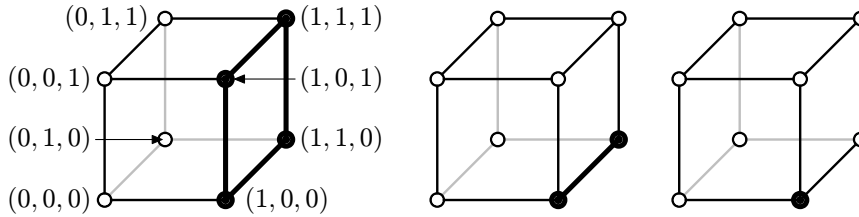
Protože zápis krychlí ve formě kartézského součinu je těžkopádný, používáme spíše reprezentaci krychlí čísly (kódy) v trojkové soustavě. Je-li $B = A_1 \times \dots \times A_P$ krychle, odpovídá jí číslo s ternárním rozvojem $a_1 \dots a_P$, kde pro $i = 1, \dots, P$ je $a_i = 0$, když $A_i = \{0\}$, $a_i = 1$, když $A_i = \{1\}$ a $a_i = 2$, když $A_i = \{0, 1\}$. (Toto kódování krychlí využívá také program, o kterém budeme referovat v paragrafu 3, při výpočtu adres oblastí v paměti počítače přidělených krychlím.)

Několik ilustrativních příkladů krychlí (pro $P = 3$) je na obr. 3.

Symbol \mathcal{B}_P bude značit množinu všech 3^P krychlí $B \subseteq \{0, 1\}^P$. Krychle B je *podkrychlí* krychle B' , když $B \subseteq B'$. V termínech ternárních reprezentací $a_1 \dots a_P$ a $a'_1 \dots a'_P$ krychlí B a B' to znamená, že pro $i = 1, \dots, P$ je $a_i = a'_i$, kdykoli $a'_i \neq 2$.

Důvod, proč se krychlemi zabýváme, spočívá v tom, že kterýkoli uzel libovolného klasifikačního stromu můžeme ztotožnit s krychlí, a naopak kterákoli krychle připadá alespoň teoreticky v úvahu jako možný uzel klasifikačního stromu. Pokud cesta od kořene k nějakému uzlu v diagramu popisujícím klasifikační strom vede přes nějaká větvení, mají některé proměnné v uzlu pevně dané hodnoty 0 nebo 1 (podle toho, kde si příslušná cesta “na rozcestích vybere” nuly nebo jedničky), ostatní proměnné jsou pak v uzlu “volné” a mohou zde nabývat (ačkoli v datech ne vždy nabývají) obou hodnot z $\{0, 1\}$. Krychle jsou jakési “stavební kameny”, které jsou k dispozici pro konstrukci stromu jako potenciální uzly.

Cílem našich metod samozřejmě je sestavit klasifikátor stromového typu, který přiřazuje kód třídy každé kombinaci hodnot prediktorů, která se může vyskytnout. Jako pomocný technický prostředek konstrukce však potřebujeme “parciální klasifikátory”, které kód třídy přiřazují jen těm hodnotám vektoru prediktorů, které patří do určité krychle. O těchto “parciálních klasifikátorech” budeme mluvit jako o *stromech pro danou krychlí*.



Obr. 3. Příklady krychlí (při $P = 3$). Zleva doprava jsou zvýrazněny krychle s ternárními kódy 122, 120 a 100.

Na binární klasifikační strom pro krychli B se můžeme dívat jako na popis jistého rozkladu B na podkrychle spolu s funkcí definovanou na B , která je na každé z těchto podkrychlí konstantní a nabývá hodnoty z $\{C_1, \dots, C_K\}$. Je-li T strom, značíme příslušnou funkci f_T a její definiční obor D_T . Formálněji a přesněji řečeno, binární klasifikační strom T je:

- (i) buďto *triviální strom*, když D_T je krychle a f_T je konstantní funkce s hodnotou z $\{C_1, \dots, C_K\}$ definovaná na D_T ,
- (ii) nebo *složený strom*, který lze definovat jako dvojici stromů $T = (T_L, T_R)$, kde D_{T_L} a D_{T_R} jsou disjunktní a $D_{T_L} \cup D_{T_R}$ je krychle. Potom platí $D_T = D_{T_L} \cup D_{T_R}$ a funkce f_T se rovná f_{T_L} na D_{T_L} a f_{T_R} na D_{T_R} .

Stromový diagram odpovídající triviálnímu stromu sestává z jediného uzlu, který je současně kořenem i listem (koncovým uzlem). Diagram složeného stromu $T = (T_L, T_R)$ obsahuje krychli D_T jako kořenový uzel, a kromě kořene další uzly, totiž uzly stromů T_L a T_R .

Ilustrativní příklad stromu pro krychli, která není totožná s prostorem prediktorů, je uveden na obr. 4.

Asi každý tradiční výklad o klasifikačních stromech uvádí, že strom je v uzlu, který není uzlem koncovým, rozvětven podle hodnot některého prediktoru. To samozřejmě platí i v případě stromů pro krychle, ale dosud zde nebylo explicitně řečeno, jak je prediktor, podle něž je strom v uzlu rozvětven, dán. Formálně lze tento prediktor určit následujícím způsobem: Je-li krychle B uzlem stromu T_0 , a není přitom uzlem koncovým, je B kořenovým uzlem složeného stromu $T = (T_L, T_R)$, který dostaneme tak, že funkci f_{T_0} zúžíme na $D_T = B$. Podmínka, že D_{T_L} , D_{T_R} i $D_T = D_{T_L} \cup D_{T_R}$ jsou krychle, přičemž D_{T_L} a D_{T_R} jsou disjunktní, může být splněna jedinečně tak, že ternární kódy $a_1^L \dots a_P^L$, resp. $a_1^R \dots a_P^R$, resp. $a_1 \dots a_P$ krychlí D_{T_L} , D_{T_R} i D_T jsou shodné až na jednu – řekněme i -tou – pozici, kde $a_i = 2$ a $\{a_1^L, a_1^R\} = \{0, 1\}$. Strom T_0 je pak v B rozvětven podle prediktoru X_i .

Říkáme, že strom T zařazuje (klasifikuje) vektor prediktorů $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_P) \in B$ do třídy C , když $f_T(\mathbf{x}) = C$. Obdobně říkáme také o jednotlivém případě, že jej strom T zařazuje (klasifikuje) do třídy C , když T klasifikuje do C vektor prediktorů $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_P) \in B$ tohoto případu.

Velikost triviálního stromu T je $|T| = 1$. Pro složený strom $T = (T_L, T_R)$ definujeme velikost $|T|$ rekurzivně vztahem $|T| = |T_L| + |T_R|$. (Všimněme si, že $|T|$ se rovná počtu listů stromového diagramu odpovídajícího stromu T .)

Množinu všech stromů T pro krychli B , tj. stromů, pro něž platí $D_T = B$, budeme značit $\mathcal{T}(B)$. Místo složitějšího $\mathcal{T}(\{0, 1\}^P)$ budeme jako rovnocenný symbol používat \mathcal{T} . Symbolem $\mathcal{T}_m(B)$ budeme označovat množinu všech stromů pro krychli B , jejichž velikost je rovna m (argument B budeme vynechávat, pokud B je celý prostor prediktorů).

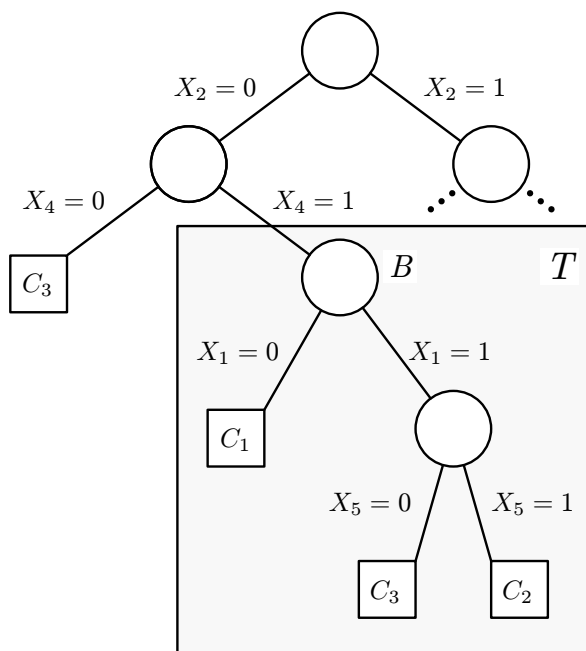
Je-li \mathcal{L} datový soubor (datová množina) a B krychle, bude \mathcal{L}_B značit množinu těch případů z \mathcal{L} , jejichž vektor prediktorů patří do B .

Nechť je dán datový soubor \mathcal{L} velikosti $N > 0$, krychle $B \in \mathcal{B}_P$ a klasifikační strom $T \in \mathcal{T}(B)$. Nechť $N_i > 0$ je pro $i = 1, \dots, K$ počet těch případů z \mathcal{L} , které patří do třídy C_i . Nechť $N_{ij}(B)$ pro $i, j = 1, \dots, K$ je počet těch případů z \mathcal{L}_B , které patří do třídy C_i a současně jsou stromem T klasifikovány do C_j . Pro $i, j = 1, \dots, K$ značíme symbolem Z_{ij} ztrátu při klasifikaci (chybné, když $i \neq j$) jednoho případu ze třídy C_i do C_j . Nechť π_1, \dots, π_K jsou apriorní pravděpodobnosti tříd¹.

Chyba (nepřesnost) $R(T|\mathcal{L}_B)$ klasifikátoru T na \mathcal{L}_B je definována jako

$$(1) \quad R(T|\mathcal{L}_B) = \sum_{i=1}^K \frac{\pi_i}{N_i} \sum_{j=1}^K Z_{ij} N_{ij}(B).$$

Všimněme si, že pro $T = (T_L, T_R) \in \mathcal{T}(B)$, $T_L \in \mathcal{T}(B_L)$ a $T_R \in \mathcal{T}(B_R)$ platí $R(T|\mathcal{L}_B) = R(T_L|\mathcal{L}_{B_L}) + R(T_R|\mathcal{L}_{B_R})$.



$$B = \left\{ (X_1, \dots, X_5) \in \{0, 1\}^5; X_2 = 0, X_4 = 1 \right\} \\ = \{0, 1\} \times \{0\} \times \{0, 1\} \times \{1\} \times \{0, 1\} \equiv 20212_3$$

Obr. 4. Naznačený diagram klasifikačního stromu, $P = 5$, $K = 3$. V rámečku je znázorněn strom T pro krychli $B = D_T$ s ternárním kódem 20212. Tento kód říká, že cesta od celého prostoru prediktorů, kódovaného 22222, ke krychli B ve stromovém diagramu vede přes volby $X_2 = 0$ a $X_4 = 1$. (Kód však neinformuje o tom, v jakém pořadí tyto volby nastávají.) Funkce f_T nabývá na krychlích s kódy 00212, 10210 a 10211, které jsou koncovými uzly stromu T a tvoří rozklad krychle B , hodnoty C_1 , C_3 a C_2 . Strom T je složený a lze jej zapsat jako $T = (T_L, T_R)$. Strom T_L je triviální a jeho kořenem a jediným listem je krychle

¹Viz např. Breiman *et al.*, 1984, kde jsou uvedeny různé způsoby zadání a použití apriorních pravděpodobností implementované v programu *CART*.

s kódem 00212. Strom T_R je složený, jeho kořenem je krychle s kódem 10212 a má dva listy s kódy 10210 a 10211.

Často (a jmenovitě v příkladech, které budou uvedeny v paragrafu 6) pokládáme $\pi_i = N_i/N$ pro $i = 1, \dots, K$ (tj. apriorní pravděpodobnosti ztotožňujeme s relativními frekvencemi tříd v datech), $Z_{ii} = 0$ pro $i = 1, \dots, K$ a $Z_{ij} = 1$ pro $i \neq j$, kde $i, j = 1, \dots, K$. Chyba (1) se pak redukuje na

$$R(T|\mathcal{L}_B) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^K N_{ij}(B) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^K N_{ii}(B).$$

Pro $B = \{0, 1\}^P$ se tedy jedná o “obyčejnou” relativní četnost chybně klasifikovaných pozorování v souboru².

3. OPTIMALIZAČNÍ ALGORITMY

Při tradičním “pěstování” stromů tzv. rekurzivním dělením (recursive partitioning) se nejdříve hledá nejlepší větvení pro kořenový uzel (tj. rozklad prostoru prediktorů na dvě podkrychle), potom se hledají nejlepší větvení (tedy rozklady) pro podkrychle získané v prvním kroku, atd. Ve chvíli, kdy se vybírá nejlepší rozklad nějaké krychle, nejsou nejlepší rozklady jejích podkrychlí zpravidla ještě známy. (Vzácný příklad pokusu o “pohled o více kroků dopředu” se najde např. v práci Friedman, 1979.)

Pro optimalizační přístup, navržený poprvé v článku Savický *et al.* (2000), je charakteristické, že se hledá (v jistém smyslu) nejlepší strom mezi *všemi možnými stromy* dané velikosti. Naše algoritmy konstruují stromy (na rozdíl od klasických metod) “zdola nahoru”. V průběhu konstrukce optimálního stromu (pro celý prostor prediktorů) se postupně přiřazují optimální stromy všem krychlím z \mathcal{B}_P . Pořadí, v jakém se krychle probírají, je takové, že ve chvíli, kdy se vybírá nejlepší strom (a tím také větvení) pro nějakou krychli, jsou už známy optimální stromy přiřazené všem podkrychlím dané krychle. Výběr větvení pro kořenový uzel (tj. pro krychli $B = \{0, 1\}^P$) není při konstrukci stromu úvodním, ale závěrečným krokem.

Za to, že naše algoritmy skutečně vedou k cíli, vděčíme tvrzením, která nám dovoluují při hledání optimálního složeného stromu $T = (T_L, T_R) \in \mathcal{T}(B)$ nebo $\mathcal{T}_m(B)$ optimalizovat levou a pravou část stromu T_L a T_R odděleně. (Kdybychom se o žádnou takovou větu nemohli opřít, museli bychom množinu $\mathcal{T}(B)$ nebo $\mathcal{T}_m(B)$ prohledávat exhaustivně, což by z hlediska výpočetní složitosti bylo, jak je dnes v módě říkat, “o něčem jiném”.) Tato tvrzení budou později uvedena jako věty 2 a 3.

3.1. Minimalizace kombinované ztráty (Algoritmus I). Navrhli a implementovali jsme algoritmus, který pro datový soubor \mathcal{L} a pro danou hodnotu *parametru složitosti* $\alpha \geq 0$ sestrojí klasifikační strom minimalizující *kombinovanou ztrátu* (viz Breiman *et al.*, 1984, kde se používá termín *cost-complexity measure*) definovanou jako

$$R_\alpha(T|\mathcal{L}) = R(T|\mathcal{L}) + \alpha|T|.$$

Připomeňme, že při prořezávání založeném na kombinované ztrátě (minimal cost-complexity pruning) v metodě *CART* (viz Breiman *et al.*, 1984) se minimalizuje tentýž výraz. Je zde ovšem podstatný rozdíl: Hledání nejlepšího stromu se v metodě *CART* omezuje na *množinu stromů získaných prořezáváním jednoho konkrétního stromu*. Náš algoritmus naproti tomu minimalizuje kombinovanou ztrátu *v množině všech možných stromů*.

²V tomto případě mluvíme právem o chybě, zatímco obecně by bylo vlastně správnější používat spíše termín *ztráta*.

Předpokládejme, že platí $R_\alpha(T^*|\mathcal{L}) = \min_{T \in \mathcal{T}} R_\alpha(T|\mathcal{L})$, kde $\alpha > 0$ a $|T^*| = m$. Potom současně platí také $R(T^*|\mathcal{L}) = \min_{T \in \mathcal{T}_m} R(T|\mathcal{L})$. Můžeme proto “zkoušet” různých hodnot parametru α počítat $\min_{T \in \mathcal{T}_m} R(T|\mathcal{L})$ pro některé hodnoty m a současně konstruovat stromy, které tato minima realizují.

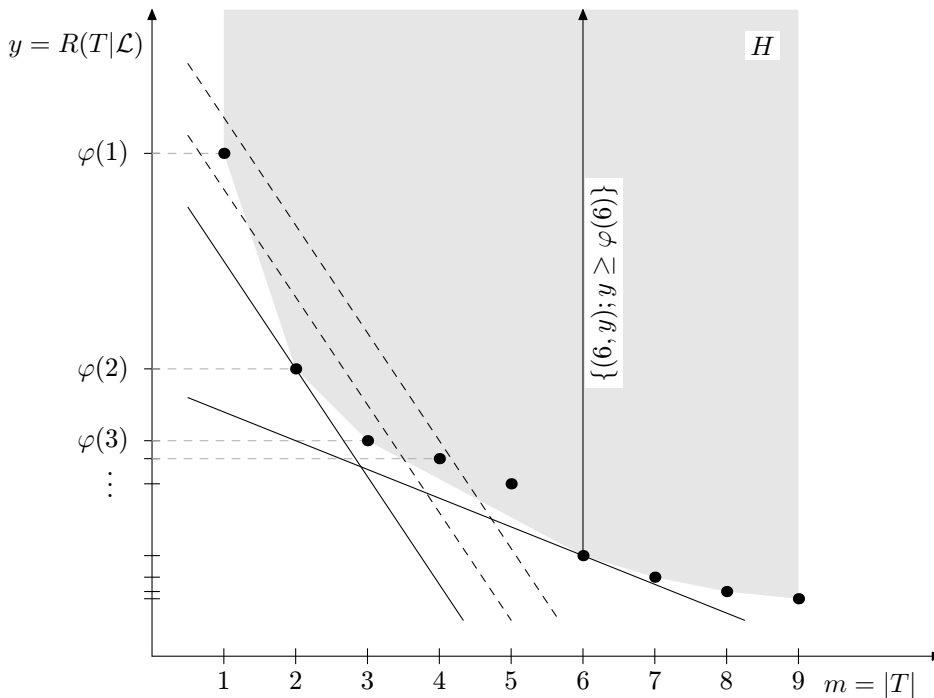
Stromy, které minimalizují $R_\alpha(T|\mathcal{L})$ pro nějaké α , resp. velikosti takových stromů, musejí splňovat následující geometrickou podmínku.

Věta 1. Necht' pro všechna m , pro která je \mathcal{T}_m neprázdná množina, je symbol $\varphi(m)$ definován jako

$$\varphi(m) = \min_{T \in \mathcal{T}_m} R(T|\mathcal{L}).$$

Necht' H je konvexní obal množiny $\{(m, y); \varphi(m) \text{ je definováno}, y \geq \varphi(m)\}$. Necht' T^* minimalizuje $R(T|\mathcal{L})$ v množině \mathcal{T}_m . Potom T^* minimalizuje $R_\alpha(T|\mathcal{L})$ v \mathcal{T} pro nějaké $\alpha \geq 0$ právě tehdy, když bod $(m, \varphi(m))$ leží na hranici množiny H .

Důkaz věty naznačíme obrázkem 5. Do bodů $(m, \varphi(m))$ v grafu se zobrazují stromy s minimální hodnotou $R(T|\mathcal{L})$ při dané velikosti. Všem stromům pevné velikosti $m > 0$ (pokud existuje alespoň jeden) pak odpovídají vesměs body na polopřímce $\{(m, y); y \geq \varphi(m)\}$. Dané $\alpha \geq 0$ určuje směrnici přímek tvořících rovnoběžný svazek, přičemž $R_\alpha(T|\mathcal{L})$ nabývá téže hodnoty pro všechny stromy T , které se zobrazují do bodů téže přímky svazku. Minimalizace $R_\alpha(T|\mathcal{L})$ při daném $\alpha \geq 0$ je vlastně hledáním přímky odpovídajícího svazku, na kterou se zobrazuje nějaký strom a která leží co nejbližší počátku souřadnic. Řešením je proto bod na hranici množiny H .



Obr. 5. Ilustrace věty 1. Minimalizací $R_\alpha(T|\mathcal{L})$ pro dané $\alpha \geq 0$ na datovém souboru \mathcal{L} dostaneme strom, který se zobrazuje do bodu na hranici konvexní množiny H . Vzhledem k tomu, že v situaci na obrázku body $(m, \varphi(m))$ pro $m = 4$ a $m = 5$ leží ve vnitřku množiny H , nemůže $R_\alpha(T|\mathcal{L})$ pro žádné $\alpha \geq 0$ minimalizovat strom velikosti 4 nebo 5.

Algoritmus minimalizující kombinovanou ztrátu $R_\alpha(T|\mathcal{L})$ můžeme popsat následujícím způsobem.

Algoritmus I

Vstup: Specifikace proměnných, data \mathcal{L} , α .

Výstup: Strom T^* minimalizující $R_\alpha(T|\mathcal{L})$.

Popis:

- Pro každou krychli B z \mathcal{B}_P obsahující alespoň jedno pozorování se provedou následující kroky, přičemž krychle se probírají v takovém pořadí, že libovolná krychle přijde na řadu až po všech svých podkrychlích:
 - (1) Vybere se třída $C \in \{C_1, \dots, C_K\}$ tak, aby veličina $R_\alpha(T|\mathcal{L}_B)$ pro triviální strom T (s $D_T = B$ a $f_T = C$) byla minimální.
 - (2) Pro každou takovou dvojici B_L, B_R disjunktních podkrychlí krychle B , že jak B_L , tak B_R obsahuje alespoň jedno pozorování z \mathcal{L} a $B = B_L \cup B_R$ (pokud taková dvojice existuje), se posoudí strom $T = (T_L, T_R)$, kde T_L a T_R jsou stromy přiřazené B_L a B_R .
 - (3) Ze stromů posuzovaných ve dvou předcházejících krocích se vybere strom T , který minimalizuje $R_\alpha(T|\mathcal{L}_B)$. (Pokud $R_\alpha(T|\mathcal{L}_B)$ minimalizuje více stromů, vybere se kterýkoli z nich.) Vybraný strom minimalizuje R_α v množině $\mathcal{T}(B)$. Informace, který strom byl vybrán, se uloží.
- Po dokončení cyklu je zkonstruován strom T^* přiřazený $B = \{0, 1\}^P$. Ten je výstupem procedury.

Algoritmus I je založen na oddělené optimalizaci levé a pravé části složeného stromu, a tedy na následující větě.

Věta 2. Nechť B je krychle a \mathcal{L} je datový soubor. Nechť strom $T^* = (T_L, T_R)$ minimalizuje pro dané $\alpha \geq 0$ kombinovanou ztrátu $R_\alpha(T|\mathcal{L}_B)$ v $\mathcal{T}(B)$. Nechť B_L a B_R jsou kořenové uzly stromů T_L a T_R (tj. $B_L = D_{T_L}$ a $B_R = D_{T_R}$). Potom T_L a T_R minimalizují $R_\alpha(T|\mathcal{L}_{B_L})$ v $\mathcal{T}(B_L)$ a $R_\alpha(T|\mathcal{L}_{B_R})$ v $\mathcal{T}(B_R)$.

Důkaz. Tvrzení je jednoduchým důsledkem vztahu $R_\alpha(T^*|\mathcal{L}_B) = R_\alpha(T_L|\mathcal{L}_{B_L}) + R_\alpha(T_R|\mathcal{L}_{B_R})$. Kdyby např. strom T_L neminimalizoval $R_\alpha(T|\mathcal{L}_{B_L})$ v $\mathcal{T}(B_L)$, musel by existovat takový strom $T'_L \in \mathcal{T}(B_L)$, že $R_\alpha(T'_L|\mathcal{L}_{B_L}) < R_\alpha(T_L|\mathcal{L}_{B_L})$. Potom by ale pro strom $T' = (T'_L, T_R)$ platilo $R_\alpha(T'|\mathcal{L}_B) < R_\alpha(T^*|\mathcal{L}_B)$, což odporuje předpokladu, že T^* minimalizuje $R_\alpha(T|\mathcal{L}_B)$ v $\mathcal{T}(B)$.

Poznámka: Povšimněme si, že dosadíme-li za α nulu, sestrojí algoritmus I strom s nejnižší hodnotou R v \mathcal{T} . Pokud vezmeme velmi malé kladné α , dostaneme *nejmenší* strom mezi těmi, které v \mathcal{T} minimalizují R . Speciálně, pokud existuje alespoň jeden “přesný” strom, tj. strom klasifikující správně všechna pozorování z daného datového souboru, lze uvedenou metodou nalézt *nejmenší* takový strom.

3.2. Minimalizace chyby při dané velikosti stromu (Algoritmus II). Druhý z našich nových algoritmů konstruuje pro $M \geq 1$ posloupnost stromů minimalizujících ztrátu $R(T|\mathcal{L})$ na souboru \mathcal{L} v množinách \mathcal{T}_m pro $m = 1, 2, \dots, M$. Tento algoritmus vytváří na rozdíl od předcházejícího algoritmu stromy *všech* velikostí od 1 do M , tedy i takových velikostí, pro které není splněna geometrická podmínka z věty 2. Daní za tuto výhodu oproti algoritmu I je vyšší prostorová a časová složitost.

Popis algoritmu II uvedeme ve zhuštěné podobě, protože algoritmy I a II jsou velmi podobné.

Algoritmus II

Vstup: Specifikace proměnných, data \mathcal{L} , maximální velikost stromu M .

Výstup: Stromy T_1^*, \dots, T_M^* minimalizující $R(T|\mathcal{L})$ v $\mathcal{T}_1, \dots, \mathcal{T}_M$.

Popis:

- Krychle se probírají ve stejném pořadí jako v případě algoritmu I. Popis algoritmu se liší jen v bodech 2 a 3, kde jsou tyto změny:
 - 2'. Pro každou takovou dvojici B_L, B_R disjunktních podkrychlí krychle B , že jak B_L , tak B_R obsahuje alespoň jedno pozorování z \mathcal{L} a $B = B_L \cup B_R$ (pokud taková dvojice existuje), a pro každou dvojici kladných celých čísel m_L, m_R , pro něž $m_L + m_R \leq M$, se posuzují stromy $T = (T_L, T_R)$, kde T_L a T_R jsou stromy velikostí m_L a m_R přiřazené krychlím B_L a B_R . Výsledný strom je kandidátem při výběru stromu velikosti $m_L + m_R$ pro danou krychli.
 - 3'. Strom z kroku 1 se použije pro velikost 1. Pro každé $m = 2, 3, \dots, M$ se mezi kandidáty velikosti m z kroku 2' vybere strom minimalizující $R(T|\mathcal{L}_B)$ (přičemž případné shody se řeší libovolně). Informace o vybraných stromech všech uvažovaných velikostí se uloží.
- Posloupnost M stromů přiřazených krychlí $\{0, 1\}^P$ je výstupem algoritmu.

Algoritmus II je podobně jako algoritmus I založen na oddělené optimalizaci levé a pravé části složeného stromu. Věta, která takový postup umožňuje, má tentokrát následující podobu.

Věta 3. Nechť B je krychle, \mathcal{L} je datový soubor a m je celé kladné číslo. Nechť strom $T^* = (T_L, T_R)$ minimalizuje chybu klasifikace $R(T|\mathcal{L}_B)$ v $\mathcal{T}_m(B)$, kde $|T_L| = m_L$ a $|T_R| = m_R$. Nechť $B_L = D_{T_L}$ a $B_R = D_{T_R}$. Potom T_L a T_R minimalizují $R(T|\mathcal{L}_{B_L})$ v $\mathcal{T}_{m_L}(B_L)$ a $R(T|\mathcal{L}_{B_R})$ v $\mathcal{T}_{m_R}(B_R)$.

Důkaz je založen na vztahu $R(T^*|\mathcal{L}_B) = R(T_L|\mathcal{L}_{B_L}) + R(T_R|\mathcal{L}_{B_R})$, jinak je analogický důkazu věty 2.

3.3. Software a algoritmická složitost. Algoritmy I and II byly implementovány (v témže programu) v jazyce C++. Program ve zdrojovém tvaru se nachází na URL <http://www.cs.cas.cz/~savicky/trees>. (Tamtéž jsou umístěny také programy generující data pro experimenty.) Současná verze programu je určena pouze pro výzkumné účely – není nijak “přátelská k uživateli”, nemá žádné grafické rozhraní a ovládá se parametry z příkazové řádky a řídicích textových souborů.

Velikost paměti, kterou potřebuje algoritmus I, je přibližně $c \cdot 3^P K$, přičemž konstanta c závisí na implementaci a není příliš velká. (Připomeňme, že P je počet prediktorů a K je počet tříd.) Algoritmus II spotřebuje v porovnání s algoritmem I přibližně M -krát více paměti. Doba výpočtu je u obou algoritmů zhruba přímo úměrná potřebné velikosti paměti (takže když se úloha vejde do operační paměti, lze se také dočkat výsledku).

Jako konkrétní příklad můžeme uvést úlohu rozpoznání parity (viz paragraf 6), kde $P = 10$ a $K = 2$. Na Pentiu III s operačním systémem Linux spotřeboval algoritmus I pro 50 různých hodnot parametru α při 1000 trénovacích a 10000 testovacích případech 9 sekund a 1.6MB RAM. Výpočet algoritmem II na stejných datech pro $M = 50$ velikostí stromů trval 12 sekund a vyžadoval 58.2MB RAM.

4. K ČEMU JE OPTIMALITA DOBRÁ?

Otázka v nadpisu nevypadá na první pohled logicky, tedy alespoň pokud se zabýváme takovými problémy analýzy dat, kde se aplikace klasifikačních stromů jeví jako adekvátní a naše algoritmy nenarážejí na hardwarové meze použitelnosti. Na druhý pohled však věci tak jasné nejsou. Naše algoritmy garantují, že vytvořené stromy budou mít nejmenší možnou chybu při dané hodnotě parametru (parametru složitosti α nebo velikosti stromu) na daném trénovacím datovém souboru. To, co nás však zpravidla nejvíce zajímá, je chování stromu na datech, která nebyla při vytváření klasifikačního modelu použita, tedy (jazykem převzatým z oblasti strojového učení, kterému zde místy dáváme přednost před “dialektem” statistickým) generalizace. Co když optimální stromy dosahují nízké chyby proto, že do modelu jsou zahrnuty i nahodilé vlastnosti dat, které se v nových datech s velkou pravděpodobností neobjeví? Pak by se optimalita (v tom smyslu, v jakém jí dosahujeme) mohla stát nevýhodou, a z hlediska generalizace by mohly být optimální stromy horší než stromy s vyšší chybou na trénovacích datech (sestrojené podle jiného principu, např. některou z metod jako *CART* nebo *C4.5*).

Poznamenejme, že k tomu, abychom mohli přesněji říci, co je myšleno “chybou na jiných datech”, musíme vyslovit určité pravděpodobnostní předpoklady – např. že data, jak trénovací, tak “jiná”, jsou náhodným výběrem z nějakého sdruženého rozdělení vektoru prediktorů a kódu třídy. Pak můžeme definovat chybu klasifikátoru T nejen relativně, tj. na daném datovém souboru, ale “absolutně”, jako tzv. *skutečnou* chybu

$$R(T) = \sum_{i=1}^K \pi_i \sum_{j=1}^K Z_{ij} p_{ij},$$

kde π_i pro $i = 1, \dots, K$ a Z_{ij} pro $i, j = 1, \dots, K$ mají též význam jako v (1) a p_{ij} je pro $i, j = 1, \dots, K$ (podmíněná) pravděpodobnost, že strom T klasifikuje pozorování ze třídy C_i do C_j . Pokud $Z_{ii} = 0$ pro $i = 1, \dots, K$ a $Z_{ij} = 1$ pro $i \neq j$, kde $i, j = 1, \dots, K$, platí

$$R(T) = 1 - \sum_{i=1}^K \pi_i p_{ii},$$

což není nic jiného, než pravděpodobnost chybné klasifikace náhodně vybraného pozorování.

O vztahu mezi chybou klasifikátoru na trénovacích datech a skutečnou chybou (tedy generalizací) lze filosoficky spekulovat, lze jej vyšetřovat matematicky, a můžeme jej také studovat experimentálně.

Souvislost s filosofií zde skutečně existuje: Jednou z pohnutek, proč jsme se pustili do vytváření optimálních stromů, je alespoň určitý stupeň apriorní důvěry (ne stejný u všech autorů) v tzv. *princip Occamovy břitvy*. Tím rozumíme heuristický předpoklad, že ze dvou teorií, které vysvětlují nějaký jev, je třeba dát přednost té jednodušší. V interpretaci běžné ve strojovém učení to pak znamená, že mezi modely, které se stejnou chybou popisují trénovací data, bude ten nejjednodušší obvykle mít nejlepší generalizační vlastnosti. Konkrétně v případě klasifikačních stromů lze citovat Quinlana (1986): “Given a choice between two decision trees, each of which is correct over the training set, it seems sensible to prefer the simpler one on the grounds that it is more likely to capture structure inherent in the problem. The simpler tree would therefore be expected to classify correctly more objects outside the training set.”

Úlohu optimalizace stromů sice neformulujeme přímo tak, že bychom minimalizovali velikost stromu při dané chybě, ale de facto řešíme podobnou úlohu: Některé ze stromů, které mají při daném počtu listů minimální chybu, jsou současně také stromy s minimální velikostí při dané chybě. (Pro některé optimální stromy, které jsou výstupem našich algoritmů, mohou menší stromy s totožnou chybou existovat.) Podle principu Occamovy břitvy tedy lze očekávat, že optimalizace chování na trénovacích datech povede ke stromům s dobrými generalizačními vlastnostmi.

Vyšetřovat generalizační vlastnosti optimálních stromů matematicky zatím příliš neumíme. Určitou možnost nabízejí odhady skutečné chyby klasifikace v modelu PAC-learning (probably almost correct learning), viz např. Blumer *et al.* (1987).

Experimentálnímu vyšetřování generalizačních vlastností optimálních stromů na několika příkladech klasifikačních úloh je věnován paragraf 6.

5. SPRÁVNĚ VELKÉ STROMY

Každý z algoritmů popsaných v paragrafu 3 dává jako výsledek různě velké stromy v závislosti na parametru – v případě algoritmu II je parametrem samotná velikost, u algoritmu I parametr složitosti α určuje velikost stromu nepřímo. Cílem konstrukce stromu v praktických situacích zpravidla bude sestrojít jeden klasifikační model, nikoli celou sérii. Obvykle však chybí nějaké jasné vodítko, podle kterého bychom předem dovedli určit “správnou” hodnotu parametru, tj. “správnou” velikost stromu. Rozhodnout by zřejmě měly generalizační vlastnosti. (Příliš malé stromy nepostihnou všechny zákonitosti “za daty”, příliš velké stromy budou vedle těchto zákonitostí odrážet i nahodilé vlastnosti dat.)

To samozřejmě není náš objev – s problémem stanovení vhodné velikosti stromu se nějak vyrovnávají prakticky všechny dosavadní metody založené na stromech. Některé přidávají ke stromu nová větvení, dokud to přináší (v nějak definovaném smyslu) dostatečný pokles chyby, potom je konstrukce ukončena. Jiné metody postupují odlišně: V první fázi se také postupně přidávají nová větvení, ale kritérium, podle kterého se tento proces zastaví, je velmi mírné, takže se vytvoří velmi velký strom. Ve druhé fázi se tento strom prořezává – studují se stromy, které vzniknou odstraněním většího či menšího počtu větvení z původního velkého stromu (prořezané podstromy). U každého z těchto prořezaných podstromů se odhaduje kvalita generalizace, a na základě těchto odhadů se pak vybere nejvhodnější velikost stromu.

Všimněme si, jakým způsobem se generalizační vlastnosti prořezaných podstromů odhadují v rámci metody *CART*. Jeden způsob je založen na rozdělení datového souboru na dvě části, z nichž jedna slouží k vytvoření velkého stromu a jeho prořezaných podstromů, zatímco na druhou část jsou klasifikační modely reprezentované prořezanými podstromy aplikovány a chyba na těchto datech slouží jako odhad skutečné chyby³. Druhý způsob, tzv. křížová validace (cross-validation), je o něco složitější. K vytvoření velkého stromu T^* a jeho prořezaných podstromů jsou použita všechna data. Pro účely odhadu skutečné chyby prořezaných podstromů stromu T^* je datový soubor rozdělen na $V \geq 2$ přibližně stejně velkých disjunktních částí $\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_V$ (běžně se pracuje s $V = 10$). Postupně pro $v = 1, \dots, V$ se ze souboru vyjme \mathcal{L}_v , na základě ostatních dat je sestrojen pomocný velký strom T_v^* a posloupnost jeho

³Máme určitou terminologickou výhradu k tomu, že první části dat se v literatuře o metodě *CART* říká “learning sample” a druhé “test sample”: Druhá část dat je použita, byť jiným způsobem než prvá, k výběru modelu, který bude výstupem metody, a neslouží tedy výhradně k otestování vlastností modelu vytvořeného bez přihlednutí k těmto datům.

prořezaných podstromů, a \mathcal{L}_v se použije k odhadu skutečné chyby prořezaných podstromů stromu T_v^* . Z těchto odhadů vypočtených pro $v = 1, \dots, V$ se posléze způsobem, který zde nebudeme blíže popisovat (viz Breiman *et al.*, 1984), zkonstruuje odhad chyby prořezaných podstromů stromu T^* .

Ať už se odhady chyb prořezaných podstromů sestojí tím, či oním způsobem, zbývá ještě vybrat na jejich základě jeden “nejnadějnější” prořezaný podstrom. Nejjednodušší je uznat za nejlepší ten strom T_\bullet , který dává nejnižší odhad $\widehat{R}(\cdot)$ skutečné chyby. Protože však zpravidla existuje více podstromů se “skoro stejnými” hodnotami odhadu skutečné chyby, považuje se za lepší vybrat spíše nejmenší z těch podstromů T , pro něž se $\widehat{R}(T)$ liší od $\widehat{R}(T_\bullet)$ nejvýše o nějaký zvolený s -násobek směrodatné odchylky odhadu $\widehat{R}(T_\bullet)$. (Výpočet této směrodatné odchylky viz Breiman *et al.*, 1984.) Nejběžnější je volba $s = 0$ (v tom případě je výstupem metody strom T_\bullet) – pak se mluví o prořezávání podle pravidla 0 SE, nebo $s = 1$, potom jde o pravidlo 1 SE.

Tento exkurs týkající se metody *CART* jsme uvedli proto, že v otázce výběru “správně velkého” stromu hodláme do značné míry postupovat analogicky. Současná verze programu, v němž jsou implementovány algoritmy I a II, však zatím poskytuje jedinou možnost: Stromy různé velikosti se konstruuji pomocí dat, která někdy označujeme jako *g-data* (“g” jako “growth”), a konečným výsledkem je strom s minimální chybou na jiných datech (validačních datech, *v-datech*). Máme v plánu rozšíření možností programu o další varianty, přednostně pak o křížovou validaci.

6. NUMERICKÉ EXPERIMENTY

Víme už, že u stromů vytvořených našimi algoritmy nelze a priori garantovat, že nebudou mít horší generalizační vlastnosti než “neoptimální” stromy produkované klasickými metodami. V několika numerických experimentech jsme proto zkoušeli, zda a v jakých úlohách získáme naší optimalizací výhodu oproti metodě *CART*.

6.1. Typy experimentálních dat.

- (1) **Dekadické číslice (DČ)**. Jde o známou úlohu, kterou poprvé studovali v souvislosti s klasifikačními stromy Breiman *et al.* (1984), a která se vyskytuje v různých sadách problémů, na nichž se běžně testují klasifikační metody. Každá z číslic $C \in \{0, 1, \dots, 9\}$ je kódována pevným vektorem $(\xi_1^C, \dots, \xi_7^C) \in \{0, 1\}^7$, který popisuje kombinaci rozsvícených a zhasnutých segmentů na jednoduchém displeji (viz obr. 6). Pro jednotlivý případ v datech se generuje kód třídy (neboli číslice) C jako realizace náhodné veličiny s rovnoměrným rozdělením na $\{0, 1, \dots, 9\}$. V datech není dostupný samotný vektor $(\xi_1^C, \dots, \xi_7^C)$, ale jen jeho modifikace $(x_1, \dots, x_7) \in \{0, 1\}^7$, která se z $(\xi_1^C, \dots, \xi_7^C)$ získá tak, že pro každé $i = 0, \dots, 9$ se nezávisle náhodně vybere mezi možnostmi $x_i = \xi_i^C$ a $x_i = 1 - \xi_i^C$, jež mají pravděpodobnost 0.9, resp. 0.1. V klasifikační úloze se tedy určuje číslice z “poškozených” údajů o rozsvícených segmentech displeje – každá jednotlivá informace o segmentu je s pravděpodobností 10% chybná.
- (2) **Vysoké a nízké číslice (VNČ)**. Jedná se o variaci úlohy DČ. Data jsou generována stejně jako v případě DČ, ale číslice $0, \dots, 9$ jsou transformovány na kód třídy 0 u “nízkých” číslic $0, \dots, 4$ a na 1 u “vysokých” číslic $5, \dots, 9$.
- (3) **Parita a zavádějící proměnné (PZP)**. Tato úloha, stejně jako úloha následující, nesouvisí s problémem rozpoznávání dekadických číslic. Pro jednotlivý případ v datovém souboru se nejdříve generují hodnoty ξ_1, \dots, ξ_5

jako realizace vzájemně nezávislých náhodných veličin s rovnoměrným rozdělením na $\{0, 1\}$. Kód třídy $C \in \{0, 1\}$ je definován jako parita součtu těchto pěti hodnot, tj. $C = 1$, když $\sum_{i=1}^5 \xi_i$ je liché číslo, jinak $C = 0$. V datech nejsou dostupné hodnoty ξ_1, \dots, ξ_5 , ale jejich modifikace x_1, \dots, x_5 získané z ξ_1, \dots, ξ_5 obdobným způsobem, jako se v úloze DČ upravují čísla ξ_1, \dots, ξ_7 na x_1, \dots, x_5 – s tím rozdílem, že alternativy $x_i = \xi_i^C$ a $x_i = 1 - \xi_i^C$ mají pravděpodobnost 0.978, resp. 0.022. (Kód třídy C se tudíž rovná paritě součtu $\sum_{i=1}^5 x_i$ s pravděpodobností cca 0.9.) V datech jsou dále hodnoty x_6, \dots, x_{10} pěti tzv. “zavádějících” prediktorů X_6, \dots, X_{10} . Každá z hodnot x_i , $i = 6, \dots, 10$ je náhodně a nezávisle na ostatních (ale v závislosti na známém kódu třídy C) generována tak, že s pravděpodobností 0.6 je $x_i = C$ a s pravděpodobností 0.4 platí $x_i = 1 - C$. Každý z pěti “zavádějících” prediktorů X_6, \dots, X_{10} sám o sobě umožňuje správně predikovat kód třídy C v 60% případech a jejich kombinováním lze přesnost zvýšit na cca 68%. Prediktory X_1, \dots, X_5 jsou *jednotlivě* pro stanovení kódu třídy stejně užitečné jako házení mincí, protože při dané hodnotě kterékoli z těchto veličin jsou jevy $C = 0$ a $C = 1$ stejně pravděpodobné. Kombinací prediktorů X_1, \dots, X_5 však lze získat predikci správnou v přibližně 90% případech.

- (4) **Interval a šumové proměnné (IŠP).** Kód třídy C je podobně jako u dat PZP funkcí součtu “skrytých” proměnných ξ_1, \dots, ξ_7 , které jsou generovány jako realizace vzájemně nezávislých náhodných veličin s rovnoměrným rozdělením na $\{0, 1\}$. Jedná se však tentokrát o jinou funkci součtu, než je parita, konkrétně o charakteristickou funkci intervalu: Pokládáme $C = 1$, když $3 \leq \sum_{i=1}^7 \xi_i \leq 4$, jinak $C = 0$. V datech nejsou hodnoty ξ_1, \dots, ξ_7 , ale jejich modifikace x_1, \dots, x_7 , které jsou z ξ_1, \dots, ξ_7 odvozeny stejně jako v úloze PZP, včetně pravděpodobností 0.978, resp. 0.022 jevů $x_i = \xi_i^C$, resp. $x_i = 1 - \xi_i^C$ pro $i = 1, \dots, 7$. Data dále obsahují hodnoty tří “čistě šumových” proměnných X_8, X_9 a X_{10} , které mají vesměs rovnoměrné rozdělení na $\{0, 1\}$ a jsou nezávislé na kódu třídy, na ostatních prediktorech i navzájem.

6.2. Struktura experimentů. V každém z experimentů jsme použili uměle generovaná data představující náhodný výběr ze sdruženého rozdělení odpovídajícího jednomu z výše uvedených typů dat.

Pomocí datového souboru \mathcal{L}_1 velikosti 500 jsme vždy sestrojili

- (i) algoritmem I stromy T_1, \dots, T_J pro J hodnot α tvořících geometrickou posloupnost ($J = 500$ v experimentech DČ, VNČ a IŠP, $J = 50$ u PZP),
- (ii) algoritmem II stromy $T'_1, \dots, T'_{J'}$ velikosti 1 až J' (v experimentech DČ, VNČ a PZP bylo $J' = 50$, u IŠP pak $J' = 200$).

V dalším kroku jsme ze stromů T_1, \dots, T_J , resp. $T'_1, \dots, T'_{J'}$ vybrali stromy T^* , resp. $T^{*'}$ minimalizující chybu na validačním souboru \mathcal{L}_2 velikosti 500. Skutečnou chybu stromů T^* a $T^{*'}$ jsme pak odhadli na testovacím souboru velikosti 10 000.

Tento postup jsme u dat typu DČ, VNČ a IŠP opakovali (pokaždé s jinými daty) 100krát. Výsledky experimentu PZP byly natolik jasné, že stačilo 10 opakování.



Obr. 6. Dekadické číslice na displeji se sedmi segmenty (ilustrace k experimentům DČ a VNČ). Vpravo je znázorněno číslování segmentů – segmentu č. 1 odpovídá prediktor X_1 , atd.

Pro porovnání jsme tataž data analyzovali metodou *CART*, přičemž soubor \mathcal{L}_1 byl použit pro konstrukci (pěstování) stromu, soubor \mathcal{L}_2 pro prořezávání a testovací soubor velikosti 10 000 pro odhad chyby klasifikace výsledných (prořezaných) stromů. Jako kritérium pro volbu nejlepšího větvení jsme v experimentu DČ, kde bylo 10 tříd, použili tzv. *twoing*, v ostatních případech (kde byly třídy jen 2) pak Giniho míru. Při prořezávání jsme vyzkoušeli pravidla 0 SE a 1 SE.

Poznamenejme, že při aplikaci optimalizačních algoritmů i metody *CART* jsme za odhady apriorních pravděpodobností tříd vesměs brali relativní frekvence tříd v datech a každý chybně klasifikovaný případ jsme penalizovali stejně – veličina R je proto v našich experimentech totožná s podílem chybně klasifikovaných případů.

6.3. Výsledky experimentů. V Tabulce 1 jsou pro každý typ dat a každou ze čtyř metod konstrukce stromů uvedeny vybrané statistické charakteristiky empirického rozdělení velikostí stromů a chyby stromů na testovacím souboru velikosti 10 000 při 100, popř. 10 opakováních.

Ve všech čtyřech experimentech dosahoval algoritmus II lepších výsledků než algoritmus I. Stejně tak v metodě *CART* bylo vesměs úspěšnější prořezávání podle pravidla 0 SE než podle pravidla 1 SE.

V experimentu DČ naše algoritmy nepřinesly žádné přesvědčivé zlepšení oproti metodě *CART* (*twoing*, pravidlo 0 SE). Algoritmus II dosáhl na testovacím souboru v 53 případech ze 100 nižší a ve 47 případech vyšší chyby než uvedená nejméně úspěšná varianta metody *CART*. Vyjádřeno způsobem obdobným referátu o výsledku zápasu v košíkové, algoritmus II zvítězil nad metodou *CART* 53:47. Algoritmus I s metodou *CART* dokonce prohrál 47:52 při jedné shodě. (V obou případech je rozdíl hodnocený znaménkovým testem statisticky nevýznamný na hladině 5%.) Problém DČ je zřejmě pro *CART*, popř. jiné klasické metody konstrukce klasifikačních stromů snadný, a nebude patřit k těm úlohám analýzy dat, kvůli kterým stojí za to algoritmy konstruující optimální stromy vyvíjet.

V experimentu VNČ byla výhoda, kterou jsme oproti metodě *CART* získali, prokazatelná – algoritmus II porazil *CART* (Giniho míra, pravidlo 0 SE) v poměru 62:37 při jedné shodě, algoritmus I pak 62:38 (v obou případech se jedná při hodnocení znaménkovým testem o statisticky významný výsledek na hladině 5%). Zároveň je však třeba konstatovat, že rozdíl mezi chybami dosahovanými pomocí optimálních a klasických stromů není nikterak velkolepý. Přičítáme to tomu, že pro *CART* je problém VNČ sice o něco obtížnější než DČ, ale také není příliš těžký.

V experimentu PZP je naše převaha naprosto jasná: Naše algoritmy byly schopny najít “dobře skrytou” závislost ve tvaru funkce parity. *CART* naproti tomu preferoval v kořeni a úrovních blízkých kořeni větvení podle “zavádějících” proměnných, rozdrobil tak soubor na malé podmnožiny, a v těch nebyl s to zákonitost založenou na paritě odhalit. Optimální stromy tak měly na testovacím souboru vesměs chybu mezi 10 a 13%, zatímco chyba stromů vytvořených metodou *CART* (Giniho míra, pravidlo 0 SE) nikdy neklesla pod 30%.

V úloze IŠP, která je přirozenější než PZP, byly naše algoritmy také výrazně úspěšnější než metoda *CART*. Algoritmus II porazil *CART* v poměru 84:16, algoritmus I pak zvítězil o něco skromněji 70:30 (v obou případech jde při hodnocení znaménkovým testem o statisticky významné výsledky). Metoda *CART* je sice schopna na některých datových souborech dosáhnout přesnosti srovnatelné s nejméně úspěšnými

optimálními stromy, ale chyby mají velkou variabilitu. U optimálních stromů je variabilita chyb menší, takže např. třetí kvartil rozdělení chyb u algoritmu II je nižší než první kvartil u metody *CART*.

Data		Optimalizace				CART			
		Alg. I		Alg. II		0 SE		1 SE	
		<i>R</i> %	listů	<i>R</i> %	listů	<i>R</i> %	listů	<i>R</i> %	listů
Dekad. číslice (100 souborů)	min	25.31	10	25.30	14	24.85	10	25.03	10
	Q1	26.34	22	26.29	22	26.49	22.25	27.17	12.25
	med	26.93	28	26.78	27	26.88	30	27.98	17
	Q3	27.64	33.75	27.38	32	27.48	36	29.00	20.75
	max	29.90	39	28.82	49	29.88	50	30.18	42
Vysoké/ nízké číslice (100 souborů)	min	13.22	5	13.22	5	13.50	7	13.73	6
	Q1	14.16	9.25	14.01	10	14.42	13	14.95	8
	med	14.76	13	14.66	13	14.90	18	15.64	10
	Q3	15.24	18	15.17	18	15.39	27	16.80	15
	max	17.16	27	17.16	48	17.73	40	18.33	32
Parita a zavádějící proměnné (10 souborů)	min	10.06	30	10.06	32	32.67	6	33.76	4
	Q1	10.06	32	10.06	32	33.72	8.50	34.47	6
	med	10.60	32	10.56	32	34.89	41.50	35.00	7.50
	Q3	12.05	34.50	11.63	34.75	35.44	180.75	36.08	17.25
	max	13.89	36	12.17	38	36.19	204	37.69	90
Interval a šumové proměnné (100 souborů)	min	14.93	40	11.90	50	12.05	59	12.27	36
	Q1	17.78	80	16.06	96.25	18.68	119	19.43	77
	med	19.20	95.50	17.47	167	20.75	135	22.24	108
	Q3	20.38	100.75	18.52	186	23.62	157	24.86	134.25
	max	24.56	115	21.37	200	31.41	197	33.72	185

Tab. 1. Výsledky experimentů. Minimum, maximum, medián (med) a 1. a 3. kvartil (Q1, Q3) empirického rozdělení chyby na testovacím souboru (*R* %) a velikosti stromů (“listů”).

7. OPTIMÁLNÍ STROMY ZÍTRA

Způsob hledání “správně velkého” stromu použitý v dosavadních experimentech rozhodně není optimální. V nejbližší době hodláme implementovat křížovou validaci, která nám umožní hospodárněji využít data a usnadní nám mj. práci s reálnými daty, kde nemůžeme (na rozdíl od dat umělých) dle vlastního uvážení zvětšovat počet pozorování.

V popisu algoritmů I a II se skrývá neřešený problém. Chybu při dané velikosti nebo kombinovanou ztrátu často minimalizuje ne jeden strom, ale velký počet stromů. O tom, který z nich se stane výstupem algoritmu, rozhodují jednak pravidla typu “při shodě má přednost první (poslední) kandidát”, jednak mikroskopické numerické chyby (související s konečnou přesností reálných čísel v počítačích). Kdybychom dovedli podle nějakých charakteristik (jako např. hloubka, rovnoměrnost počtů pozorování v listech, atp.) odhadnout, které ze stromů se stejnou či skoro stejnou chybou na trénovacích datech budou mít lepší generalizační vlastnosti, mohli bychom takovou znalost zabudovat do našich procedur. Vytipování takových charakteristik je jedním z námětů pro budoucí výzkum.

Velikost operační paměti, kterou potřebuje současná verze programu, roste jako 3^P , kde P je počet binárních prediktorů. Faktor 3^P souvisí s tím, že se rezervuje paměť pro každou ze 3^P podkrychlí prostoru prediktorů $\{0, 1\}^P$. Při sofistikovanější

implementaci, konkrétně kdybychom přidělovali paměť jen takovým krychlím, do kterých patří nějaká trénovací data, by asymptotika spotřeby paměti byla o něco příznivější – faktor 3^P by byl nahrazen faktorem $N2^P$, kde N je počet různých hodnot vektoru prediktorů v datech (tj. číslo ne větší než velikost trénovacího datového souboru).

Podívejme se na důsledky. Dnes jsme schopni řešit na dostupných počítačích úlohy s maximálně cca 15 prediktory. Při velikosti trénovacího souboru kolem 500 platí zhruba stejný limit i pro implementaci s faktorem $N2^P$ místo 3^P . Extrapolujeme-li do budoucnosti pravidlo, že výkonnost počítačů včetně velikosti RAM se zdvojnásobuje přibližně každých 18 měsíců, potřebujeme nyní k rozšíření našich možností o jeden prediktor cca 2.4 roku, lepší implementací můžeme tuto dobu zkrátit na 1.5 roku. Úlohy s 20 prediktory pak budou jedním způsobem řešitelné asi za 12 let, druhým už za 7 a půl roku, se 30 prediktory buďto za 36 let, nebo jen za 22 a půl roku. Poslední cifra dává na rozdíl od předposlední určitou šanci, že se někteří autoři dočkají řešitelnosti úloh se 30 binárními prediktory během svého aktivního života.

V praktických úlohách se ovšem zpravidla vyskytují kategoriální prediktory s větším počtem hodnot než 2 a prediktory s uspořádaným oborem hodnot. Problém obsahující takové proměnné lze formálně převést na úlohu s pomocnými binárními prediktory, počet těchto pomocných proměnných však rychle přesáhne naše současné, popř. i budoucí možnosti. Abychom z optimalizace stromů učinili široce použitelný praktický nástroj, potřebovali bychom maximální počet binárních prediktorů zvýšit nejméně na 100 (čtenář si může spočítat, jak dlouho by to trvalo)⁴. Chceme-li v rozumném čase takových parametrů dosáhnout, nezbývá nám nic jiného než od plné optimalizace upustit. Hodláme se tudíž v budoucnosti věnovat studiu heuristických postupů, které budou na jedné straně výpočetně méně náročné než optimalizace, ale na druhé straně co možná zachovávají převahu nad klasickými metodami tam, kde optimalizace poskytuje podstatnou výhodu. Na plnou optimalizaci pak můžeme pohlížet jako na prostředek, který nám umožní na úlohách, kde plná optimalizace je realizovatelná, zkoumat, nakolik se výsledky heuristických postupů výsledkům optimalizace skutečně blíží.

O praktické užitečnosti optimalizace stromů a příbuzných metod (založených na heuristické aproximaci optimalizace) se však bude rozhodovat ještě jinde: Experimenty uvedené v paragrafu 6 ukazují, že v některých úlohách, kde vztah mezi prediktory a závisle proměnnou je dosti komplikovaný, dává optimalizace výrazně lepší výsledky než klasické metody, ale jinde pro změnu získáme optimalizací velmi málo nebo nic. Úlohy, kde optimalizace přináší podstatnou výhodu, dnes umíme uměle konstruovat. Teprve budoucnost ale ukáže, zda se vyskytují v nezanedbatelné míře také mezi problémy reálnými.

Literatura

- Blumer A., Ehrenfeucht A., Haussler D. & Warmuth M. (1987). Occam's Razor. *Information Processing Letters* **24**, 377–380.
- Breiman L., Friedman J.H., Olshen R.A. & Stone C.J. (1984). *Classification and Regression Trees*. Belmont CA: Wadsworth.
- Friedman J.H. (1979). A tree-structured approach to nonparametric multiple regression. In: *Smoothing Techniques for Curve Estimation. Lecture Notes in Math.* **757**, (eds. T. Gasser & M. Rosenblatt), 5-22. Berlin: Springer-Verlag.

⁴Nejstarší z autorů, J. A., s poněkud již dětinskou umíněností trvá na poznámce, že pro něj je $2^{100} = \infty$, ať si třeba celý svět věří, že $2^{100} = 1267650600228229401496703205376$.

- Gelfand S.B., Ravishankar C.S. & Delp E.J. (1991). An iterative growing and pruning algorithm for classification tree design. *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence* **13**, 2, 163-174.
- Pijls W. & Bioch J.C. (1999). Mining frequent itemsets in memory-resident databases. Manuscript, <http://www.few.eur.nl/few/people/pijls/>
- Quinlan J.R. (1986). Induction of decision trees. *Machine Learning* **1**, 81-106.
- 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.
- Siciliano R. (1998). Exploratory versus decision trees. In: *COMPSTAT 98, Proceedings in Computational Statistics* (eds. R. Payne & P. Green), 113-124. Heidelberg: Physica-Verlag.

ÚI, AV ČR, POD VODÁRENSKOU VĚŽÍ 2, 182 07 PRAHA
E-MAIL: savicky@cs.cas.cz, klaschka@cs.cas.cz

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSKÁ 83, 186 75 PRAHA
E-MAIL: jaromir.antoch@karlin.mff.cuni.cz

SHAPES OF RANDOM CLOSED SETS

IVAN SAXL AND PETR PONÍŽIL

АБСТРАКТ. Abstract. The shape properties of Voronoi polytopes generated by various point processes are examined and discussed.

Абстракт. Свойства формы областей Дирихле (Вороного) генерированных различными точечными процессами исследованы и дискутированы.

1. INTRODUCTION

Random tessellations are useful stochastic models of natural space filling systems (grains of polycrystal, cell of living tissues *etc.*) as well as of various products of human activities (jurisdictions, districts of administration, allotments *etc.*) Non-convexity of real tessellations is usually relatively small and convex tessellations are quite suitable and acceptable approximations. Voronoi tessellation is perhaps the most suitable model of such systems; its general definition is as follows: let L be a discrete set in \mathbb{R}^d (*e.g.* a lattice or point process) and let ϕ be a positive definite quadratic form on \mathbb{R}^d . Then the Voronoi cell generated by $x_i \in L$ is $C_i = \{y \in \mathbb{R}^d \mid \phi(y - x_i) \leq \phi(y - z) \text{ for all } z \in L - \{x_i\}\}$. The union \mathcal{T} of all cells forms a face-to-face tiling of \mathbb{R}^d with properties depending on L . It is also an affine image of another tiling whose tiles are Voronoi cells defined with respect to the standard quadratic form and another suitable discrete set L . Usually the term Voronoi cell is used only to cell defined with respect to the standard Euclidean metric [10] but it is useful to keep in the mind that the basic property of \mathcal{T} , namely tiling the space, is not lost by affine transformation (*e.g.* tiling by rhombohedra can be obtained by shearing a tiling by cubes). The general reference for Voronoi tessellations is [10], more general aspects of congruent tilings are reviewed in [7, 18] and with a particular respect to crystallography in [2]. The terminology is far from being unified as it happens frequently when one idea is developed in several distinct branches of science. Consequently, in a small review like this one, the various terms describing the same property must be at least occasionally mentioned.

A tessellation is described by the distributions of its cell characteristics. The size dependent characteristics are homogeneous functions of degree $-k/d$ of the intensity $\lambda = 1/\mathbf{E}v$, *i.e.* $\mathbf{E}\bullet(\alpha\lambda) = \alpha^{-k/d}\mathbf{E}\bullet(\lambda)$. In \mathbb{R}^3 , $k = 3$ for the *cell volume* v , $k = 2$ for the *cell surface area* s and $k = 1$ for the *mean* (with respect to projection orientation) *cell breadth* w . Consequently, it is sufficient to examine the unit tessellations only.

The shape characteristics like *mean dihedral angle* Θ , *randomly selected dihedral angle* θ - *i.e.* a "typical" angle of a "typical" cell, *number of cell faces* n_f and "isoperimetric" *shape factors* $g = 6v\sqrt{\pi/s^3}$, $f = 6v/(\pi w^3)$ are independent of λ (the shape factors $g = f = 1$ for a ball thus expressing the statement of the isoperimetric

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 60K99.

Key words and phrases. Random tessellations, Voronoi polytopes, point processes.

The research was supported by Grant No. 304/00/1622 of GA ČR (I.S.) and by the Ministry of Education of the Czech Republic (contract No. VS96108–P.P.).

and Bierbach inequalities, namely that of all convex bodies of fixed volume, the ball has the smallest surface area as well as mean breadth).

Any 3D tessellation \mathcal{T} induces in section planes F a 2D tessellation $\mathcal{T}' = \mathcal{T} \cap F$ of intensity $\lambda' = 1/\mathbf{E}v' = \lambda\mathbf{E}w$. The mean values of its size characteristics (*cell area* v' , *perimeter* s') obey the stereological relations [18] $\mathbf{E}v' = \mathbf{E}v/\mathbf{E}w$, $\mathbf{E}s' = 0.25\pi\mathbf{E}s/\mathbf{E}w$ and its shape parameters are *edge number* $n_e = 2/(1 - \mathbf{E}\Theta'/\pi)$, *random edge angle* θ' and *shape factor* $f' = 4\pi v'/s'^2$. If the tessellation is stationary isotropic, the plane F is arbitrary, otherwise the averaging relates to a suitably defined set of planes. The properties of induced tessellations are of particular importance as *e.g.* the grain size estimation so substantial in metallurgical praxis is completely based on the inference acquired in planar sections.

A short paper on shapes of Voronoi cells covering only tessellations generated by Neyman-Scott cluster fields with rather limited cluster cardinality $N \leq 30$ was published two years ago [14]. From that time on, the range of examined tessellations was considerably extended and generating processes L include displaced lattices of several types, hard-core and Gibbs models at one side and locally inhomogeneous Bernoulli cluster fields and mixtures on the other one. Shape properties of Voronoi cells are, in fact, properties of space filling polyhedra. That is why the first part of the paper - chapter 2 - reviews selected results concerning tiling by congruent polyhedra - an old problem started by Plato and Aristotle and constituting also the second part of the Hilbert's eighteen problem (the term tiling instead of tessellation is commonly preferred in this connection). Moreover, several such tilings are the limit cases of random tessellations generated by displaced lattices. The body of the paper reports the authors' recent results obtained by computer simulation.

2. POLYHEDRAL TILINGS

2.1. Basic types.

2.1.1. *Monohedral tilings, prototiles.* Tiling \mathcal{T} , in general, is the covering of \mathbb{R}^d by sets - *tiles* - with pairwise disjoint interiors. It is *monohedral* if each tile is congruent to a fixed set called the *prototile*, which is a homeomorphic image of the unit d -ball. All possible prototiles are neither found nor at least classified even in \mathbb{R}^2 . However, if a 2D prototile is bounded it must be a convex n -gon with $2 < n \leq 6$. In higher dimensions, the problem is intractable and many examples of n -hedra, $n = 4, 5, 6, 7, 8, 10, 12, 14, 18, \dots$, tiling \mathbb{R}^3 are described in the series of papers by Goldberg (*e.g.* [5, 6]). It is not even known whether the number of combinatorial (= isomorphic) prototiles is finite and whether there is an upper bound on the number of faces. Consequently, a substantial restriction of the problem is necessary.

2.1.2. *Isohedral tilings, stereohedra.* Any Euclidean motion of \mathbb{R}^d mapping each tile of \mathcal{T} onto a tile of \mathcal{T} is called the symmetry of \mathcal{T} ; the set of all symmetries of \mathcal{T} forms the discrete symmetry group $\mathcal{S}(\mathcal{T})$. Tilings in which $\mathcal{S}(\mathcal{T})$ acts transitively on the tiles are called *isohedral* and their prototiles are called the *stereohedra*. Their significant property is that the number of their faces has an upper bound. By Delaunay theorem [2], $n_f \leq 2^d(1 + a) - 1$, where a is the number of *aspects* of the prototile (an aspect is a transitivity class of tiles with respect to the translation subgroup of $\mathcal{S}(\mathcal{T})$ - for details see [2, 7]). In \mathbb{R}^3 , the maximum number of aspects is 48, hence $n_f \leq 390$. However, the most complicated Voronoi cell found as yet had 38 facets [2]. The second part of the Hilbert's eighteen problem can be formulated in the above introduced terminology as follows [7]: *Does there exists an anisohedral polyhedron*

in \mathbb{R}^3 ? The affirmative answer was given by Reinhardt in 1928. It is sufficient to find planar anisohedral prototiles and to take them for bases of prisms. Several examples of such planar prototiles with the corresponding references are shown in [7]; it should be noted that they need not be non-convex, the congruence can be direct and a tiling face-to-face (see below).

2.1.3. Voronoi and lattice tilings, plesiohedra and parallelohedra. Further restriction of the problems is achieved by considering only tilings generated by point sets via Voronoi cells; frequently also the terms *Dirichlet domains* or *plesiohedra* ($\pi\lambda\eta\sigma\iota\omicron\varsigma$ - neighbouring) are used. Voronoi cell (with respect to the standard Euclidean metric) adjoins to any point of the generating system L all points of the embedding space lying closer to it than to any other point of the system. Voronoi tiling generated by an arbitrary point set is a *face-to-face* tiling (*i.e.* $C_i \cap C_j$ is either \emptyset or a common face of C_i, C_j). A tiling is called *primitive* (also the terms *ordinary equilibrium state* or *normal tessellation* are used in stochastic geometry) if exactly $d - k + 1$ adjacent parallelotopes meet in every its k -facet (0-facet is a vertex, 1-facet is an edge, $(d-1)$ -facet is a face). Voronoi [20] has shown that the necessary and sufficient condition of primitivity is that this rule might hold for vertices, *i.e.* just $(d + 1)$ cells meet in each vertex. The numbers of k -facets of primitive prototiles are not independent; *e.g.* the number of vertices $n_v = 2(n_f - 2)$ and the number of edges $n_e = 3(n_f - 2)$ in \mathbb{R}^3 . All random tessellations examined in chapters 3 and 4 are primitive and it is sufficient to consider only the number of their faces n_f .

Voronoi tilings generated by translation point lattices and called *lattice tilings* are perhaps the best analysed subclass of isohedral tilings; their prototiles are called *parallelohedra*. Voronoi [20] found the upper bound of the number of vertices for parallelohedra $n_v \leq (d + 1)!$ and also the upper bound of the number of faces has been found by Minkowski [9] $n_f \leq 2(2^d - 1)$ (two congruent sets have the same aspect if one is a translate of the other, *i.e.* $a = 1$ in the Delaunay theorem).

The number N_d of combinatorial types of parallelohedra is limited; $N_2 = 2$ - parallelogram and centrally symmetric hexagon, $N_3 = 5$ - parallelotope, hexagonal prism, rhombic and elongated (eight rhombic and four hexagonal faces) dodecahedrons, tetrakaidecahedron (Fedorov [3]). Three of them are the prototiles of common cubic lattice tilings: cubic simple (cs - NaCl) - cube, cubic body-centred (cb - *e.g.* Fe, Cr, Mo, W) - tetrakaidecahedron, cubic face-centred (cf - *e.g.* Cu, Al, Ni) - rhombic dodecahedron. The prototile of the hexagonal close-packed lattice (*e.g.* Zn, Mg, Zr) is also a dodecahedron with eight rhombic and four trapezoidal faces combinatorially equivalent to the rhombic dodecahedron - see below. Tetrakaidecahedron has the maximum attainable number $n_v = 24$ of 3-valent vertices (the number of edges meeting in a vertex of an isolated polyhedron) and also the maximum possible number of faces $n_f = 2(2^d - 1)$ [9]. It is the only primitive of the Fedorov five basic space fillers. Rhombic dodecahedron has six 4-valent vertices and eight 3-valent vertices whereas cube with eight 3-valent vertices is the least primitive of them.

2.2. Packing, covering and extremum problems. Isohedral tilings are closely connected with packings and coverings problems, namely in the selection of the densest packing (the packing density $\delta_K \leq 1$, which is intuitively the ratio of the sum of the volumes of the packed bodies K to the volume of the covered space, is maximum) and of the thinnest covering (the analogically defined covering density $\vartheta_K \geq 1$ - the ratio of the sum of the volumes of the covering bodies K to the volume of the covered space, is minimum) [4]. Packing and covering densities of monohedral

tiles equal 1, but the to packing and covering densities of spheres inscribed and circumscribed to particular tiles attract a considerable attention.

In the planar case, the closest packing of circles is that one of circles inscribed to the tiling by regular hexagons ($\delta_K = \pi/\sqrt{12} = 0.9069$) and the thinnest covering is that one of the circles circumscribed to the same hexagons ($\vartheta_K = 2\pi/\sqrt{27} = 1.209$). The hexagonal tiles are Voronoi cells of the circle centres and are also the solution of another extremum problem: to find a it thinnest tiling, namely that one of minimum perimeter at a given (unit, say) area. Thus the tiling by regular hexagons solves the all three extremum problems in \mathbb{R}^2 . A direct generalization of this idea to higher dimensions is straightforward, namely we can look for tilings with the smallest size characteristics like surface area, mean breadth *etc.*, or in other words, for the thinnest tilings with respect to w, s *etc.* The values of the corresponding characteristics of a d -ball are the lower bounds due to already mentioned isoperimetric inequality and its generalizations and it is therefore reasonable to introduce shape parameters of the type introduced in chapter 1, namely normalized with respect to the values appropriate for d -balls.

In \mathbb{R}^3 , a different situation is encountered. Replacing the circles in the densest hexagonal packing by spheres of the same radius, an elementary layer A of a three dimensional packing is formed. The sphere centres may be then considered to be the nodes of a $\{111\}$ plane of the cubic face-centred lattice (cf). Shifting the layers subsequently by $\frac{1}{2} \langle 1, -1, 0 \rangle$ the layers B, C and again A are formed and the whole half-space is filled by the stacking ABCABC...; similarly its complement is formed by shifts in the opposite direction. The Voronoi tiles of the sphere centres are rhombic dodecahedrons, the packing density is $\delta_K = \pi/\sqrt{18}$. That this is just the densest sphere packing was conjectured by Kepler or perhaps a few years before by T. Harriot (Sir Walter Raleigh's mathematical assistant). Ferguson and Hales claim to prove Kepler conjecture in 1998 by a sophisticated computational approach, but it seems that their proof is not yet generally accepted - see <http://www.math.lsa.umich.edu/~hales/>.

Tab. 1 Packing and covering densities, prototile characteristics ($v = 1$).

	δ_K	ϑ_K	s	w
tetrakaidecahedron (cb)	0.680	1.464	5.315	1.336
rhombic dodecahedron (cf)	0.742	2.0946	5.345	1.375
cube (cs)	0.524	2.721	6	1.5

Harriot was also the first to notice that there is another packing of the same δ_K , namely that one of the hexagonal closed packed lattice with stacking ABABAB... created by the shift sequence $\frac{1}{2} \langle 1, -1, 0 \rangle \rightarrow \frac{1}{2} \langle -1, 1, 0 \rangle \rightarrow \frac{1}{2} \langle 1, -1, 0 \rangle \dots$. The Voronoi tile is again a dodecahedron with 6 rhombic and 6 trapezoidal faces. The covering density is $\vartheta_K = 2\pi/3$ in the both cases. Spheres centred in the nodes of the body-centred cubic (cb) lattice have smaller packing density (Tab. 1) but the thinnest covering $\vartheta_K = \pi\sqrt{125}/24$. Hence the extremum properties are split between face-centred and body-centred cubic tilings. The latter of them also solves the problem of minimum surface density. Assuming a unit tiling, the thinnest tiles must have minimum surface s - see Tab. 1. For a comparison, the spheres centred in the nodes of the cubic simple (cs) lattice have $\delta_K = \pi/6$ only and $\vartheta_K = \pi\sqrt{3}/2$.

Tab. 2 Shape characteristics of basic parallelotopes.

	n_f	n_e	n_v	f	g	θ	$\mathbf{E}\theta'$	f'	$\mathbf{E}v'$	CV v'
cb	14	36	24	0.800	0.868	24×2.186 12×1.91	2.0944	0.81	0.748	0.532
cf	12	24	14	0.735	0.860	2.0944	2.0944	0.81	0.727	0.565
cs	6	12	8	0.566	0.724	$\pi/2$	$\pi/2$	0.67	0.666	0.642

The numerical values of packing and covering densities as well as the size characteristics of cubic lattice tilings are shown in Tab. 1, shape properties of the corresponding tiles are in Tab. 2. As another confirmation of the tetrakaidecahedron perfection, also the values of the mean profile areas $\mathbf{E}v'$ and of the corresponding coefficients of variation CV v' in the 2D tessellations induced by cubic lattice tilings are shown. The fraction of small profiles is small, the mean value $\mathbf{E}v'$ is the highest and CV v' is the smallest. The shape factors are also the highest of all. Note for a comparison that a unit ball has $s = 4.836$ and $w = 1.241$.

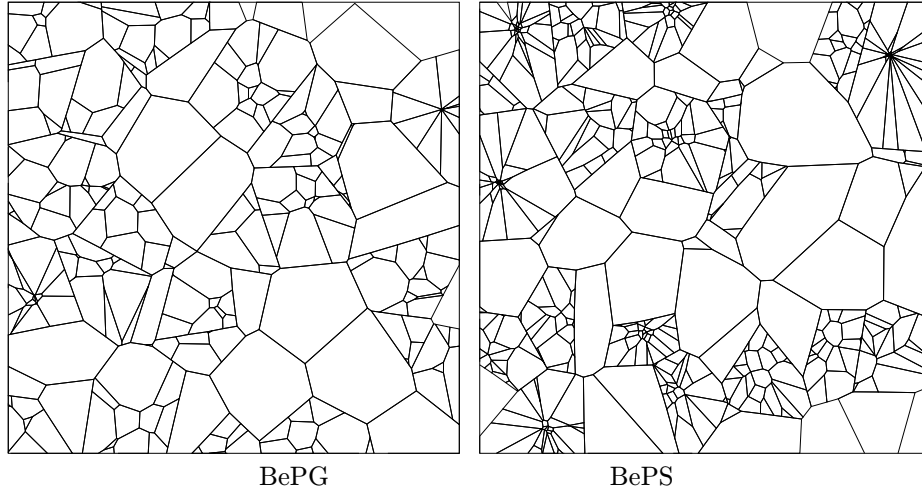
3. RANDOM TESSELLATIONS

3.1. Generating point fields. All examined point fields can be introduced in terms of the germ-grain model [18]. The germs constitute either a point lattice denoted by L or the stationary Poisson point process (PPP) denoted in this context by P, their intensities are λ_p . The grains implanted in the germs include several alternatives as follows (for details see [11, 12, 13, 15] and the Internet page <http://fyzika.ft.utb.cz/voronoi/>).

3.1.1. Displaced lattices (pseudo-hard-core models). Grains which are i.i.d. replications of randomly shifted origin (random shift vector ξ) change the lattice of germs L (nodes x_i , say) into the Bookstein model on the lattice [19] (displaced lattice process, points $z_i = x_i + \xi$). The model is widely used in physics and also in the stochastic theory of shape. The shift distribution is usually 3D normal $N(0, \Sigma^2)$ distribution with the covariance matrix $\Sigma^2 = a^2\mathcal{I}$, where \mathcal{I} is the unit matrix. The process characteristics are the type of the displaced lattice and parameters of the shift distribution. The generated tessellations accomplish the bridge between the original isohedral tiling ($a = 0$) and the Poisson-Voronoi tessellation (PVT) generated by the stationary Poisson point process ($a \rightarrow \infty$). Above mentioned three cubic lattices have been chosen as L ; the notation is Bcs, Bcb, Bcf.

3.1.2. Hard-core models. If the grain is either the origin (the germ is retained) or the void set (the germ is removed) then the resulting process is either independent or dependent thinning of the germs; Bernoulli lattice process is perhaps the most familiar example of the former case. Hard-core processes like Matérn I (MI) and II (MII) type processes and SSI (simple sequential inhibition) process [18, 19] exemplify the latter case - dependent thinning of the Poisson point process (PPP) of intensity λ_0 . The attained intensity of the thinned process $\lambda_\bullet = p_\bullet \lambda_0$, where p_\bullet is the Palm retaining probability of a "typical point" [18], namely the average relative gain of the thinning process; \bullet stands for I, II and SSI. The key parameters are the minimum allowable distance between points (the hard-core distance) D or, equivalently, the packing fraction f_p attained by implementing balls of diameter D into the retained germs.

3.1.3. Cluster fields. Grains are random point clusters Z characterized by the cluster cardinality (usually Poisson distributed) N_Z with the mean N , by the spatial arrangement (globular - G, spherical - S) of points (*daughters*) forming the cluster



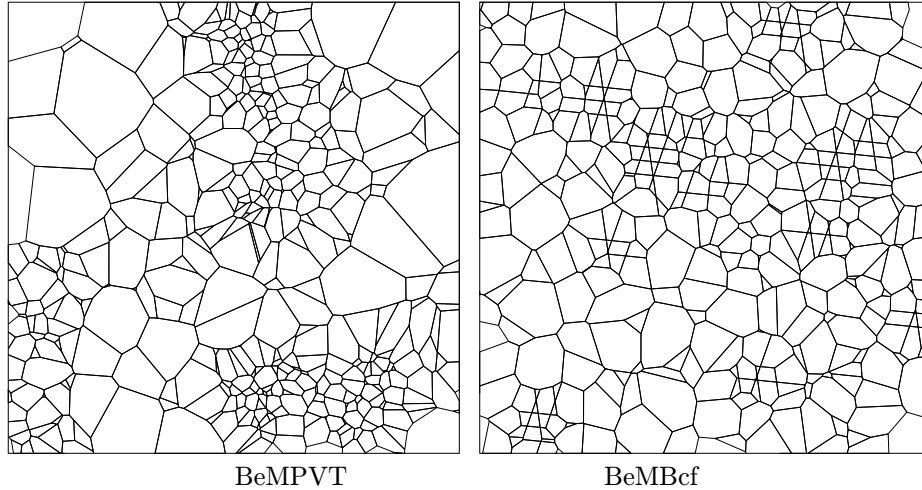
OBRÁZEK 1. Planar sections of 3D tessellations generated Bernoulli cluster fields BePG and BePS ($N = 50, p = 0.5, \delta = 0.05$). The small inner cells of BePG are not perceptible in the 2D section.

and by the cluster size (*e.g.* by the embedding ball diameter D usually expressed as the scale independent parameter $\delta_{\bullet} = D/\rho_p(\bullet)$, where $\rho_p(\bullet)$ is the mean nearest neighbour distance of the germs). *Bernoulli cluster field* [16] is a model of independent clustering: random point clusters are implanted in the parent points (which are then removed) with a probability $0 \leq p \leq 1$; the resulting intensity is $\lambda = (pN + 1 - p)\lambda_p$. The process represents a continuous passage between PVT ($p = 0$) of germs and *Neyman-Scott cluster field* ($p = 1$) or germ lattice and lattice of clusters (the notation PG, PS is used for the point fields as well as for tessellations generated by them). If $0 < p < 1$, $\delta \lesssim 0.1$ and N is high, the generated tessellation is a $(1 - p) : p$ mixture of large and only slightly corrugated parent cells and of similar cells fragmented into N_Z small cells - Fig. 1. A growth of the cluster size δ leads to a gradual dissolution of clusters and all cluster fields approaches PPP.

3.1.4. *Mixtures.* The last examined point field is the *Bernoulli mixture process* - BeMX. Pieces of another process X of intensity λ_m (PPP, displaced lattices) are implanted with a probability $0 \leq p \leq 1$ into the interior of pre-cells generated by the parent process (PPP) of intensity $\lambda_p \ll \lambda_m$. The resulting point process of intensity $p\lambda_m + (1 - p)\lambda_p$ is the union of these pieces and parents of the void pre-cells. The tessellation generated by it consists of cells corresponding to the implanted process, somewhat reduced parent cells and of intermediate layers of elongated cells cutting the original faces between fragmented and unchanged pre-cells - Fig. 2.

3.2. **Basic features, inner and outer cells.** An important feature of tessellations generated by globular cluster fields are s.c. *inner cells* introduced in [12, 13]. Points of spherical clusters fragment the parent cell into more or less similar pyramidal cells nearly each of which has a base formed by a part of the parent cell boundary. Consequently, nearly each generator has a neighbour belonging to another cluster - hence the term *outer cells*.

For clusters of the G-type, the situation is similar only if the cardinality N_Z of the cluster Z is small. Starting with $N_Z = 5$, it may happen that all neighbours



OBRÁZEK 2. Planar sections of 3D tessellations generated by Bernoulli mixtures ($p = 0.1$) with PVT ($\lambda_m = 200\lambda_p$) and Bcf ($\lambda_m = 30\lambda_p, a = 0.0005$, *i.e.* only a slightly disturbed isohedral tiling). Pre-cells are in the both cases generated by PVT.

of a generating point are points of the same cluster; the cell generated by such a point lies completely in the interior of the parent cell and will be called the *inner cell*. The proportion α_N of inner cells is a monotone increasing function of N ($\alpha_{20} \approx 0.25$, $\alpha_{30} \approx 0.4$, $\alpha_{99} \approx 0.6$, $\alpha_{200} \approx 0.7$). Nearly all properties of tessellations generated by cluster fields can be explained by using the concept of *inner* and *outer* daughters. Only occasionally small *false* inner cells are formed in PS tessellations at high values of N , namely when the distance of two parent points is comparable with the ball size c and two spherical clusters are mixed together. If the cluster size is small enough in comparison with the distances of parents the distributions of the majority of cell characteristics in tessellations generated by globular clusters are bimodal and heavy-tailed. The cells of opposite types produce very distinct modes and usually contribute to the opposite tails of the distribution in question. The type (P,L) of the parent arrangement does not influence this behaviour. In contrast to this situation, PS tessellations have unimodal distributions of cell properties.

In Bernoulli cluster fields, a particular mode in cell property distributions corresponds to the original unbroken parent cells. Consequently, the cell volume distribution is roughly bimodal with the mode ratio approximately $1:N$ in the case of spherical clusters BePS and trimodal in the case of globular clusters BePG.

A suitable characteristic sorting the tessellations with respect to the regularity of their spatial arrangement is the coefficient of variation of the cell volume CV v . The examined tessellations have been generated by various random point fields described in the literature [18, 19]; they cover a wide range of space filling systems from isohedral tilings to highly locally inhomogeneous cases characterized by multimodal distributions of cell properties and $0 \leq CV$ $v \leq 8$ - see Tab. 3. However strange the Bernoulli cluster field may seem, they have been introduced by the authors in order to model grain structures of rather common low alloyed steels after certain thermal treatment.

4. RESULTS OF SIMULATIONS

The method of simulation is described in [12]. In [14], the results obtained for PG, PS cluster fields with $N \leq 30$ are described. In the present paper, the range of the investigation is extended up to $N = 200$, $\delta = 0.05$, added are Bernoulli cluster fields (at $\delta = 0.05, p = 0.5$ unless otherwise stated) and Bernoulli mixtures (PVT & PVT at $p = 0.1$). Moreover, tessellations generated by hard-core processes and displaced lattices are included. The former are represented by the Matérn type II process at the maximum attainable value of packing fraction $f_p = 0.125$ and by SSI model at the packing fraction $f_p \approx 0.28$. For related results concerning Strauss model see [1]. A wide range $0 \leq a \leq 10$ of the shift standard deviation was covered in tessellations generated by Bcs, Bcf and Bcb displaced lattices; their differences from PVT are negligible at the upper bound of a , at least as far as cell characteristics are examined. However, the attention was given mainly to a small randomization of the isohedral tilings; hence the values in tables relates to $a = 0.05$.

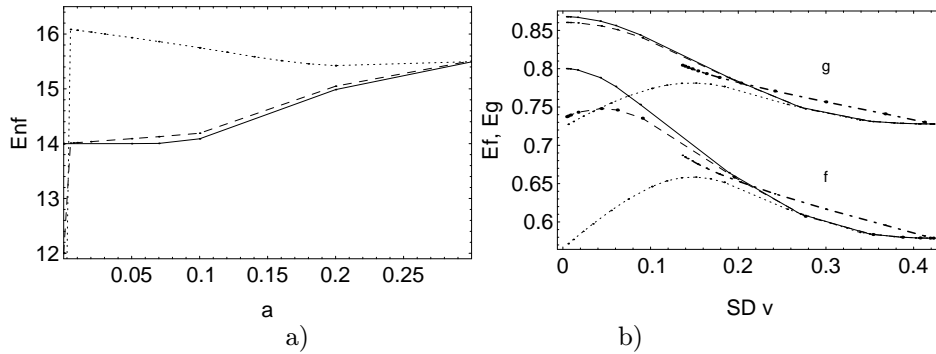
The results are presented mostly in tables. The arrows in their rows point in the direction of growing cluster cardinality N (e.g. the left arrow in the PS row of Tab. 3 shows indicates that n_f decreases with growing N).

4.1. Number of faces.

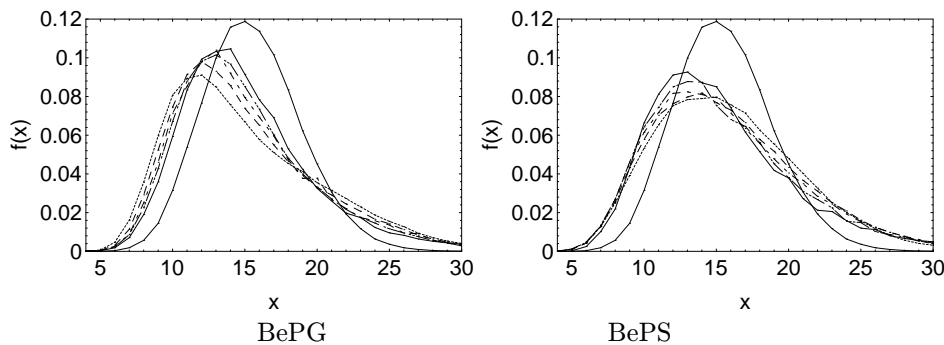
Tab. 3 Face and edge numbers, coefficient of variation CV v (the maximum values relate to the sample size $\approx 10^6$).

	N or a	var n'	Max n'	$\mathbf{E}n_f$	var n_f	Max n_f	CV v
Bcb	0.05	2.53	10	14.00	0.0013	15	0.043
Bcf	0.05	2.17	12	14.09	1.10	18	0.044
Bcs	0.05	2.54	13	15.93	4.68	26	0.054
SSI	-	2.41	15	15.03	3.54	25	0.136
M II	-	2.54	15	15.3	6.08	29	0.238
PVT	-	2.863	15	15.536	11.125	38	0.423
PS	30→200	2.6	15	15.2←16	25→29	58	1.10→1.28
PG	30→200	4.0	16	15.5←16	21←28	50	1.74→3.07
BeMPVT	50→200	3.5	21	15.1	18→19	86	1.55→2.97
BePS	30→99	5.5→6	27	14 - 15.5	65→100	130	2.94→5.29
BePG	30→200	5→6	27	14 - 15.5	35←40	120	3.03→7.86

4.1.1. *Hard-core and pseudo-hard-core tessellations.* Even the smallest shifts of generating points double the face number of non-primitive tiling by cubes - Fig. 3a; the tiles are truncated in all its vertices, the mode is 16 but pentakaidecahedrons and heptakaidecahedrons have only slightly lower frequencies and the pdf is fairly stable up to $a = 0.05$. Neither dodecahedral tiling is primitive and an abrupt change in n_f is necessary however small is a . Nevertheless, the pdf of n_f is narrow and tetrakaidecahedra and pentakaidecahedra strictly prevail at small a (≤ 0.05). On the other hand, the primitive tetrakaidecahedral tiling is very stable, polyhedrons with $n_f \neq 14$ are nearly completely excluded and a wider range $13 \leq n_f \leq 17$ starts to be covered not sooner then at $a \geq 0.1$. Note the great differences in var n_f between Bcb, Bcf and Bcs at $a = 0.05$ (Tab. 3). A relatively high value of var n' in Bcb is the consequence of more acute corners of the tetrakaidecahedron in the comparison with rhombic dodecahedrons (the fraction of triangular profiles is 0.03 and 0.07 in 2D tessellations induced by cf and cb tilings, respectively). The both hard-core processes are roughly comparable with the Bcs displaced lattice at $a = 0.05$; the effect



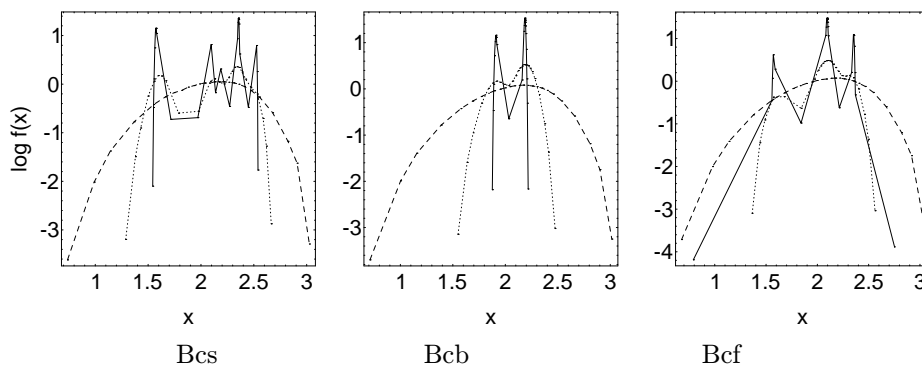
OBRÁZEK 3. a) The change in $\mathbf{E}n_f$ in tessellations generated by displaced lattices: Bcb (full line), Bcf (dashed) and Bcs (dotted). b) The change in shape factors $\mathbf{E}g$, $\mathbf{E}f$ in tessellations generated by displaced lattices (line styles as in Fig. 3a; for a comparison the result for tessellations generated by the SSI hard-core model (dash-dotted line) is shown).



OBRÁZEK 4. Probability density functions of the cell face number n_f in BePG (a) and BePS (b) tessellations ($p = 0.5$). The quasi-symmetrical pdf belongs to PVT, the mode heights increase along the sequence $N = 30, 50, 70, 99, 200$.

of doubled packing fraction f_p and more pronounced ordering of SSI is reflected by a lower value of $\text{var } n_f$ in comparison with M II.

4.1.2. *Cluster field tessellations.* $\mathbf{E}n_f$ changes only moderately with increasing N , however, $\text{var } n_f$ is much greater in the both cluster field tessellations than in PVT (Tab. 3). The pdf's of n_f have heavier tails caused by the presence of inner cells with low number of faces (tetrahedral and pentahedral inner cells are rather frequent at $N \gtrsim 10$, say) and by outer cells with very high number of faces. However, in PG tessellations at high N , the interior of the cluster embedding ball is already a small piece of PVT, the inner cells with low n_f vanish and simultaneously the proportion of outer cells decreases; consequently, a slow diminution of $\text{var } n_f$ follows. On the other hand, the growing number of interacting outer cells belonging to different clusters ensure a steady growth of $\text{var } n_f$ in PS tessellations - see Fig. 4 and note shifts of the nodes in the opposite directions in BePG and BePS tessellations. This behaviour was already observed in the interval $1 \leq N \leq 30$ and was discussed and



OBRÁZEK 5. Probability density functions of the random dihedral angle θ in tessellations generated by Bookstein models at $a = 0.005$ (full line), 0.05 (dotted) and 0.2 (dashed).

documented in [14] for PG and PS cluster fields.

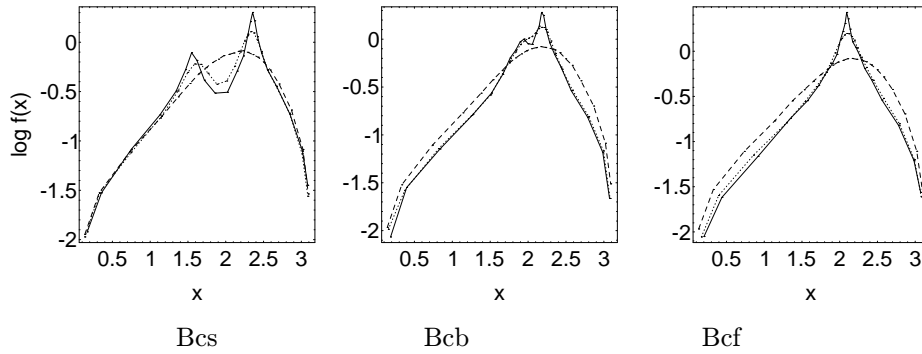
In BePG and BePS tessellations, the lower bound of $n_f \approx 14$ (without an arrow) relates to $p = 0.1$, whereas the upper bound corresponds to PVT; the effect of N is not substantial (the arrow was omitted accordingly). The maximum values of $\text{var } n_f$ are attained at $p = 0.5$ when also CV v is maximum and they increase with growing cluster cardinality. The mean value $\mathbf{E}n' = 6$ is obligatory for all primitive (normal) tessellations, $\text{var } n'$ is higher than in PVT but does not change substantially above $N = 30$. In BePS and BePG fields, the fragmentation of the original parent cell boundary *without* implanted cluster by small outer cells of fragmented neighbours is so high that quite extremal values of $\text{Max } n_f$ can be observed (Tab. 3) and the effect of increasing N is perceptible even in sections.

4.2. Dihedral and edge angles.

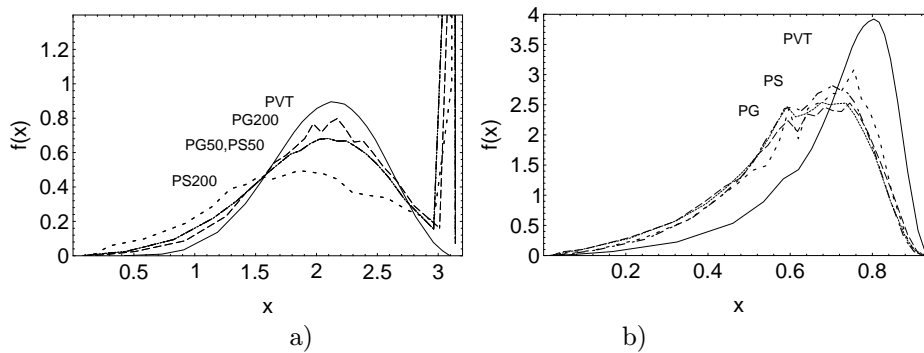
Tab. 4 3D dihedral angles.

	N or a	$\mathbf{E}\theta$	$\text{var } \theta$	$\mathbf{E}\Theta$	$\text{var } \Theta$
Bcb	0.05	2.09	0.017	2.09	0.000002
Bcf	0.05	2.09	0.043	2.09	0.0018
Bcs	0.05	2.09	0.112	2.09	0.0043
SSI	-	2.09	0.086	2.09	0.0021
M II	-	2.08	0.122	2.08	0.0065
PVT	-	2.06	0.179	2.07	0.0125
PS	30→200	2.04	0.503→0.563	2.04	0.024←0.027
PG	30→200	2.04→2.05	0.281←0.373	2.04→2.05	0.019←0.024
BeMPVT	50→200	2.05	0.223	2.05	0.017←0.019

4.2.1. *Hard-core and pseudo-hard-core tessellations.* The estimation of dihedral angles confirms the great stability of the tetrakaidecahedral tiling - Fig. 5, Tab. 4: only the narrow interval between the two possible values in the isohedral tiling is covered at $a = 0.005$ and it becomes wider only slowly. The both Bcf and Bcs tessellations cover considerably wider interval of values. On the other hand, the small differences in pdf's of the edge angle θ' (Fig. 6) demonstrate how much of information is lost in induced tessellations.



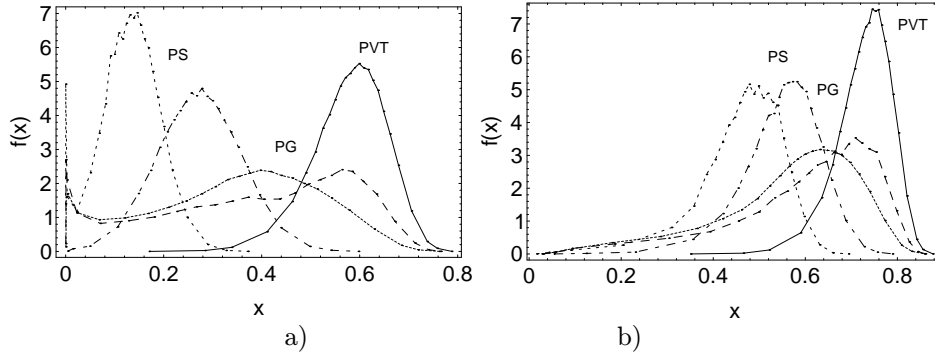
OBRÁZEK 6. Probability density functions of the random dihedral angle θ' in the induced 2D tessellations generated by Bookstein models at $a = 0.005$ (full line), 0.05 (dotted) and 0.2 (dashed).



OBRÁZEK 7. Probability density functions of the random dihedral angle θ (a) and of the 2D shape factor f' (b) in PVT (full line) and in PG, PS tessellations at $\delta = 0.05$. PG: $N = 50$ (densely dotted), 200 (dashed), PS: $N = 50$ (dash-dotted), 200 (dotted).

4.2.2. *Cluster field tessellations.* The main change produced in the boundaries of parent cells are new edges created at their intersection with the symmetry planes of closely spaced pairs of daughters; the corresponding dihedral angle is close to the value of π and its frequent occurrence gives rise to the significant secondary mode in the pdf of the random dihedral angles θ, θ' [14] - Fig. 7a.

The dihedral angle θ examined here is the *random dihedral angle* - one dihedral angle is selected uniformly at random from each cell. The mean value of θ remains nearly unchanged as together with the straight angles mentioned above also two approximately right angles are created. The behaviour of pdf's at $N \leq 30$ is shown and discussed in [14]. In PG tessellations, the pdf of θ approaches that one of PVT at higher values of N : the inner cells with low face numbers and low dihedral angles gradually vanish. In PS tessellations, the mode systematically shifts to lower values as a manifestation of growing proportion of flat, wedge and pyramidal cells and the increasing fragmentation complexity of parent cells ensures a steady growth of $\text{var } \theta$. The distribution of the edge angles - in particular the presence of the secondary mode at $\theta' \rightarrow \pi$ - in the induced planar tessellations is very similar, hence clusters manifest themselves very clearly this way also in planar sections - Tab. 6.



OBRÁZEK 8. Probability density functions of the mean 3D shape factors Ef (a) and Eg (b) in PVT (full lines) and at $\delta = 0,05$ in PG, PS tessellations. PG: $N = 50$ (densely dotted), 200 (dashed), PS: $N = 50$ (dash-dotted), 200 (dotted).

The values for BePS (BePG) tessellations vary between PVT and PS (PG) tessellations.

4.3. Shape factors.

Tab. 5 3D shape factors (the sample size $\approx 10^6$).

	N or a	Ef	$\min f$	Eg	$\min g$
Bcb	0.05	0.788	0.739	0.862	0.828
Bcf	0.05	0.749	0.688	0.856	0.828
Bcs	0.05	0.615	0.552	0.755	0.713
SSI	-	0.686	0.535	0.804	0.691
M II	-	0.639	0.400	0.772	0.580
PVT	-	0.579	0.1	0.728	0.2
PS	30→200	0.13←0.32	0.00002	0.46←0.57	0.00002
PG	30→200	0.34→0.39	0.00006	0.55→0.60	0.01
BeMPVT	50→200	0.52±0.01	0.01	0.69±0.01	0.2

4.3.1. *Hard-core and pseudo-hard-core tessellations.* The shape factors are $f \propto w^{-3}$ and $g \propto s^{-2/3}$ in unit isohedral tessellations. Tetrakaidecahedrons create the thinnest tiling with respect to the both surface area s and mean breadth w , hence the both shape factors must have the highest values attainable by an isohedral tiling in \mathbb{R}^3 . Note also - Fig. 3b, that the remaining two displaced cubic tessellations become thinner with respect to the both s, w on growing a , i.e. f, g increase in certain interval of small values of a .

The range of shape factors f, g is relatively narrow in hard- and pseudo-hard-core tessellations and in PVT, no extremely thin or flat cells develop. On the contrary, there is no lower bound on f' in the corresponding induced tessellations - Tab. 6; highly elongated profiles are created whenever a section plane passes near an edge approximately parallel with it.

4.3.2. *Cluster field tessellations.* A secondary mode near $f \approx 0$ in the distribution of the shape parameter f - Fig. 8 - is observed in tessellations generated by cluster fields of both types but it is insignificant and occurs at higher values of N in tessellation produced by spherical fields. It is produced by rod-like cells of small volume v and

appreciable mean breadth w . A comparable fraction of plate-like cells would create a similar mode near zero in the distribution of the shape factor g , but this distribution is the only one which is strictly unimodal; hence plate-like cells must be rather rare.

Tab. 6 2D shape factor and edge angles (the sample size $\approx 10^6$).

	N or a	$\mathbf{E}f'$	$\min f'$	$\mathbf{E}\theta'$	$\text{var } \theta'$
Bcb	0.05	0.808	0.004	2.00	0.021
Bcf	0.05	0.808	0.003	2.02	0.020
Bcs	0.05	0.712	0.002	2.01	0.030
SSI	-	0.760	0.002	2.01	0.25
M II	-	0.739	0.002	2.01	0.29
PVT	-	0.579	0.003	2.000	0.349
PS	30→200	0.6	0.001	2.00	0.513←0.576
PG	30→200	0.62	≈ 0	1.96→1.97	0.584←0.61
BeMPVT	50→200	0.69±0.01	0.003	1.99	0.39→0.41
BePS	30→99				
BePG	30→200				

A distinct bimodality was observed also in the distribution of planar the shape factor f' , even in PVT [5]. The position of the secondary mode is rather stable. Its probable cause is the abundant presence of triangular profiles formed whenever a section plane hits a cell near its vertex (the mode value $f' \approx 0.6$ is appropriate to an equilateral triangle) and it is more pronounced in PG and PS tessellations - Fig. 7. The values for BePS (BePG) tessellations vary between PVT and PS (PG) tessellations.

5. SUMMARY

In the examined sequence of hard- and pseudo-hard-core tessellations, a gradual passage is accomplished from a regularity of point arrangement in translation lattices to a complete independence of points in PPP. This passage is reflected by the dual representation of point patterns through the properties of Voronoi cells, namely as a passage from dense (in the sense of inscribed sphere volumes) and thin (with respect to cell boundary properties) tilings to PVT. Its main features are an increase (not always monotone) of the values and ranges of the face, edge and vertex numbers and the loss of equiaxiality (decreasing shape factors and a continuous range of dihedral angles spanning finally the whole interval $(0, \pi)$).

At small values of cluster size δ and growing cluster cardinality N , globular cluster fields gradually realize a local point concentration. At sufficiently high N , the points are compressed within the cluster embedding balls separated by large pointless regions. The majority of them generates inner cells gradually approaching a piece of PVT, which explains the "left arrows" in the rows of the tables describing PG tessellations. Only the points lying in the vicinity of the ball boundary generate large outer wedge-, rod- and plate-like cells filling up the vast space between individual clusters. These cells forming quasi-spherical bundles resemble cells of spherical clusters and their properties differ from those of PVT - they have lower values of $\mathbf{E}\theta$ and of shape factors and cover wider ranges of θ and n_f . Their effect on the mean values gradually fades out with growing N in PG cluster fields and the direction of their gradual development - symbolized by "right arrows" in the corresponding table rows - must be examined in the PS fields only. Unfortunately even in such fields, small PVT-islands are formed by clusters innate to PPP at high values of N .

In the Bernoulli mixtures and Bernoulli cluster fields, the above described mixing of various types of Voronoi cells can be better controlled than in pure PG and PS fields.

Due to their scale independence, shape properties are very suitable for an exploratory analysis of point patterns as well as of natural tessellations.

REFERENCE

- [1] K. Bodlák, P. Ponižil, I. Saxl: *3D Voronoi tessellation generated by Strauss process*. Proc. Summer school "Robust 2000" (this issue).
- [2] P. Engel: *Geometric crystallography*. In: Handbook of Convex Geometry (P. M. Gruber, J. M. Wills, eds.). North-Holland, Amsterdam 1993, pp. 989-1022.
- [3] E. С. Федоров: Начала учения о фигурах. Изд. Акад. наук, Ленинград 1953.
- [4] L. Fejes Tóth: *Lagerungen in der Ebene auf der Kugel und im Raum*. Springer-Verlag, Berlin 1953.
- [5] M. Goldberg: *Several new space-filling polyhedra*. Geometriae Dedicata **5** (1976), 517-523.
- [6] M. Goldberg: *Convex polyhedral space-fillers of more than twelve faces*. Geometriae Dedicata **8** (1979), 491-500.
- [7] B. Grünbaum, G. C. Shephard: *Tilings with congruent tiles*. Bull. Amer. Math. Soc. **3** (1980), 951-973.
- [8] Lorz U, Hahn U: *Geometric characteristics of random spatial Voronoi tessellations and planar sections*. Preprint 93-05. Freiberg: Bergakademie Freiberg, 1993.
- [9] Minkowski H: *Allgemeine Lehrsätze über die konvexen Polyeder*. Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Math-Phys Kl (1897), 198-219.
- [10] Okabe A., Boots B., Sugihara K.: *Spatial Tessellations*. J. Wiley & Sons, Chichester 1992.
- [11] P. Ponižil and I. Saxl: *Properties of 3D Poisson hard-core and pseudo-hard-core fields II. Voronoi tessellations*. Proc. S⁴G, Int. Conf. on Stereology, Spatial Statistics and Stochastic Geometry, (V. Beneš, J. Janáček and I. Saxl, eds.), JČMF, Praha, pp. 227-239 (1999). See also a substantial part of all data and a summarizing paper on the Internet address: <http://fyzika.ft.utb.cz/voronoi/>.
- [12] I. Saxl and P. Ponižil: *3D Voronoi tessellations of cluster fields*. Acta Stereol. **17** (1998), 237-246.
- [13] I. Saxl and P. Ponižil: *3D Voronoi tessellations generated by Poisson and lattice cluster fields*. Acta Stereol. **17** (1998), 247-252.
- [14] Saxl I, Ponižil P.: *Shapes of Voronoi polytops*. In: Proc. Int. Conf. "Prague Stochastics '98", (M. Hušková, P. Lachout, J.Á. Víšek, eds.). JČMF, Praha 1998, 505-10.
- [15] Saxl I.: *Analýza náhodných bodových vzdáleností a Voronoiovy teselace systémů*. In: Robust'98 (J. Antoch, G. Dohnal, eds.), JČMF, Praha 1998, 161-178.
- [16] I. Saxl, P. Ponižil: *Bernoulli cluster fields: Voronoi tessellations*. Submitted to *Appl. Math.*
- [17] E. Schulte: *Tilings*. In: Handbook of Convex Geometry (P. M. Gruber, J. M. Wills, eds.). North-Holland, Amsterdam 1993, pp. 901-926.
- [18] D. Stoyan, W. S. Kendall and J. Mecke: *Stochastic Geometry and its Applications*. J. Wiley & Sons, New York (1995).
- [19] D. Stoyan, H. Stoyan: *Fractals, Random Shapes and Point Fields*. J. Wiley & Sons, Chichester, 1994.
- [20] G. F. Voronoi: *Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. Deuxième Mémoire, Recherche sur les paralléloèdres primitifs*. J. Reine Angew. Math. **134**, (1908), 198-287.

CZECH ACADEMY OF SCIENCES, MATHEMATICAL INSTITUTE, ŽITNÁ 25, CZ-110 00 PRAHA 2, CZECH REPUBLIC

E-MAIL: saxl@math.cas.cz

ON SOME EXACT DENSITIES IN AN EXPONENTIAL FAMILY

MILAN STEHLÍK

ABSTRACT. The aim of this paper is to give some results on the exact density of the I -divergence in the exponential family with exponentially distributed observations. It is shown in particular that the I -divergence can be decomposed as a sum of two independent variables with known distributions. Since the considered I -divergence is related to the likelihood ratio statistics, we present the method of computing the exact distribution of the likelihood ratio test. One numerical example is provided to illustrate the methods discussed.

Резюме: Уважається проблема найти распределение И-дивергенции для экспоненциального семейства.

1 Introduction. Let's consider a statistical model with N independent observations y_1, \dots, y_N which are distributed according to the exponential densities

$$f(y_i|\vartheta) = \begin{cases} \gamma_i(\vartheta) \exp\{-\gamma_i(\vartheta)y_i\}, & \text{for } y_i > 0, \\ 0, & \text{for } y_i \leq 0. \end{cases} \quad (1)$$

Here $\vartheta := (\vartheta_1, \dots, \vartheta_p)$ is the vector of unknown scale parameters, which are the parameters of interest. The parameter space Θ is an open subset of \mathbb{R}^p , $\gamma_i \in C^2(\Theta)$ and the matrix of first order derivatives of the mapping $\gamma := (\gamma_1, \dots, \gamma_N)$ has full rank on Θ .

This model is motivated e.g. by a situation when we observe the time intervals between $(N + 1)$ successive random events in a Poisson process, which is commonly used in queueing systems (c.f. Kaufmann and Cruon, [5] and Kleinrock [6]), then the parameters $\gamma_i(\vartheta)$ are equal to the (usually parametrized) intensity γ .

Another example is the software-reliability model of Moranda developed further by Gaudoin and Soler [4]. Here the objective is to assess the failure rate based on the observation of the successive failure times,

$$0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n < \dots,$$

1991 *Mathematics Subject Classification.* 62E15, 62F10, 60D05, 60F10.

Key words and phrases. Exponential family, I -divergence, likelihood ratio, maximum likelihood, GLIM, Lambert-W function.

Research was supported by the VEGA grant(Slovak Grant Agency) No 1/7295/20.

which are observations of a random point-process.

Gaudoin and Soler(1992) suppose, that

$$\gamma_i(\vartheta_1, \vartheta_2) = \vartheta_1 \lambda_i(\vartheta_2); \quad i = 1, \dots, N$$

with $\vartheta_1 \in \mathbb{R}^+, \vartheta_2 \in \mathbb{R}$. The parameter ϑ_1 is a parameter of scale and the parameter ϑ_2 represents the change of the reliability of the software, resulting from the correction after its i -th failure. In particular, when

$$\lambda_i(\vartheta_2) = \exp\{-(i - 1)\vartheta_2\}$$

(cf. Gaudoin and Soler (1992)), then $\vartheta_2 = 0$ if the reliability is stable and $\vartheta_2 > 0$ if there is a growth of reliability. Here is proposed a rather complicated expression for the distribution function of the maximum likelihood estimator (MLE). In Pázman [8] the probability density of the parameter estimators is considered.

The other one interesting problem is a test on proportion of the exponential distribution which can be used for constructing a statistical quality control sampling plan (c.f. Rublík, [9]).

The last but not least example is GLM with exponential distribution (c.f. McCullagh and Nelder, [3]).

Such set-ups motivate interesting statistical problems. In the present paper we put stress on the testing problem and consider the likelihood ratio (LR) test. We derive exact distribution function and the density of the LR test of the canonical parameter. The table of critical constants is also given and we compare the exact distribution of the LR with the asymptotic one.

2 The I-divergence. In this section we consider some structural properties of the model to be used later. Model (1) is a regular exponential family which is a subfamily of the family

$$\{h(y|\gamma) = \prod_{i=1}^N \gamma_i e^{-\gamma_i y_i}\}_{\gamma \in \Gamma}. \tag{2}$$

To relate this to the general theory of exponential families we can write densities (2) in the form

$$\{\exp(-\psi(y) + t(y)^T \gamma - \kappa(\gamma))\}_{\gamma \in \Gamma} \tag{3}$$

where

$$\psi(y) = 0$$

$$t_i(y) = -y_i; \quad i = 1, \dots, N$$

$$\kappa(\gamma) = -\sum_{i=1}^N \ln(\gamma_i)$$

$$\Gamma = \{(\gamma_1, \dots, \gamma_N), \gamma_i > 0, \quad i = 1, \dots, N\}.$$

The family (1) can be considered as a particular case of a nonlinear family with densities

$$\{\exp(-\psi(y) + t^T(y)\gamma(\vartheta) - \kappa(\gamma(\vartheta)))\}_{\vartheta \in \Theta}$$

which is "covered" by the family (3) in the sense that it is a subfamily of the family (3), and

$$\{t(y) : y \in Y\} \subseteq \{\mathbb{E}_\gamma\{t(y)\} : \gamma \in \Gamma\} \text{ (c.f. Pázman, [7], chpt.9).} \quad (4)$$

Since in regular exponential families we have the relation (c.f. Barndorf-Nielsen, [1])

$$\mathbb{E}_\gamma\{t(y)\} = \frac{\partial \kappa(\gamma)}{\partial \gamma},$$

by the "covering" property (4) we can associate to each value of $t(y)$ a value of γ , denoted $\hat{\gamma}_y$, which satisfies

$$\frac{\partial \kappa(\gamma)}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\hat{\gamma}_y} = t(y). \quad (5)$$

From (5) it follows that $\hat{\gamma}_y$ is the MLE of the canonical parameter γ in the covering family.

The *Kullback-Leibler* divergence

$$I(\gamma^*, \gamma) = \mathbb{E}_{\gamma^*} \left\{ \frac{h(y|\gamma^*)}{h(y|\gamma)} \right\}; \quad \gamma, \gamma^* \in \Gamma$$

in the model (2) is equal to

$$I(\gamma^*, \gamma) = -N + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\gamma_i}{\gamma_i^*} - \ln \left(\frac{\gamma_i}{\gamma_i^*} \right) \right\}.$$

By the use of (5) we can define the *I*-divergence of the observed vector y

$$I_N(y, \gamma) := I(\hat{\gamma}_y, \gamma) = -N + \sum_{i=1}^N \{y_i \gamma_i - \ln(y_i \gamma_i)\}.$$

For $v > 0$ let us introduce a function

$$G_v(x) = \begin{cases} x - v \ln(x), & \text{for } x > 0, \\ 0, & \text{for } x \leq 0. \end{cases}$$

Further $G := G_1$ is used. This allows to write

$$I_N(y, \gamma) = \sum_{i=1}^N \{G(\gamma_i y_i) - G(1)\}. \quad (6)$$

3 The geometric approach to the *I*-divergence.

In this Section we give our main results, Theorems 3.2.1. and 3.2.2..

Let us introduce notation $y \sim \exp(\gamma_1, \dots, \gamma_N)$, $\gamma \in \Gamma$ when $y = (y_1, \dots, y_N)$ is distributed according to the density $h(y|\gamma)$ (see (2)).

3.1 The case of one observation.

Let's have $y \sim \exp(\bar{\gamma})$. Then the I -divergence I_1 has the form $I_1(y, \gamma) = -1 + G(\gamma y)$ (see (6)). The function $G : (0, +\infty) \rightarrow \langle 1, +\infty \rangle$ has as an inverse multifunction $G^{-1} : \langle 1, +\infty \rangle \rightarrow 2^{\mathbb{R}}$ with two differentiable selectors $\min G^{-1}$ and $\max G^{-1}$. In the Appendix A is given that

$$\min G^{-1}(u) = -\mathcal{LW}(0, -e^{-u}), \quad u > 1$$

and

$$\max G^{-1}(u) = -\mathcal{LW}(-1, -e^{-u}), \quad u > 1$$

where $\mathcal{LW}(k, w)$, $k \in \mathbb{Z}$, $w \in \mathbb{C}$ is the value of the k -th branch of the Lambert-W function at the point w (see Appendix A).

Let $F(x)$ is the cummulative distribution function (c.d.f.) of $I_1(y, \gamma)$. Then $F(x) = 0$ for $x \leq 0$. For $x > 0$ we have

$$\begin{aligned} F(x) &= P\{G(\gamma y) < 1 + x\} = P\{\min G^{-1}(1 + x) < \gamma y < \max G^{-1}(1 + x)\} = \\ &= P\left\{-\frac{\bar{\gamma}}{\gamma}\mathcal{LW}(0, -e^{-1-x}) < \bar{\gamma}y < -\frac{\bar{\gamma}}{\gamma}\mathcal{LW}(-1, -e^{-1-x})\right\} = \\ &= e^{\frac{\bar{\gamma}}{\gamma}\mathcal{LW}(0, -e^{-1-x})} - e^{\frac{\bar{\gamma}}{\gamma}\mathcal{LW}(-1, -e^{-1-x})}. \end{aligned}$$

To obtain the density $f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$ we follow the rules for derivatives explained in Appendix A. Thus we have proved the following proposition.

Proposition.

Let $y \sim \exp(\bar{\gamma})$. Then the c.d.f. of $I_1(y, \gamma)$ has the form

$$F(x) = \begin{cases} e^{\frac{\bar{\gamma}}{\gamma}\mathcal{LW}(0, -e^{-1-x})} - e^{\frac{\bar{\gamma}}{\gamma}\mathcal{LW}(-1, -e^{-1-x})}, & \text{for } x > 0, \\ 0, & \text{for } x \leq 0, \end{cases}$$

and the density of $I_1(y, \gamma)$ has the form

$$f(x) = \begin{cases} q(1, x, \frac{\bar{\gamma}}{\gamma}) - q(0, x, \frac{\bar{\gamma}}{\gamma}), & \text{for } x > 0, \\ 0, & \text{for } x \leq 0. \end{cases}$$

Here

$$q(k, r, s) = \frac{s\mathcal{LW}(-k, -e^{-1-r})}{1 + \mathcal{LW}(-k, -e^{-1-r})} e^{s\mathcal{LW}(-k, -e^{-1-r})} \text{ for } k \in \mathbb{Z}; \quad r, s > 0.$$

3.2 The case of N observations.

Let us consider the $(N - 1)$ -dimensional Euclidean simplex

$$\sigma_{N-1} = \{u \in \mathbb{R}^{N-1} : 0 < u_1 < 1, \dots, 0 < u_{N-1} < 1 - u_1 - \dots - u_{N-2}\}$$

and the positive cone $\mathcal{E}_N = \{x \in \mathbb{R}^N, x_1 > 0, \dots, x_N > 0\}$ of the N -dimensional Euclidean space \mathbb{E}^N . It holds $\mathcal{E}_N = \sigma_{N-1} \times \mathcal{E}_1$. For $\bar{\gamma} \in \Gamma$ we define the map $\nu_{\bar{\gamma}} : \mathcal{E}_1 \times \sigma_{N-1} \rightarrow \mathcal{E}_N$

$$y_i = \begin{cases} \frac{r}{\bar{\gamma}_i} u_i, & \text{for } 1 \leq i \leq N - 1, \\ \frac{r}{\bar{\gamma}_N} (1 - u_1 - u_2 - \dots - u_{N-1}), & \text{for } i = N. \end{cases} \tag{7}$$

This map is regular and $dy = \frac{r^{N-1}}{\bar{\gamma}_1 \dots \bar{\gamma}_N} dr du$.

Theorem 3.2.1.

Let's have $y \sim \exp(\bar{\gamma}_1, \dots, \bar{\gamma}_N)$ and $\delta > 0$.

Then $I_N(y, \delta \bar{\gamma})$ is the sum of two independent variables R_N and S_N where

$$R_N = G_N(\delta r) - G_N(N) \tag{8}$$

and

$$S_N = -\ln\{N^N u_1 \dots u_{N-1} (1 - u_1 - \dots - u_{N-1})\}. \tag{9}$$

Here r is $\Gamma(N, 1)$ -distributed and (u_1, \dots, u_{N-1}) is uniformly distributed on the simplex σ_{N-1} .

Proof.

Into the characteristic function ψ of the variable $I_N(y, \delta \bar{\gamma})$ we introduce the coordinates (r, u_1, \dots, u_{N-1}) corresponding to the map $\nu_{\bar{\gamma}}$ (see (7)).

After the substitution we obtain $\psi(\mu) = \psi_1(\mu)\psi_2(\mu)$ where

$$\psi_1(\mu) = \int_0^{+\infty} \exp\{i \mu \{G_N(\delta r) - G_N(N)\}\} \frac{r^{N-1}}{\Gamma(N)} e^{-r} dr$$

and

$$\psi_2(\mu) = \int_{\sigma_{N-1}} \exp\{-i \mu \ln\{N^N u_1 \dots u_{N-1} (1 - u_1 - \dots - u_{N-1})\}\} du$$

are the characteristic functions of the random variables R_N and S_N from the Theorem 3.2.1.. This completes the proof.

□

Theorem 3.2.2.

The c.d.f. of the variable R_N from the Theorem 3.2.1. has the form

$$F_N(\rho) = \begin{cases} \mathcal{F}_N(-N\delta^{-1} \mathcal{LW}(-1, -e^{-\frac{\rho+N}{N}})) - \mathcal{F}_N(-N\delta^{-1} \mathcal{LW}(-e^{-\frac{\rho+N}{N}})), & \rho > 0, \\ 0, & \rho \leq 0 \end{cases}$$

and the density of the R_N has the form

$$f_N(\rho) = \begin{cases} h(N, 1, \rho, \delta^{-1}) - h(N, 0, \rho, \delta^{-1}), & \text{for } \rho > 0, \\ 0, & \text{for } \rho \leq 0. \end{cases}$$

Here $\mathcal{F}_N(x)$ is the c.d.f. of the $\Gamma(N, 1)$ -distribution and for $N \in \mathbb{N}$, $k \in \mathbb{Z}$; $r, s > 0$ we define

$$h(N, k, r, s) = \frac{(-N)^{N-1} s^N \{\mathcal{LW}(-k, -e^{-\frac{r+N}{N}})\}^N}{\Gamma(N) (1 + \mathcal{LW}(-k, -e^{-\frac{r+N}{N}}))} e^{Ns\mathcal{LW}(-k, e^{-\frac{r+N}{N}})}.$$

Proof. For $\rho \leq 0$ we obtain $F_N(\rho) = 0$. Let us have $\rho > 0$. Then

$$\begin{aligned} F_N(\rho) &= P\{-N\delta^{-1}\mathcal{LW}(-e^{-\frac{\rho+N}{N}}) < r < -N\delta^{-1}\mathcal{LW}(-1, -e^{-\frac{\rho+N}{N}})\} = \\ &= \mathcal{F}_N(-N\delta^{-1}\mathcal{LW}(-1, -e^{-\frac{\rho+N}{N}})) - \mathcal{F}_N(-N\delta^{-1}\mathcal{LW}(-e^{-\frac{\rho+N}{N}})). \end{aligned}$$

The density of the R_N follows after the differentiation of $F_N(\rho)$ (see Appendix A).

□

3.3 The comparison to the normal model.

The components R_N and S_N (see Theorem 3.2.1.) are independent variables (it means that our decomposition is also deconvolution), R_N is the "radial" component depending only on the "radial" coordinate r and S_N is the symplectic component depending only on the symplectic coordinates (u_1, \dots, u_{N-1}) .

There is an analogy between the radial component of the I -divergence in the normal linear regression and in the model (1). To see this we note that in the normal regression with $y \sim \mathcal{N}_N(\vartheta, \sigma^2 I)$ we have

$$I_N(t(y), \vartheta) = \frac{1}{2\sigma^2} \|y - \vartheta\|^2$$

where $\vartheta \in \Theta$ is the unknown parameter of the interest and σ is a known variance parameter. Here we must use the spherical coordinates $(r(\vartheta), \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1})$ of $\mathbb{E}^N - \eta(\vartheta)$ and the decomposition contains only the radial component

$$I_N(t(y), \vartheta) = R_N^*(r, \vartheta) = \frac{1}{2\sigma^2} r(\vartheta)^2.$$

The LR test of the hypothesis $H_0 : \vartheta = \vartheta_0$ versus $H_1 : \vartheta \neq \vartheta_0$ based on the statistics $-2 \ln \lambda = 2R_N^*(r, \vartheta_0)$ has χ_N^2 -distribution under the null hypothesis.

To make the comparison to the exponential model let us consider the LR test of the hypothesis $H_0 : \gamma = \gamma_0$ versus $H_1 : \gamma \neq \gamma_0$ in the simple GLM $y \sim \exp(\gamma, \dots, \gamma)$ (Poisson process, see Section 4). The LR statistics $-2 \ln \lambda = 2R_N(r, \gamma_0)$ is asymptotically χ_1^2 -distributed under the null hypothesis (see Wilks, [10]).

4 Illustrative example.

In this Section we show some applications of our results to the LR test of the parameter of interest in the model (1).

We consider a statistical model with N independent observations y_1, \dots, y_N which are distributed according to the exponential density

$$f(y_i|\gamma) = \begin{cases} \gamma \exp(-\gamma y_i), & \text{for } y_i > 0, \\ 0, & \text{for } y_i \leq 0. \end{cases} \quad (10)$$

Here γ is an unknown scale parameter (intensity) and the parameter space $\Gamma = \mathcal{E}_1$ is the open subset of \mathbb{R} . This model is a special case of the model (1).

4.1. The exact LR test of the intensity.

We consider the test

$$H_0 : \gamma = \gamma_0 \text{ versus } H_1 : \gamma \neq \gamma_0 \quad (11)$$

in the model (10).

Theorem 4.1.1.

The test statistics $-\ln \lambda$ of the LR test to the hypothesis (11) has the form

$$\tau_N(y) = G_N(\gamma_0) \sum_{i=1}^N y_i - G_N(N) \quad (12)$$

and $\tau_N = R_N$, where R_N is the "radial" component of the $I_N(y, \gamma_0)$ (see (8)).

Under the null hypothesis the c.d.f. and the density of τ_N is given in the Theorem 3.2.2. where we take $\delta = 1$ and the Wilks statistics $-2 \ln \lambda$ has the c.d.f. of the form

$$F_N(\tau) = \begin{cases} \mathcal{F}_N(-N\mathcal{LW}(-1, -e^{-1-\frac{\tau}{2N}})) - \mathcal{F}_N(-N\mathcal{LW}(-e^{-1-\frac{\tau}{2N}})), & \tau > 0, \\ 0, & \tau \leq 0, \end{cases} \quad (13)$$

and the density of the form

$$f_N(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{2} \{h(N, 1, \frac{\tau}{2}, 1) - h(N, 0, \frac{\tau}{2}, 1)\}, & \text{for } \tau > 0, \\ 0, & \text{for } \tau \leq 0. \end{cases}$$

The proof is presented in Appendix B.

Table 3 contains the critical constants $c_{\alpha, N}$ of the LR test $-2 \ln \lambda$ on the level of significance α in small dimensions N obtained from its exact distribution (13).

Table 3. Critical constants $c_{\alpha, N}$.

$\alpha \setminus N$	1	2	3	4	5
0.005	8.852997810	8.460579550	8.287166100	8.192107640	8.132601599
0.01	7.498403700	7.136930670	6.983699006	6.901147440	6.849915290
0.02	6.15478803	5.831756370	5.700796220	5.631435842	5.588746670
0.05	4.407670803	4.149077148	4.050520530	3.999436000	3.968318015

4.2 Comparison with the χ^2 -asymptotics.

The MLE $\hat{\gamma}$ of the parameter γ in the model (10) is consistent and $-2 \ln \lambda$ has asymptotically χ_1^2 -distribution (c.f. Wilks, [10]). In this Section we present how the exact distribution of the LR test differs from the asymptotic one.

Let us present the Table 4 of the critical constants k_α obtained from the asymptotic χ_1^2 -distribution of the $-2 \ln \lambda$ on the level of significance 0.005, 0.01, 0.02 and 0.05.

Table 4. Critical constants k_α .

α	k_α
0.005	7.879438577
0.01	6.634896601
0.02	5.411894431
0.05	3.841458821

The following Table 5 shows that the exact levels of significance $\alpha_{e,N}$ of the critical constants k_α are higher in small dimensions N than the asymptotic ones.

Table 5. The exact levels of significance $\alpha_{e,N}$.

$\alpha \setminus N$	1	2	3	4	5
0.005	0.008224735	0.006771825	0.006204483	0.005908783	0.005728607
0.01	0.015599286	0.013037809	0.012058871	0.011552053	0.011244013
0.02	0.029448482	0.025065314	0.023424550	0.022579936	0.022067611
0.05	0.067701923	0.059361294	0.056314364	0.054754992	0.053810812

$\alpha \setminus N$	10	20	30	40	50
0.005	0.005364607	0.005182040	0.005121267	0.005090910	0.005072708
0.01	0.010622626	0.010311006	0.010207222	0.010155366	0.010124268
0.02	0.021035190	0.00517344	0.020344780	0.020258532	0.020206799
0.05	0.051909321	0.050954881	0.050636560	0.050477398	0.050381907

Appendix A. The Lambert-W function satisfies

$$\mathcal{LW}(z)e^{\mathcal{LW}(z)} = z.$$

As the equation $y \exp(y) = z$ has an infinite number of solutions y_k for each (non-zero) value of $z \in \mathbb{C}$, Lambert-W has an infinite number of branches. Exactly one of these branches is analytic at 0. Usually this branch is referred to as the principal branch of Lambert-W, and is denoted by $\mathcal{LW}(z)$ or $\mathcal{LW}(0, z)$. The other branches $\mathcal{LW}(k, z)$, $k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ all have a branch point at 0. The principal branch and the pair of branches $\mathcal{LW}(-1, z)$ and $\mathcal{LW}(1, z)$ share an order 2 branch point at point $-\exp(-1)$. The branch cut dividing these branches is the subset of the real line from $-\infty$ to $-\exp(-1)$, and the values of the branches of Lambert-W on this branch cut are assigned using the rule of counter-clockwise continuity around the branch point. This means that $\mathcal{LW}(z)$ is real-valued for $z \in (-\exp(-1), \infty)$ and similarly, the branch corresponding to -1 , $\mathcal{LW}(-1, z)$, is real-valued on the interval $(-\exp(-1), 0)$. For all the branches other than the principal branch, the branch cut dividing them is the negative real axis. The branches are numbered up and down from the real axis (this is very similar to the way the branches of the logarithm are indexed by the multiple of $2\pi i$ which must be subtracted from the imaginary part to recover the principal branch).

The asymptotic behavior of the Lambert-W at complex infinity and at 0 (for the non-principal branches) is given by

$$\mathcal{LW}(k, z) \sim \ln(k, z) - \ln(\ln(k, z)) + \sum_{m,n=0}^{+\infty} \frac{\{c(m, n) \ln(\ln(k, z))\}^{m+1}}{\ln(k, z)^{m+n+1}},$$

where $\ln z$ denotes the principal branch of the logarithm,

$$\ln(k, z) = \ln z + 2k\pi i$$

and the $c(m, n)$ are constants independent of k . The expansion for $\mathcal{LW}(-1, z)$ is not valid for $z \rightarrow 0$ along the negative real axis (the effect of the branch point at $-\exp(-1)$ must be considered), but holds otherwise.

Without the proof (which is rather technical) we present the following Lemma:

Lemma.

Let $v > 0$. Then for $u > G_v(v)$ we have the following expressions in terms of Lambert-W function:

$$\min G_v^{-1}(u) = -v\mathcal{LW}(0, -\frac{e^{-\frac{u}{v}}}{v})$$

and

$$\max G_v^{-1}(u) = -v\mathcal{LW}(-1, -\frac{e^{-\frac{u}{v}}}{v}).$$

Here $\min G_v^{-1}$ and $\max G_v^{-1}$ are selectors of the multifunction $G_v^{-1} : \langle G_v(v), +\infty \rangle \rightarrow 2^{\mathbb{R}}$. Further let us define $f_k(x) = \mathcal{LW}(-k, -e^{-x})$, $x > 1$, $k = 0, 1$.

$$\text{Then } f_k \in C^1((1, +\infty), \mathbb{R}) \text{ and } f'_k(x) = -\frac{f_k(x)}{1 + f_k(x)} \text{ holds.}$$

Previous Lemma shows that all densities and c.d. functions in this paper are real-valued functions and gives the formula for computing of derivatives.

The Lambert-W function has a good implementation in mathematical software such as Matlab 5.3 or Maple V Release 5.1. For more information see Corless [2].

Appendix B.

Proof of the Theorem 4.1.1. The LR to the hypothesis (11) is

$$\lambda(y) = \frac{f(y|\gamma_0)}{f(y|\hat{\gamma})} \tag{14}$$

where $f(y|\gamma) = \gamma^N \exp\{-\gamma \sum_{i=1}^N y_i\}$ and $\hat{\gamma} = N\{\sum_{i=1}^N y_i\}^{-1}$ is the MLE of the parameter γ . Putting it into the (14) we obtain the formula (12). Application of Theorem 3.2.1. completes the proof.

□

REFERENCES

1. Barndorf-Nielsen OE, *Information and Exponential Families In Statistical Theory*, John Wiley & Sons, Ltd., New York, part 3, 1978.
2. Corless RM, Gonnet GH, Hare DEG, Jeffrey DJ, Knuth DE, *On The Lambert W Function*, *Maple Share Library*.
3. McCullagh P, Nelder JA, *Generalized Linear Models, (285-322)*, CHAPMAN & HALL, 1989.
4. Gaudoin O, Soler JL, *Statistical Analysis of the Geometric De-Eutrophication Software Reliability Model*, IEEE Transactions on Reliability **41** (1992 Dec).
5. Kaufmann A, Cruon R, *Queueing Systems*, Mir, Moscow, 1965. (Russian)
6. Kleinrock L, *Queueing Systems*, vol. 1:Theory, John Wiley & Sons, Toronto, 1975.
7. Pázman A, *Nonlinear statistical Models.*, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, chapters 9.1, 9.2, 1993.
8. Pázman A, *The Density of the Parameter Estimators when the Observations are Distributed Exponentially*, *Metrika* **44** (1996), Physica-Verlag, Heidelberg, 9–26.
9. Rublík F, *Some tests on exponential populations*, *Tatra Mountains Math. Publ.* **7** (1996), 229–235.
10. Wilks SS, *Mathematical Statistics, (416-420)*, Nauka, Moscow, 1967. (Russian)

DEPARTMENT OF PROBABILITY AND STATISTICS, FACULTY OF MATHEMATICS, PHYSICS AND INFORMATICS, COMENIUS UNIVERSITY BRATISLAVA, MLYNSKA DOLINA, SK – 842 15 BRATISLAVA, SLOVAKIA
E-MAIL: Stehlik@fmph.uniba.sk

KERNEL FRAME SMOOTHING OPERATORS

VÍTĚZSLAV VESELÝ

ABSTRACT. Basics of frame expansions in separable Hilbert spaces are explained in context with the theory of pseudoinverse operators. A new geometric approach is outlined connecting both areas. An iterative frame-based procedure is suggested which finds, to a given function f , a finite frame or Riesz basis for its expansion which is ε -optimal in a certain sense. In particular a new type of kernel smoothing operator based on dual frame expansions is introduced with which the above procedure allows us to find easily not only ε -optimal bandwidths (scales) as with common kernel smoothing, but also ε -optimal shifts.

Изложены основы неортогональных разложений типа фрейм (frame) в сепарабельных гильбертовых пространствах в соотношении к теории псевдообратных операторов. Показан новый геометрический подход, который связывает эти области. Предлагаем итеративную процедуру на базе этих разложений, которая находит к данной функции f конечный фрейм или базис Риса для её разложения, которое есть оптимальное в определённом смысле. В специальном случае введён новый тип сглаживающего оператора типа ядра, который основан на разложении по дуальному фрейму и позволяет с помощью предыдущей процедуры легко найти не только оптимальную ширину пояса (scale) подобно как в обыкновенном случае сглаживания при помощи ядер, но тоже оптимальный сдвиг.

1. INTRODUCTION

The origins of the frame theory date back to the work of Duffin and Schaeffer [5], more details can be found in [16], too.

Section 2 contains symbol list along with some preliminaries of functional analysis (see e.g. [4, 11, 15]) inclusively pseudoinverse operators [7].

Basics of frame expansions in separable Hilbert spaces are explained in context with the theory of pseudoinverse operators (sections 3,4,5). Most of what is collected here is scattered around specialized literature (mostly related to wavelets), for example [1, 2, 3, 12], to mention a few. In addition, a new geometric approach is suggested by the author for both areas leading to another (geometric) definition of a frame equivalent with the widely used analytic descriptions, and making evident that frames are nothing but synonyms for bounded operators with closed range space — exactly those operators for which bounded pseudoinverse exists [7]. From the statistical point of view frame may play the role of a set of regressors (even countable) for a generalized regression model the solution of which belongs to an abstract H-space, typically a functional space, or a space of random variables, or even random processes [8].

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary: 47B34, 65D15, 65F20 Secondary: 42C15, 42C30.

Key words and phrases. Functional approximation, kernel operators, frame and wavelet expansions, pseudoinverse operators.

Research partially supported by Czech Ministry of Education grant MSM 143100001.

We suggest an iterative frame-based procedure in section 6 which finds, to a given function f , a finite frame spanning a finite-dimensional H-subspace $H_\varepsilon(f)$ (depending on f) of a fixed (even infinite-dimensional) space $H \subseteq H_2$ giving nearly exact (ε -optimal) least-squares approximation $\widehat{f}_\varepsilon \in H_\varepsilon$ of \widehat{f} in the sense that $\|\widehat{f} - \widehat{f}_\varepsilon\| \leq \varepsilon$, where $\widehat{f} \in H$ is the exact least-squares approximation (orthogonal projection) of f in the space H .

New type of kernel smoothing operator using dual frame expansions is introduced in section 7 allowing us, applying the above procedure, to find easily not only ε -optimal bandwidths (scales) as with the common kernel smoothing [6, 9, 10], but also ε -optimal shifts.

2. NOTATION AND THEORETICAL BACKGROUND OF FUNCTIONAL ANALYSIS

2.1. Notation and preliminaries.

- $\mathbb{N}, \mathbb{Z}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$... natural numbers, integers, real and complex numbers, respectively.
- $\mathbb{Z}_N := \{0, 1, \dots, N-1\}$... residuals modulo $N \in \mathbb{N}$.
- $|M|$... cardinality of a set M .
- J, J_1, J_2, \dots ... indexing sets; $J, J_i \subseteq \mathbb{Z}$, usually \mathbb{N}, \mathbb{Z} or \mathbb{Z}_N .
- $X, X_1, X_2 \dots$... complex normed linear spaces (NL-spaces) with norm $\|\cdot\|$ or inner product spaces (IP-spaces) with the inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle$.
- $B, B_1, B_2 \dots$... complete NL-spaces, alias Banach spaces (B-spaces).
- $H, H_1, H_2 \dots$... complete separable IP-spaces, alias Hilbert spaces (H-spaces).
- $\mathcal{L}(M), M \subseteq X$... linear subspace (L-subspace) in X spanned by M .
- $\overline{M}, M \subseteq X$... closure of a set M in X
- $\overline{\mathcal{L}(M)}, M \subseteq X$... closed linear subspace in X spanned by M ; X complete $\Rightarrow \overline{\mathcal{L}(M)}$ is complete; $X_1 \subseteq X$ complete $\Rightarrow X_1$ is closed.
- $x_1 \perp x_2; x_1, x_2 \in X$... x_1 is orthogonal to x_2 ($\langle x_1, x_2 \rangle = 0$).
- $x \perp M; \emptyset \neq M \subseteq X$... x is orthogonal to M ($x \perp y \forall y \in M$).
- $M^\perp; \emptyset \neq M \subseteq X$... orthogonal complement of M in X : $M^\perp := \{x \in X \mid x \perp M\}$, M^\perp is a closed linear subspace in X , i.e. B- or H-subspace and $M^\perp = \mathcal{L}(M)^\perp = \overline{\mathcal{L}(M)}^\perp$; moreover it holds $M^{\perp\perp} = \overline{\mathcal{L}(M)}$.
- E, E_1, E_2, \dots ... orthonormal basis (ONB) in H, H_1, H_2, \dots , respectively: $E := \{e_n\}_{n \in J}$, $E_i := \{e_n\}_{n \in J_i}$, $e_n \perp e_m$ for $m \neq n$, $\|e_n\| = 1$, $\overline{\mathcal{L}(E)} = H$, $\overline{\mathcal{L}(E_i)} = H_i$, $i = 1, 2, \dots$
- $\dim H = |E| = |J|$... dimension of H ;
separability of $H \Rightarrow \dim H \leq \aleph_0$, we write also $\dim H = \infty$ if $\dim H = \aleph_0$.
- $L^2(a, b), L^2 := L^2(-\infty, \infty)$... the H-space of all functions measurable and absolutely square integrable (in the Lebesgue sense) on the interval $(a, b) \subseteq \mathbb{R}$, $-\infty \leq a < b \leq \infty$; $\dim L^2(a, b) = \infty$.
- $\ell^2(J), \ell^2 := \ell^2(\mathbb{Z})$... the H-space of all J -indexed absolutely summable sequences: $\{\xi_n\}_{n \in J}$, $\sum_{n \in J} |\xi_n|^2 < \infty$, $\dim \ell^2(J) = |J|$.
- $\mathcal{E} := \{\{\delta_{m,n}\}_{m \in J}\}_{n \in J}$... natural orthonormal basis in $\ell^2(J)$.
- $\mathcal{L}(X_1, X_2)$... complex vector space of all linear operators $T : X_1 \rightarrow X_2$.
- $\mathcal{D}(T) := X_1, T \in \mathcal{L}(X_1, X_2)$... domain of operator T .
- $\mathcal{N}(T) \subseteq X_1, T \in \mathcal{L}(X_1, X_2)$... null space of operator T : $\mathcal{N}(T) := \{x \in \mathcal{D}(T) \mid Tx = 0\}$.
- $\mathcal{R}(T) \subseteq X_2, T \in \mathcal{L}(X_1, X_2)$... range space of operator T : $\mathcal{R}(T) := \{y \in X_2 \mid y = Tx \text{ for some } x \in \mathcal{D}(T)\}$.

- $\mathcal{B}(X_1, X_2) \subseteq \mathcal{L}(X_1, X_2)$... complex NL-space of all bounded (continuous) linear operators $T : X_1 \rightarrow X_2$, $\|Tx\| \leq \|T\|\|x\| \quad \forall x \in X_1$; $\mathcal{B}(X, B)$ is a B-space — consequently $\mathcal{B}(H_1, H_2)$ is a B-space as well.
- $\mathcal{LI}(X_1, X_2) \subseteq \mathcal{L}(X_1, X_2)$... subset of all linear isomorphisms $T : X_1 \rightarrow X_2$ (bijective linear operators); we write $X_1 \stackrel{LI}{\simeq} X_2$ if $\mathcal{LI}(X_1, X_2) \neq \emptyset$.
- $\mathcal{TLI}(X_1, X_2) \subseteq \mathcal{B}(X_1, X_2)$... subset of all topological linear isomorphisms $T : X_1 \rightarrow X_2$: $T \in \mathcal{TLI}(X_1, X_2) \Leftrightarrow T \in \mathcal{LI}(X_1, X_2) \cap \mathcal{B}(X_1, X_2) \ \& \ T^{-1} \in \mathcal{LI}(X_2, X_1) \cap \mathcal{B}(X_2, X_1)$; we write $X_1 \stackrel{TLI}{\simeq} X_2$ if $\mathcal{TLI}(X_1, X_2) \neq \emptyset$.
- $\mathcal{UI}(H_1, H_2) \subseteq \mathcal{TLI}(H_1, H_2)$... subset of all unitary (=surjective isometric) operators $T : H_1 \rightarrow H_2$, it holds:
 $T \in \mathcal{UI}(H_1, H_2) \Leftrightarrow H_2 = \mathcal{R}(T) \ \& \ \|Tx\| = \|x\| \ \forall x \in H_1$ (in particular $\|T\| = 1$) $\Leftrightarrow H_2 = \mathcal{R}(T) \ \& \ \langle Tx, Ty \rangle = \langle x, y \rangle \ \forall x, y \in H_1$; we write $H_1 \stackrel{UI}{\simeq} H_2$ if $\mathcal{UI}(H_1, H_2) \neq \emptyset$.
- I, I_X ... identity operator, $\mathcal{D}(I) = X$; clearly $I_X \in \mathcal{TLI}(X, X)$, $\|I\| = 1$ and even $I_H \in \mathcal{UI}(H, H)$.
- T^* ... adjoint operator of $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2)$: $\langle Tx_1, x_2 \rangle = \langle x_1, T^*x_2 \rangle \ \forall x_1 \in H_1, x_2 \in H_2$; it holds:
 - (a) $T^* \in \mathcal{B}(H_2, H_1)$, $\|T\| = \|T^*\|$ and $\|TT^*\| = \|T^*T\| = \|T\|^2 = \|T^*\|^2$;
 - (b) $T \in \mathcal{TLI}(H_1, H_2) \Rightarrow T^* \in \mathcal{TLI}(H_2, H_1)$ and $(T^*)^{-1} = (T^{-1})^*$
 - (c) $T \in \mathcal{UI}(H_1, H_2) \Leftrightarrow T \in \mathcal{TLI}(H_1, H_2) \ \& \ T^* = T^{-1}$.
- $T = T^*$, $T \in \mathcal{B}(H, H)$... self-adjoint operator; clearly I_H is self-adjoint.
- $T \geq 0$ ($T > 0$), $T \in \mathcal{B}(H, H)$... (strictly) positive operator: $\langle Tx, x \rangle \geq 0 \ \forall x \in H$ ($\langle Tx, x \rangle > 0 \ \forall 0 \neq x \in H$); it holds:
 - (a) $T \geq 0$ or $T > 0 \Rightarrow T = T^*$,
 - (b) $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2) \Rightarrow T^*T, TT^* \geq 0$.
- $P, P \in \mathcal{B}(H, H)$... orthogonal projection operator, alias self-adjoint idempotent bounded linear operator ($P = P^*$ and $P^2 = P$); $H_1 := \mathcal{R}(P)$ is closed, i.e. H-subspace in H ; that is why we write also P_{H_1} instead of P .
- $\hat{x} := P_{H_1}x$, $P_{H_1} \in \mathcal{B}(H, H)$... the result of orthogonal projection of any $x \in H$ onto the subspace $H_1 \subseteq H$.

2.2. Basic definitions and theorems for reference.

Theorem 2.1. *Given $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2)$ then the following holds:*

- (1) $\mathcal{N}(T) = \mathcal{R}(T^*)^\perp = \overline{\mathcal{R}(T^*)}^\perp$, $\mathcal{N}(T)^\perp = \overline{\mathcal{R}(T^*)}$
- (2) $\mathcal{N}(T^*) = \mathcal{R}(T)^\perp = \overline{\mathcal{R}(T)}^\perp$, $\mathcal{N}(T^*)^\perp = \overline{\mathcal{R}(T)}$
- (3) $H_1 = \overline{\mathcal{R}(T^*)} \oplus \mathcal{N}(T)$, $H_2 = \overline{\mathcal{R}(T)} \oplus \mathcal{N}(T^*)$
- (4) If $T = T^*$ then $\mathcal{N}(T) = \mathcal{R}(T)^\perp = \overline{\mathcal{R}(T)}^\perp$ and $\overline{\mathcal{R}(T)} = \mathcal{N}(T)^\perp$
- (5) $\mathcal{N}(T^*T) = \mathcal{N}(T)$, $\mathcal{N}(TT^*) = \mathcal{N}(T^*)$
- (6) $\overline{\mathcal{R}(T^*T)} = \overline{\mathcal{R}(T^*)}$, $\overline{\mathcal{R}(TT^*)} = \overline{\mathcal{R}(T)}$

Definition 2.2. For $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2)$ we introduce restricted operator $\check{T} := T|_{\overline{\mathcal{R}(T^*)}} \in \mathcal{B}(\overline{\mathcal{R}(T^*)}, \overline{\mathcal{R}(T)})$, i.e. $\check{T}x := Tx$ for all $x \in \overline{\mathcal{R}(T^*)}$.

Theorem 2.3. *The restricted operator and its adjoint satisfy:*

- (1) $(T^*)^\check{\ } = \check{T}^*$
- (2) $\mathcal{R}(\check{T}) = \mathcal{R}(T)$, $\mathcal{R}(\check{T}^*) = \mathcal{R}(T^*)$
- (3) $\|\check{T}\| = \|T\| = \|\check{T}^*\| = \|T^*\|$

Proof. Put $H := \overline{\mathcal{R}(T)}$, $H^* := \overline{\mathcal{R}(T^*)}$, then by 2.1(3) $H_1 = H^* \oplus \mathcal{N}(T)$ and $H_2 = H \oplus \mathcal{N}(T^*)$.

- (1) $x \in H^*$, $y \in H$ arbitrary $\Rightarrow \langle \check{T}x, y \rangle = \langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle = \langle x, (T^*)y \rangle \Rightarrow (T^*)y = \check{T}x$.
- (2) $f = \hat{f} + f^\perp \in H_1$, $\hat{f} = P_{H^*}f \in H^*$, $f^\perp \in H^{*\perp} = \mathcal{N}(T) \Rightarrow Tf = T\hat{f} + Tf^\perp = \check{T}\hat{f}$. Thus we have got $\mathcal{R}(T) = \mathcal{R}(\check{T})$. Similarly we prove $\mathcal{R}(\check{T}^*) = \mathcal{R}(T^*)$.
- (3) As $\|T\| = \|T^*\|$ and $\|\check{T}\| = \|\check{T}^*\|$, it is sufficient to prove $\|T\| = \|\check{T}\|$. For any $f \in H^*$ we have $\|\check{T}f\| = \|Tf\| \leq \|T\|\|f\| \Rightarrow \|\check{T}\| \leq \|T\|$. On the other hand, for any $f \in H_1$: $\|Tf\|^2 \stackrel{(2)}{=} \|\check{T}\hat{f}\|^2 \leq \|\check{T}\|^2\|\hat{f}\|^2 \leq \|\check{T}\|^2(\|\hat{f}\|^2 + \|f^\perp\|^2) = \|\check{T}\|^2\|f\|^2 \Rightarrow \|Tf\| \leq \|\check{T}\|\|f\| \Rightarrow \|T\| \leq \|\check{T}\|$.

□

Theorem 2.4. Let $T \in \mathcal{L}(X_1, X_2)$. Then $T \in \mathcal{T}\mathcal{L}\mathcal{I}(X_1, \mathcal{R}(T))$ if and only if there exists $0 < m \leq M < \infty : m\|x\| \leq \|Tx\| \leq M\|x\|$ for all $x \in X_1$. In such a case $\frac{1}{\|T^{-1}\|} \geq m$ and $\|T\| \leq M$ are best bounds for $T \neq 0$, and $\mathcal{R}(T) = \overline{\mathcal{R}(T)}$ if X_1 is complete (B-space).

Theorem 2.5. Let $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2)$. Then the following are equivalent:

- (1) $T \in \mathcal{T}\mathcal{L}\mathcal{I}(H_1, \mathcal{R}(T))$
- (2) $\mathcal{R}(T^*) = H_1$ (T^* is surjective)
- (3) $\mathcal{N}(T) = \{0\}$ (T is injective) and $\overline{\mathcal{R}(T^*)} = \mathcal{R}(T^*)$

Corollary 2.6. $T \in \mathcal{T}\mathcal{L}\mathcal{I}(H_1, H_2)$ if and only if $T^*T \in \mathcal{T}\mathcal{L}\mathcal{I}(H_1, H_1)$

Corollary 2.7. Let $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2)$ and be any of $\mathcal{R}(T)$ or $\mathcal{R}(T^*)$ closed. Then the latter range space is closed as well, and both \check{T} and \check{T}^* are TLI: $\check{T} \in \mathcal{T}\mathcal{L}\mathcal{I}(\mathcal{R}(T^*), \mathcal{R}(T))$ and $\check{T}^* \in \mathcal{T}\mathcal{L}\mathcal{I}(\mathcal{R}(T), \mathcal{R}(T^*))$.

Proof. Applying 2.3(2), we get:

- I. $\mathcal{R}(T^*) = \mathcal{R}(\check{T}^*)$ closed (H-subspace) $\Rightarrow \check{T}$ is TLI by 2.5 and thus also $\mathcal{R}(T) = \mathcal{R}(\check{T})$ is closed in view of 2.4.
- II. Using the same argumentation: $\mathcal{R}(T) = \mathcal{R}(\check{T}) = \mathcal{R}(\check{T}^{**})$ closed $\Rightarrow \check{T}^*$ is TLI and thus also $\mathcal{R}(T^*) = \mathcal{R}(\check{T}^*)$ is closed. □

Definition 2.8 (Bounded pseudoinverse of bounded linear operators).

Let $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2)$, $\mathcal{R}(T) = \overline{\mathcal{R}(T)}$. Then operator $T^+ \in \mathcal{B}(H_2, H_1)$ is called (Moore-Penrose) **pseudoinverse** of T if the following identities are fulfilled:

- (I1) $TT^+T = T$
- (I2) $T^+TT^+ = T^+$
- (I3) $(TT^+)^* = TT^+$ (TT^+ is self-adjoint)
- (I4) $(T^+T)^* = T^+T$ (T^+T is self-adjoint)

The restricted operator \check{T} yields a geometrically transparent formula for T^+ :

Theorem 2.9. If $T \in \mathcal{B}(H_1, H_2)$ and $\mathcal{R}(T) = \overline{\mathcal{R}(T)}$ then $\mathcal{R}(T^*) = \overline{\mathcal{R}(T^*)}$, both \check{T} and \check{T}^* are TLI and there exists exactly one pseudoinverse of T given by $T^+ := \check{T}^{-1}P_{\mathcal{R}(T)}$.

We have also $\mathcal{R}(T^+) = \mathcal{R}(\check{T}^{-1}) = \mathcal{R}(T^*)$ and

- (1) $TT^+ = P_{\mathcal{R}(T)}$, $I - TT^+ = P_{\mathcal{N}(T^*)}$
- (2) $T^+T = P_{\mathcal{R}(T^*)}$, $I - T^+T = P_{\mathcal{N}(T)}$
- (3) If $T = T^*$ then $TT^+ = T^+T = P_{\mathcal{R}(T)}$, $I - TT^+ = I - T^+T = P_{\mathcal{N}(T)}$,
 $T = TP_{\mathcal{R}(T)} = P_{\mathcal{R}(T)}T$ and $T^+ = T^+P_{\mathcal{R}(T)} = P_{\mathcal{R}(T)}T^+$.

Proof. It is straightforward to verify that the operator $\check{T}^{-1}P_{\mathcal{R}(T)}$ satisfies (I1)–(I4). Uniqueness is a pure algebraic consequence of identities (I1)–(I2) so as it is in the case of standard matrix pseudoinverse, but may be seen immediately also from 2.10. The remaining properties are easy to verify as well. \square

Following the analogy with matrices, all well-known properties and identities of the matrix pseudoinverse remain valid in unchanged or only slightly modified form. Their geometrical proof based on $T^+ := \check{T}^{-1}P_{\mathcal{R}(T)}$ is in most cases a simple exercise compared with standard algebraic approach relying only on identities (I1)–(I4).

The following two corollaries summarize some of the properties.

Corollary 2.10. $x_0 := T^+y = \operatorname{argmin}_{x \in H_1} \|y - Tx\|$ where $x_0 \in \mathcal{R}(T^*)$ is the only least-squares solution to the operator equation $Tx = y$ having minimal norm among all other possible solutions, more precisely: should $x \neq x_0$ be another least-squares solution $Tx = Tx_0 = \hat{y}$ then $x \notin \mathcal{R}(T^*)$ and $\|x\| > \|x_0\|$.

Corollary 2.11. Some more identities for T^+ :

$$(I5) \quad 0^+ = 0^*$$

$$(I6) \quad (T^*)^+ = (T^+)^*, \text{ in particular if } T \text{ is self-adjoint then } T^+ \text{ is self-adjoint as well and } \mathcal{N}(T^+) = \mathcal{N}(T^*)$$

$$(I7) \quad T^{++} = T$$

$$(I8) \quad \text{If } T \in \mathcal{TLI}(H_1, H_2) \text{ then } T^+ = T^{-1}$$

$$(I9) \quad (cT)^+ = c^+T^+ \text{ for any } c \in \mathbb{C} \text{ where } c^+ = \begin{cases} \frac{1}{c} & \text{for } c \neq 0 \\ 0 & \text{for } c = 0 \end{cases}$$

$$(I10) \quad (T^*T)^+ = T^+(T^*)^+ \text{ and } (TT^*)^+ = (T^*)^+T^+ \text{ are self-adjoint}$$

$$(I11) \quad T^+ = (T^*T)^+T^* =: R^+T^* \text{ where } R := T^*T, \mathcal{R}(R) = \mathcal{R}(T^*)$$

$$(I12) \quad T^+ = T^*(TT^*)^+ =: T^*S^+ \text{ where } S := TT^*, \mathcal{R}(S) = \mathcal{R}(T)$$

$$(I13) \quad (T^+)^* = TR^+ = S^+T$$

3. FRAMES AS A GENERALIZED CONCEPT OF RIESZ AND ORTHONORMAL BASES

3.1. Orthonormal bases.

Definition 3.1. (Bessel operator)

For $\Phi := \{\phi_n\}_{n \in J} \subseteq H$ the operator $L_\Phi \in \mathcal{L}(H, \mathbb{C}^{|J|})$ defined by $L_\Phi x := \{\langle x, \phi_n \rangle_n\}_{n \in J}$ is called **Bessel operator** of the sequence Φ . For fixed Φ , which will be the frequent case later on, we put simply $L := L_\Phi$.

Remark 3.2. (Adjoint to Bessel operator)

If $T\xi := \sum_{n \in J} \xi_n \phi_n$ converges in H at least in the weak sense for any $\xi := \{\xi_n\}_{n \in J} \in H_1 \supseteq \mathcal{R}(L)$ and $T \in \mathcal{B}(H_1, H)$ then $\langle \sum_{n \in J} \xi_n \phi_n, f \rangle = \sum_{n \in J} \xi_n \langle \phi_n, f \rangle = \sum_{n \in J} \xi_n \overline{\langle f, \phi_n \rangle}$ for all $f \in H$ saying that $\langle T\xi, f \rangle = \langle \xi, Lf \rangle$, and consequently $L = T^* \in \mathcal{B}(H, H_1)$. Conversely we have $L^* = T$, alias $L^*\xi = \sum_{n \in J} \xi_n \phi_n$.

Theorem 3.3. If $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J} \subseteq H$ is ONB in H then Φ is an unconditional Schauder basis allowing unique expansion of any $f \in H$ in the form $f = L^*\xi = \sum_{n \in J} \xi_n \phi_n$, $\xi_n = \langle f, \phi_n \rangle$ where $\xi := \{\xi_n\}_{n \in J} = Lf \in \ell^2(J)$ and summation is independent of the ordering of the basis elements ϕ_n . As $L \in \mathcal{UI}(H, \ell^2(J))$ by Parseval identity, we have $\|L\| = 1$ and $L^* = L^{-1}$.

Theorem 3.4. Every operator $U \in \mathcal{UI}(H_1, H_2)$ maps any ONB $\{\phi_n\}_{n \in J}$ in H_1 onto the ONB $\{U\phi_n\}_{n \in J}$ in H_2 . Conversely, the natural one-to-one correspondence $\psi_n = U\phi_n$ between the elements of any pair of ONBs $\{\phi_n\}_{n \in J}$ in H_1 and $\{\psi_n\}_{n \in J}$ in H_2 may be in a unique way extended to an operator $U \in \mathcal{UI}(H_1, H_2)$: $Uf = \sum_{n \in J} \langle f, \phi_n \rangle \psi_n$.

3.2. Riesz bases.

In view of 3.4 a generalization close to ONB can be obtained by relaxing the strict unitarity requirement on U and assuming just $U \in \mathcal{TLI}(H_1, H_2)$ only. We arrive at the following definition.

Definition 3.5. $\Phi := \{\phi_n\}_{n \in J} \subseteq H$ is called a **Riesz basis** (RB) in H if there exists operator $T := T_\Phi \in \mathcal{TLI}(H_1, H)$ and ONB $E = \{e_n\}_{n \in J} \subseteq H_1$ such that $\phi_n = Te_n$ for all $n \in J$ (clearly $H \supset \{0\}$ because $\phi_n \neq 0$ in view of $e_n \neq 0$). As $\langle f, \phi_n \rangle = \langle f, Te_n \rangle = \langle T^*f, e_n \rangle$, we have $L = L_E T^* \in \mathcal{TLI}(H, \ell^2(J))$. We can assume without loss of generality $H_1 = \ell^2(J)$, $E = \mathcal{E}$ and $T = L^*$ ($L_E = I$).

Theorem 3.6. *If $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J} \subseteq H$ is RB in H then Φ is an unconditional Schauder basis allowing unique expansion of any $f \in H$ in the form $f = T\xi = L^*\xi = \sum_{n \in J} \xi_n \phi_n$ where $\xi_n = \langle T^{-1}f, e_n \rangle$ in view of $T^{-1}f = \sum_{n \in J} \xi_n e_n$.*

Theorem 3.7 (Equivalent characterizations of a Riesz basis).

Let $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J}$ be a sequence in H and L its Bessel operator, then the following statements are equivalent:

- (1) Φ is a Riesz basis in H
- (2) $L \in \mathcal{TLI}(H, \ell^2(J))$ ($L = T^*$)
- (2') ϕ_n are independent in the sense $\sum_{n \in J} \xi_n \phi_n = 0$ implies $\xi_n = 0$ for all $n \in J$, and there exist $0 < A \leq B < \infty$ such that for all $f \in H$ holds:

$$A\|f\|^2 \leq \|Lf\|^2 = \sum_{n \in J} |\langle f, \phi_n \rangle|^2 \leq B\|f\|^2 \quad (3.1a)$$

- (3) $L^* \in \mathcal{TLI}(\ell^2(J), H)$ ($L^* = T$)

Proof. Equivalence (1) \Leftrightarrow (2) is by definition 3.5 while (2) \Leftrightarrow (2') is easy to see as follows: $L : H \rightarrow \ell^2(J)$ is TLI $\Leftrightarrow L : H \rightarrow \mathcal{R}(L)$ is TLI and surjection on $\ell^2(J)$ $\Leftrightarrow L : H \rightarrow \mathcal{R}(L)$ is TLI and $\mathcal{N}(L^*) = \{0\}$ by 2.5(2)(3), with $\mathcal{R}(L)$ closed due to 2.4 \Leftrightarrow (3.1a) is satisfied, using 2.4 once more, along with independence (which is equivalent to $\mathcal{N}(L^*) = \{0\}$). Clearly (2) \Leftrightarrow (3) holds as well. \square

Example 3.8 (Matrices).

Let $T = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N]$ be a matrix $M \times N$ with columns ϕ_i , $i = 1, 2, \dots, N$. Then $T \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}_N), \ell^2(\mathbb{Z}_M))$ defines a Riesz basis $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in \mathbb{Z}_N}$ in $\mathcal{R}(T) \subseteq \ell^2(\mathbb{Z}_M)$ if and only if T is of full column rank N . T defines a Riesz basis Φ in the whole space $\ell^2(\mathbb{Z}_M)$ if and only if T is regular.

3.3. Frames.

Relaxing still more the requirements on the defining operator T_Φ of a Riesz basis Φ , we arrive at the most general concept of a frame.

Definition 3.9. $\Phi := \{\phi_n\}_{n \in J} \subseteq H$ is called a **frame** in $H \supset \{0\}$ if there exists a surjective operator $T := T_\Phi \in \mathcal{B}(H_1, H)$ and ONB $E = \{e_n\}_{n \in J} \subseteq H_1$ such that $\phi_n = Te_n$ for all $n \in J$. As $\langle f, \phi_n \rangle = \langle f, Te_n \rangle = \langle T^*f, e_n \rangle$, we have again $L = L_E T^* \in \mathcal{TLI}(H, \ell^2(J))$ in view of 2.5 (clearly there exists $n \in J$: $\phi_n \neq 0$ and consequently $T \neq 0$ and $L \neq 0$). We can again assume without loss of generality $H_1 = \ell^2(J)$, $E = \mathcal{E}$ and $T = L^*$ ($L_E = I$).

Theorem 3.10. *If $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J} \subseteq H$ is frame in H then $H = \overline{\mathcal{L}(\Phi)}$, allowing unconditional (generally non-unique) expansion of any $f \in H$ in the form $f = T\xi = L^*\xi = \sum_{n \in J} \xi_n \phi_n$ where $\xi_n = \langle g, e_n \rangle$ for some $g \in H_1$ satisfying $f = Tg$ (thus Φ need not be a Schauder basis in general).*

Later on we exclude the trivial case $H = \{0\}$.

Theorem 3.11 (Equivalent characterizations of a frame).

Let $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J}$ be a sequence in H and L its Bessel operator, then the following statements are equivalent:

- (1) Φ is a frame in H
- (2) $L \in \mathcal{TLI}(H, \mathcal{R}(L))$, $\mathcal{R}(T^*) = \mathcal{R}(L) \subseteq \ell^2(J)$ ($L = T^*$)
- (2') there exist $0 < A \leq B < \infty$ such that for all $f \in H$ holds:

$$A\|f\|^2 \leq \|Lf\|^2 = \sum_{n \in J} |\langle f, \phi_n \rangle|^2 \leq B\|f\|^2 \quad (3.2)$$

- (3) $L^* \in \mathcal{B}(\ell^2(J), H)$ is surjective ($L^* = T$).

Proof. Analogical to the proof of 3.7 when omitting the surjectivity assumption of L on $\ell^2(J)$. \square

Again, as with Riesz basis, equivalence (1) \Leftrightarrow (2') is connecting the standard definition of a frame with the geometrical one of 3.9.

Example 3.12 (Matrices).

Let $T = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N]$ be a matrix $M \times N$ with columns ϕ_i , $i = 1, 2, \dots, N$. Then $T \in \mathcal{B}(\ell^2(\mathbb{Z}_N), \ell^2(\mathbb{Z}_M))$ defines a frame $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in \mathbb{Z}_N}$ in $\mathcal{R}(T) \subseteq \ell^2(\mathbb{Z}_M)$. T defines a frame Φ in the whole space $\ell^2(\mathbb{Z}_M)$ if and only if T is of full row rank M .

4. FRAME EXPANSIONS AND PSEUDOINVERSE OPERATORS

For simplicity we will assume in this section $H_1 = \ell^2(J)$ with natural ONB $E := \mathcal{E} = \{\varepsilon_n\}_{n \in J}$ which results in $T_\Phi = L_\Phi^*$ and $L_\Phi = T_\Phi^*$.

Definition 4.1 (Operator terminology for frames).

Let $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J}$ be a frame in H , then we call

- $L := L_\Phi$... **representation** or **discretization operator** of frame Φ .
- L^* ... **reconstruction operator** of frame Φ .
- $S = TT^* = L^*L$... **frame operator** for Φ .
- $R = T^*T = LL^*$... **correlation operator** of frame Φ .

Lemma 4.2. Let $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J}$ be a frame in H , then for $f \in H$ and $\xi := \{\xi_n\}_{n \in J} \in \ell^2(J)$ the above operators evaluate as follows:

- (1) $Lf = \{\langle f, \phi_n \rangle\}_{n \in J}$, $L^*\xi = \sum_{n \in J} \xi_n \phi_n$
- (2) $Sf = \sum_{n \in J} \langle f, \phi_n \rangle \phi_n$
- (3) $R\xi = \{\sum_{n \in J} \langle \phi_n, \phi_m \rangle \xi_n\}_{m \in J}$. If $|J| = \infty$, say $J = \mathbb{N}$, then $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \phi_n, \phi_m \rangle = 0$ for each fixed $m \in \mathbb{N}$ (rows of 'matrix' $[R] = [R_{mn}]_{m, n \in \mathbb{Z}}$, $R_{mn} = \langle \phi_n, \phi_m \rangle = \overline{\langle \phi_m, \phi_n \rangle}$ tend to zero), and conversely $\lim_{m \rightarrow \infty} \langle \phi_n, \phi_m \rangle = 0$ for each fixed $n \in \mathbb{N}$ (columns of 'matrix' $[R]$ tend to zero).

Theorem 4.3. Let $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J}$ be a sequence in H such that $L := L_\Phi \in \mathcal{B}(H, \ell^2(J))$, then the following statements are equivalent

- (1) Φ is a frame in H
- (2) $S \in \mathcal{TLI}(H, H)$
- (3) There exist $0 < A \leq B < \infty$ (the same as in (3.2)) such that

$$A\|f\| \leq \|Sf\| \leq B\|f\| \quad (4.1)$$

Proof. (1) $\stackrel{3.11}{\Leftrightarrow}$ L is TLI $\stackrel{2.6}{\Leftrightarrow}$ $S := L^*L$ is TLI, which is (2). (2) \Leftrightarrow (3) follows by 2.4 with the same A, B as in (3.2) in view of $\|Lf\|^2 = \langle Lf, Lf \rangle = \langle L^*Lf, f \rangle = \langle Sf, f \rangle$ and the Schwarz's inequality. \square

Theorem 4.4 (Dual frame).

Let $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J}$ be a frame (RB) in H , then the sequence $\Phi' = \{\phi'_n\}_{n \in J}$, $\phi'_n := S^+ \phi_n \stackrel{4.3(2)}{=} S^{-1} \phi_n$ is also a frame (RB) called **dual frame (RB)** to Φ . We have also $\phi'_n = S^+ L^* \varepsilon_n \stackrel{(I13)}{=} L^* R^+ \varepsilon_n$.

Proof. S is TLI by 4.3 $\Rightarrow S^+ = S^{-1}$ by (I13) $\Rightarrow \Phi'$ is a frame according to definition 3.9 because $S^{-1} \phi_n = S^{-1} T_\Phi e_n$ where $S^{-1} T_\Phi$ is surjective. \square

Corollary 4.5 (Dual operator relationships using S).

- (1) $L' := L_{\Phi'} = LS^{-1}$, $L = L'S$ (relationship between L and L')
- (2) $L'^* = S^{-1} L^*$, $L^* = SL'^*$ (relationship between L^* and L'^*)
- (3) $S' = S^{-1}$, $S = S'^{-1}$ (relationship between S and S')

Proof. S is self-adjoint and TLI $\Rightarrow (S^{-1})^* = (S^*)^{-1} = S^{-1}$ and thus we get:

- (1) $L' = T_{\Phi'}^* = (S^{-1} T_\Phi)^* = T_\Phi^* S^{-1} = LS^{-1} \Leftrightarrow L'S = L$.
- (2) $L'^* = (LS^{-1})^* = S^{-1} L^* \Leftrightarrow SL'^* = L^*$.
- (3) $S' = L'^* L' = S^{-1} L^* LS^{-1} = S^{-1} S S^{-1} = S^{-1} \Leftrightarrow S = S'^{-1}$.

 \square **Corollary 4.6** (Duality principle).

If Φ is a frame in H then $\Phi'' = \Phi$.

Proof. $\phi''_n = (\phi'_n)' = (S')^{-1} \phi'_n = (S')^{-1} S^{-1} \phi_n \stackrel{4.5(3)}{=} S S^{-1} \phi_n = \phi_n$. \square

Theorem 4.7 (The main representation theorem).

If $\Phi = \{\phi_n\}_{n \in J}$ is a frame in $H \subseteq H_2$ then $P_H = L^* L' = L'^* L$, alias it holds

$$\widehat{f} = \sum_{n \in J} \langle f, \phi'_n \rangle \phi_n = \sum_{n \in J} \langle f, \phi_n \rangle \phi'_n \text{ for all } f \in H_2. \quad (4.2)$$

Proof. For $f = \widehat{f} + f^\perp \in H_2$ we have in view 2.1(3) $Lf = L\widehat{f}$ and $L'f = L'\widehat{f}$. Hence $L^* L' f = L^* L' \widehat{f} \stackrel{4.5(1)}{=} L^* L S^{-1} \widehat{f} = S S^{-1} \widehat{f} = \widehat{f} = S^{-1} S \widehat{f} = S^{-1} L^* L \widehat{f} \stackrel{4.5(2)}{=} L'^* L \widehat{f} = L'^* L f$. \square

5. FREQUENT SPECIAL CASES: GABOR AND WAVELET FRAMES

In the following we mention two frequently used frame constructions with doubly-indexed frame elements $\phi_{a,b}$ where $(a,b) \in J \subseteq \mathcal{A} \times \mathcal{B} \subseteq \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$.

Definition 5.1 (Gabor frame).

Let H be a functional H-space and $\varphi(t) \in H$, $\|\varphi\| = 1$, such that $\Phi = \{\varphi_{a,b}(t)\}_{(a,b) \in J}$, $\varphi_{a,b}(t) := \varphi(t-b)e^{i2\pi at}$ constitutes a frame in H . We call Φ a **Gabor frame in H** and $\varphi(t)$ its **mother function** (all frame elements are obtained from $\varphi(t)$ via shifts $b \in \mathcal{B}$ and modulations $e^{i2\pi at}$ with frequencies $a \in \mathcal{A}$). We write $\Phi = G(\varphi, \mathcal{A}, \mathcal{B})$.

Definition 5.2 (Wavelet frame).

Let H be a functional H-space and $\varphi(t) \in H$, $\|\varphi\| = 1$, such that $\Phi = \{\varphi_{a,b}(t)\}_{(a,b) \in J}$, $\varphi_{a,b}(t) := |a|^{-\frac{1}{2}} \varphi\left(\frac{t-b}{a}\right)$ constitutes a frame in H (clearly $\|\varphi_{a,b}\|=1$ if $H = L^2$). We call Φ a **wavelet frame in H** and $\varphi(t)$ its **mother wavelet function** (all frame elements are obtained from $\varphi(t)$ via shifts $b \in \mathcal{B}$ and scaling with terms $a \in \mathcal{A}$). We write $\Phi = W(\varphi, \mathcal{A}, \mathcal{B})$.

Remark 5.3.

- (1) If \mathcal{A} and \mathcal{B} are finite, then Gabor and wavelet frames exist with arbitrary $\varphi(t)$ in $H = \mathcal{L}(\Phi)$. In the infinite case $\mathcal{A}, \mathcal{B}, J \subseteq \mathcal{A} \times \mathcal{B}$ and φ must fulfil certain conditions to define a frame. The common setting is with $\mathcal{A} = \{n a_0 \mid n \in \mathbb{Z}\}$, $a_0 > 0$ and $\mathcal{B} = \{n b_0 \mid n \in \mathbb{Z}\}$, $b_0 > 0$. With more strict conditions even Riesz bases or ONBs may be obtained. At present various wavelet orthonormal bases for the dyadic case $J = \{(2^{-j}, k 2^{-j}) \mid j \in \mathbb{Z}, k \in \mathbb{Z}\}$ are popular in many applications, giving $\varphi_{j,k}(t) = 2^{\frac{j}{2}} \varphi(2^j t - k)$ — see also [14].
- (2) $\varphi(t)$ may be of kernel type ($\varphi(t) \geq 0$, $t \in \mathbb{R}$) in the case of Gabor frame for the space L^2 because the modulation term $e^{i2\pi at}$ results in shifts in the frequency domain allowing to span the whole space. That is in contrast with the wavelet frame the mother wavelet of which has to be an oscillating function.

6. FRAME SETTING OF THE GENERAL APPROXIMATION PROBLEM

6.1. Deterministic setting.

Let H_2 be a functional H-space and $G \subset H_2$ its subset spanning a subspace $H := \overline{\mathcal{L}(G)}$, $\|g\| = 1$ for all $g \in G$. We believe that a function $f \in H_2$ is well approximated by functions from H . The best approximation in L^2 -norm is $\hat{f} = P_H f$. Given a tolerance $\varepsilon > 0$, we are looking for a H-subspace

$$H_\varepsilon := H_\varepsilon(f) \subseteq H, \dim H_\varepsilon < \infty, \text{ such that } \|\hat{f} - P_{H_\varepsilon} f\| \leq \varepsilon. \quad (6.1)$$

Observe that P_{H_ε} depends also on f . In the following we write briefly $\hat{f}_\varepsilon := P_{H_\varepsilon} f$.

Lemma 6.1. *For every $f \in H_2$ and $\varepsilon > 0$ there exists finite $\Phi_\varepsilon := \Phi_\varepsilon(f) \subseteq G$ which is either empty or Riesz basis for a finite-dimensional H-subspace H_ε satisfying (6.1).*

Proof. $\hat{f} \in H = \overline{\mathcal{L}(G)} \Rightarrow \exists \{s_n\}_{n \in \mathbb{N}}, s_n \in \mathcal{L}(G), s_n = c_{n1}g_1 + c_{n2}g_2 + \dots + c_{nm_n}g_{m_n}, c_{nj} \in \mathbb{C}, g_j \in G$ such that $\|f - s_n\| \rightarrow 0$ for $n \rightarrow \infty$. Thus, given $\varepsilon > 0$, there exists N : $\|f - s_N\| \leq \varepsilon$. If we put $\Phi_\varepsilon := \{g_1, g_2, \dots, g_{m_N}\}$, then $s_N \in \mathcal{L}(\Phi_\varepsilon) =: H_\varepsilon$ and $\|\hat{f} - P_{H_\varepsilon} f\| = \|\hat{f} - P_{H_\varepsilon} \hat{f}\| \leq \|\hat{f} - s_N\| \leq \varepsilon$. If $H_\varepsilon = \{0\}$ we can put $\Phi_\varepsilon = \emptyset$, otherwise one can assume without loss of generality that g_1, g_2, \dots, g_{m_N} are independent and $\dim H_\varepsilon = m_N < \infty$. Consequently, Φ_ε is Riesz basis in H_ε because the associated operator $L^* \in \mathcal{L}(\ell^2(J_\varepsilon), H_\varepsilon) = \mathcal{T} \mathcal{L}(\ell^2(J_\varepsilon), H_\varepsilon)$, $J_\varepsilon = \{1, 2, \dots, m_N\}$, where the latter identity holds due to finite dimension of H_ε (cf. example 3.8). \square

Theorem 6.2 (Algorithm: construction of $\Phi_\varepsilon(f)$).

Suppose $\varepsilon > \|f - \hat{f}\|$ and $|G| \leq \aleph_0$. The steps of an algorithm for finding $\Phi_\varepsilon(f) =: \{\phi_m\}_{1 \leq m \leq M}$ and \hat{f}_ε are as follows:

1° *Initial step for $m = 0$:* $\Phi_0 := \emptyset, H_0 = \{0\}$.

2° *Repeated step for $m > 0$:*

Let us denote $\Phi_{m-1} := \{\phi_1, \dots, \phi_{m-1}\}$ elements which already have been constructed in previous steps and put $H_{m-1} := \mathcal{L}(\Phi_{m-1})$, compute $\hat{f}_{m-1} := P_{H_{m-1}} f$ and $f_{m-1}^\perp := f - \hat{f}_{m-1}$. Then we proceed in the order as follows:

- (a) *If $\|f_{m-1}^\perp\| \leq \varepsilon$, then we can put $\Phi_\varepsilon(f) = \Phi_{m-1}$, $M = m - 1$, $\hat{f}_\varepsilon = \hat{f}_{m-1}$ and **stop**.*
- (b) *Else if $\langle f_{m-1}^\perp, g \rangle = 0$ for each $g \in G - \Phi_{m-1}$, then $f_{m-1}^\perp \perp H$ saying that $\hat{f}_{m-1} = \hat{f}$ is exact solution, consequently we put again $\Phi_\varepsilon(f) := \Phi_{m-1}$, $M := m - 1$, $\hat{f}_\varepsilon = \hat{f}_{m-1}$ and **stop**.*

- (c) *Otherwise there exists $g \in G - \Phi_{m-1}$: $\langle f_{m-1}^\perp, g \rangle \neq 0$ and we select $\phi_m \in G - \Phi_{m-1}$ for which $|\langle f_{m-1}^\perp, \phi_m \rangle|$ is sufficiently large, $\phi_m := \operatorname{argmax}_{g \in G - \Phi_{m-1}} |\langle f_{m-1}^\perp, g \rangle|$ being the best choice provided that such ϕ_m exists. Afterwards we put $m = m + 1$ and continue with the next step 2°.*

Proof.

The algorithm will stop after finite number of steps:

Should this not be the case, denote $H_\infty := \overline{\mathcal{L}(\Phi_\infty)}$, where $\Phi_\infty = \{\phi_1, \phi_2, \dots\} = \bigcup_{m=1}^\infty \Phi_m$ lists all the elements selected by countably many steps (c) of our algorithm. For any $\varepsilon' > 0$, by lemma 6.1, there exists $\Phi_{\varepsilon'}$: $\|\widehat{f}_\infty - P_{H_{\varepsilon'}} f\| \leq \varepsilon'$ where $\widehat{f}_\infty := P_{H_\infty} f$ and $H_{\varepsilon'} = \mathcal{L}(\Phi_{\varepsilon'})$. Since $\Phi_{\varepsilon'} \subseteq \Phi_\infty$ is empty or finite, there must exist $N \in \mathbb{N}$ such that $\forall m \geq N$: $\Phi_{\varepsilon'} \subseteq \Phi_N \subseteq \Phi_m$ and $H_{\varepsilon'} \subseteq H_N \subseteq H_m$, yielding $\|\widehat{f}_\infty - \widehat{f}_m\| \leq \|\widehat{f}_\infty - P_{H_{\varepsilon'}} f\| \leq \varepsilon'$ for any $m \geq N$. Thus we have proved $\widehat{f}_m \rightarrow \widehat{f}_\infty$ for $m \rightarrow \infty$. Using this and the continuity of the inner product, we are about to show $\widehat{f}_\infty = \widehat{f}$. It is sufficient to verify $f - \widehat{f}_\infty \perp H$, or, $\langle f - \widehat{f}_\infty, g \rangle = 0 \forall g \in G$. If there exists $g \in G$: $\langle f - \widehat{f}_\infty, g \rangle \neq 0$, then $\langle f, g \rangle \neq \langle \widehat{f}_\infty, g \rangle$ and $g \in G - \Phi_\infty$ because of $f - \widehat{f}_\infty \perp \Phi_\infty$. As, by continuity $\langle \widehat{f}_m, g \rangle \rightarrow \langle \widehat{f}_\infty, g \rangle$, there exists m_0 such that $\langle f, g \rangle \neq \langle \widehat{f}_m, g \rangle \forall m \geq m_0$. Hence $\langle f - \widehat{f}_m, g \rangle \neq 0 \forall m \geq m_0 \Rightarrow g \in \Phi_\infty$ (g had to be selected into Φ_m for some m). But this is contradiction with $g \in G - \Phi_\infty$. Putting now $\varepsilon' := \varepsilon - \|f - \widehat{f}\| > 0$, we have $0 < \varepsilon' \leq \varepsilon$ and the following estimate:

$$\begin{aligned} \|f_N^\perp\| &= \|f - P_{H_N} f\| \leq \|f - \widehat{f}_\infty\| + \|\widehat{f}_\infty - \widehat{f}_N\| \leq \|f - \widehat{f}_\infty\| + \|f - P_{H_{\varepsilon'}} f\| \leq \\ &\leq \|f - \widehat{f}\| + \varepsilon' = \varepsilon. \end{aligned}$$

Thus stop condition (a) is fulfilled with $m = N + 1$ which contradicts our original assumption.

If the algorithm stops after completing M steps then

- (1) $\Phi_\varepsilon := \Phi_M$ is a correct choice:

Indeed, the algorithm has stopped either due to condition (a) or (b) with $m = M + 1$:

- (a) $f - \widehat{f} \in H^\perp$ and $\widehat{f} - P_{H_M} f \in H$ (in view of $H_M \subseteq H$) \Rightarrow
 $\|f - P_{H_M} f\|^2 = \|f - \widehat{f}\|^2 + \|\widehat{f} - P_{H_M} f\|^2 \Rightarrow \|\widehat{f} - P_{H_M} f\|^2 =$
 $\|f - P_{H_M} f\|^2 - \|f - \widehat{f}\|^2 \leq \|f - P_{H_M} f\|^2 = \|f_M^\perp\|^2 \leq \varepsilon^2$ due to fulfilled condition (a).
 (b) $\Rightarrow \langle f_M^\perp, g \rangle = 0 \forall g \in G - \Phi_M \Rightarrow \langle f_M^\perp, g \rangle = 0 \forall g \in G$ because $f_M^\perp \perp \Phi_M$.
 Thus $f_M^\perp \perp H$ and $\widehat{f} = \widehat{f}_M := P_{H_M} f$ is exact solution \Rightarrow
 $0 = \|f - P_{H_M} f\| \leq \varepsilon$.

- (2) Φ_M is empty with $M = 0$ or Riesz basis of H_M with $M > 0$:

- $M = 0$ $\Rightarrow \Phi_M = \emptyset$ in view of 1°.
- $M > 0$: As $\dim H_M < \infty$, it is sufficient to show that $\Phi_M = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$ are independent (cf. proof of 6.1). We are going to show by induction on m that $\Phi_m = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m\}$ are independent for all $1 \leq m \leq M$. Indeed, for $m = 1$ this is true because $\phi_1 \in G$, $\|\phi_1\| = 1 \Rightarrow \phi_1 \neq 0$. Let by induction hypothesis $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{m-1}$ be independent, then due to (c): $\Phi_m = \Phi_{m-1} \cup \{\phi_m\}$ where $\langle f_{m-1}^\perp, \phi_m \rangle \neq 0 \Rightarrow \phi_m \notin \mathcal{L}(\Phi_{m-1}) = H_{m-1}$ (because of $f_{m-1}^\perp \perp H_{m-1}$) $\Rightarrow \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m$ are independent.

□

Remark 6.3.

(1) By 4.7

$$\widehat{f}_{m-1} = L_{m-1}^* L_{m-1} = \sum_{j=1}^{m-1} \langle f, \phi_j \rangle \phi_j' \quad (6.2)$$

where $\Phi'_{m-1} := \{\phi_1', \dots, \phi_{m-1}'\}$ is dual frame to Φ_{m-1} in H_{m-1} , $\phi_j' = S_{m-1}^{-1} \phi_j$, $j = 1, \dots, m-1$, where $S_{m-1} g \stackrel{4.2(2)}{=} \sum_{j=1}^{m-1} \langle g, \phi_j \rangle \phi_j$, $g \in H_{m-1}$, and $S_{m-1} \in \mathcal{TLI}(H_{m-1}, H_{m-1})$ in view of 4.3. Computationally more practical is the alternative formula $\phi_j' = L_{m-1}^* R_{m-1}^+ \varepsilon_j$ (see 4.4) where the correlation operator $R_{m-1} = L_{m-1} L_{m-1}^*$ is standard matrix operator of size $(m-1) \times (m-1)$ with entries $R_{uv} \stackrel{4.2(3)}{=} \langle \phi_v, \phi_u \rangle$. Then R_{m-1}^+ is easily evaluated as standard matrix pseudoinverse.

(2) In practical computations f uses to be described only by the vector of discrete samples $f(\mathbf{t}) := [f(t_1), \dots, f(t_N)]^T$ at $\mathbf{t} = [t_1, \dots, t_N]^T$ which introduces additional systematic error into the computation of (6.2) in each step because the inner products $\langle f, \phi_j \rangle$ are to be evaluated approximately. For example in L^2 the integral $\langle f, \phi_j \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(u) \overline{\phi_j(u)} du \approx \eta_j$ where η_j are approximate values obtained by a suitable (linear) quadrature formula.

6.2. Stochastic setting.

A) Simple approach: With sampled f , in addition to the systematic error mentioned in 6.3(2), also random errors $f(t_i) \pm e_i$ may disturb the computation of $\langle f, \phi_j \rangle$. Then a suitable estimator \widetilde{L}_{m-1} (e.g. a linear one based on the above mentioned quadrature formula) has to be used: $\widetilde{L}_{m-1} f(\mathbf{t}) \approx L_{m-1} f$. If \widetilde{L}_{m-1} is linear (matrix of size $(m-1) \times N$) then, fortunately, with suitable choice of ϕ_j (e.g. of kernel type) and/or quadrature weights, this estimator operates like weighted mean, reducing the corrupting random noise.

Error propagation: Let V denote the covariance matrix of corrupting noise vector $\mathbf{e} = [e_1, \dots, e_N]^T$, then $\widehat{f}_{m-1}(\mathbf{t}')$ is estimated on arbitrary mesh $\mathbf{t}' = [t'_1, \dots, t'_{N'}]^T$ also by linear formula

$$\widetilde{f}_{m-1} := [\phi_1'(\mathbf{t}'), \dots, \phi_{m-1}'(\mathbf{t}')] \widetilde{L}_{m-1} f(\mathbf{t})$$

with covariance matrix $V_{m-1} := F' \widetilde{L}_{m-1} V \widetilde{L}_{m-1}^* F'^*$ when denoting $F' := [\phi_1'(\mathbf{t}'), \dots, \phi_{m-1}'(\mathbf{t}')]'$. There $\widetilde{R}_{m-1} := \widetilde{L}_{m-1} \widetilde{L}_{m-1}^*$ may be viewed as an estimator for the operator R_{m-1} in cases where its entries are not easy to evaluate by some reason.

B) Sophisticated approach: We operate in the stochastic setting from the very beginning with H_2 being a H-space of random variables or processes (discrete or continuous) and H its suitable subspace spanned by $g \in G$ with known (or estimated) cross-covariance structure. This allows for exact (or approximate) computation of the associated correlation operators R_{m-1} via suitable inner products, typically by stochastic integrals in case of processes. Then estimates \widetilde{f}_{m-1} are obtained directly as a random variable or process by linear combination of some $g \in G$ with coefficients evaluated by means of R_{m-1} and the observation of $f \in H_2$.

Example 6.4 (Time series).

Let $X = \{X_t\}_{t \in \mathbb{Z}}$ be a time series, $X_t \in L^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$ — the IP-space of all finite-variance (complex) random variables on probability space (Ω, \mathcal{A}, P) with inner-product $\langle X, Y \rangle := EX\bar{Y}$. That space is known to be complete (H-space) but not separable in general. Preserving notation of this section, we can put:

- $H_2 := \overline{\mathcal{L}(X)} \subseteq L^2(\Omega, \mathcal{A}, P)$ which is separable H-subspace as required. If X is zero-mean process then, clearly, $\langle X, Y \rangle = \text{cov}(X, Y)$ and $\|X\| = \sigma_X$ in H_2 .
- $f := X_{n+k}$ for arbitrary but fixed $n \in \mathbb{Z}$ and a $k \in \mathbb{N}$.
- $G := \{X_t/\sigma_t\}_{t \leq n}$, $\sigma_t := \sigma_{X_t}$, the set of generators with unit norm (variance).
- $\Phi_\varepsilon(X_{n+k}) := \{X_{n+1-h_m}\}_{1 \leq m \leq M}$, $h_m \in \mathbb{N}$ and $h_1 < \dots < h_M$.
- $\hat{f}_\varepsilon := \hat{X}_{\varepsilon, n+k}$ the ε -approximation to the best linear k -step prediction \hat{X}_{n+k} of X_{n+k} in $H := \overline{\mathcal{L}(G)}$.

We have by (6.2):

$$\hat{X}_{\varepsilon, n+k} = \sum_{j=1}^M \varrho_n(k, h_j) \phi'_j \quad \text{where } \varrho_n(k, h_j) := \frac{EX_{n+k}\bar{X}_{n+1-h_j}}{\sigma_{n+k}\sigma_{n+1-h_j}}.$$

If X is (weakly) stationary zero-mean with variance σ^2 and autocorrelation function $\varrho(h) := \text{cov}(X_{t+h}, X_t)/\sigma^2$ then $\varrho_n(k, h_j) = \text{cov}(X_{n+k}, X_{n+1-h_j})/\sigma^2 = \varrho(k+h_j-1)$, $j = 1, 2, \dots, M$, are independent of n . Thus ε -level significant autocorrelations have been selected by our algorithm from theorem 6.2 to play the role of dual-frame expansion coefficients. With $h_j = j$ for $j = 1, 2, \dots, M$ (model $X \sim AR(M)$) it is straightforward to see that the above formula is exactly the standard Yule-Walker-type k -step predictor. Indeed, by theorem 4.4 $\phi'_j = L^* R^+ \varepsilon_j = \sum_{i=1}^M R_{ij}^+ \phi_i = \sum_{i=1}^M R_{ij}^+ X_{n+1-i}$ where $R^+ = [R_{ij}^+]$ and $R = [R_{uv}]$, $R_{uv} = \langle X_{n+1-v}/\sigma, X_{n+1-u}/\sigma \rangle = \text{cov}(X_{n+1-v}, X_{n+1-u})/\sigma^2 = \varrho(u-v)$. Hence

$$\hat{X}_{\varepsilon, n+k} = \sum_{j=1}^M \varrho(k+j-1) \left(\sum_{i=1}^M R_{ij}^+ X_{n+1-i} \right) = \sum_{i=1}^M \left(\sum_{j=1}^M R_{ij}^+ \varrho(k+j-1) \right) X_{n+1-i}.$$

Denoting $\boldsymbol{\varrho}_k := [\varrho(k), \varrho(k+1), \dots, \varrho(k+M-1)]^T$ then $\boldsymbol{\xi}_k := [\xi_{k,1}, \xi_{k,2}, \dots, \xi_{k,M}]^T$ is the vector of autoregression coefficients $\xi_{k,i} := \sum_{j=1}^M R_{ij}^+ \varrho(k+j-1)$ which, when written in matrix form $\boldsymbol{\xi}_k = R^+ \boldsymbol{\varrho}_k$, is exactly the least-mean-square solution to the well-known Yule-Walker system $R \boldsymbol{\xi}_k = \boldsymbol{\varrho}_k$. By functionality of algorithm 6.2 the frame elements have been selected independent and constitute therefore Riesz basis (cf. proof of lemma 6.1). Then R is TLI (regular) in view of 3.7(2)(3) and $R^+ \stackrel{18}{=} R^{-1}$. However, in practical computation with small tolerance ε the matrix R may be close to singular, that is why the pseudoinverse is more appropriate.

Representing an unknown object (data vector, function, random variable, random process, etc.) in form of (even non-orthogonal) linear expansion in terms of other fully or partially known objects is inherent in almost any approximation problem. The theory of frames yields a fairly general methodological framework for modeling and solution of many such problems. Dual frame expansion is to be preferred by reasons of numerical stability.

A variety of techniques, either known (see example 6.4) or novel (see section 7 below), may be obtained in this way avoiding technical details of the objects under consideration or their uncertainty due to random effects. Then, at the final computational step, it is the matter of numerical analysis and statistics (under additional assumptions if necessary) to quantify and minimize the errors due to finite nature of estimators used instead of operators involved (see \tilde{L} and \tilde{R} in 6.2A) or commonly used Yule-Walker estimators for L and R based on estimates of autocorrelation function ϱ from example 6.4).

7. KERNEL FRAME SMOOTHING OPERATORS

We state a special approximation problem of 6 as follows:

$$H_2 = L^2, G = \left\{ \varphi\left(\frac{t-b}{a}\right) \mid (a, b) \in J \subseteq \mathcal{A} \times \mathcal{B} \right\}, |\mathcal{A}|, |\mathcal{B}| \leq \aleph_0$$

with a given (kernel) function $\varphi(t) \in H_2$. Clearly $|G| \leq \aleph_0$ satisfies the assumption of algorithm from theorem 6.2.

Definition 7.1. The orthogonal projection operator $P_{H_\varepsilon}(f) \in \mathcal{B}(H_2, H_\varepsilon)$ from (6.1) is called ε -**optimal kernel frame smoothing operator** for f onto H . If $\Phi_\varepsilon(f) = \{\phi_1, \dots, \phi_M\}$, $\phi_i(t) = \varphi\left(\frac{t-b_i}{a_i}\right)$, is the associated wavelet frame (RB), then b_i are called ε -**optimal shifts** and a_i ε -**optimal scales (bandwidths)** for f onto H .

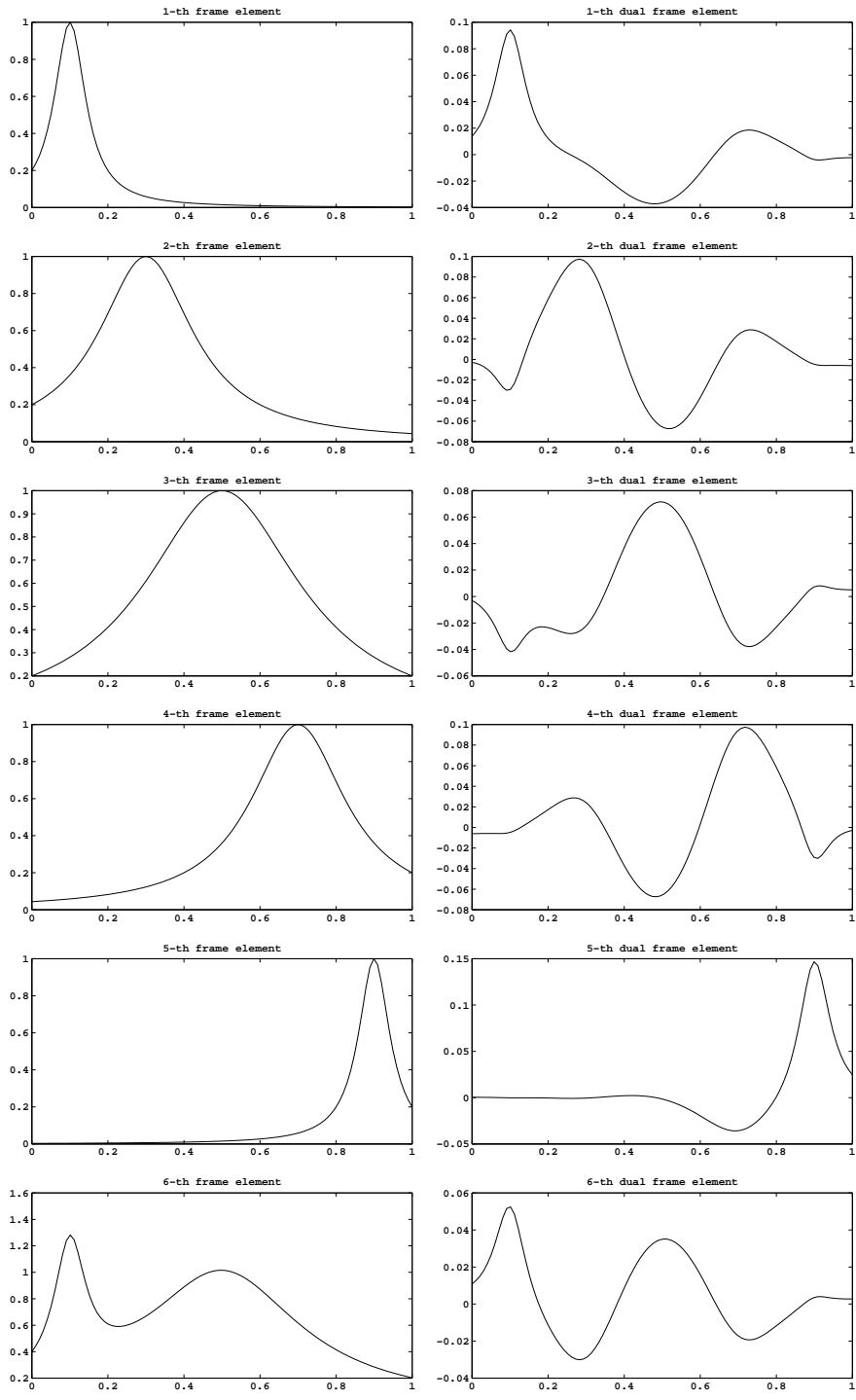
Remark 7.2. By the main representation theorem 4.7 the smoothed function evaluates as

$$\hat{f}_\varepsilon(t) = \sum_{i=1}^M \langle f, \phi_i \rangle \phi_i'(t) = \sum_{i=1}^M \langle f, \phi_i' \rangle \varphi\left(\frac{t-b_i}{a_i}\right). \quad (7.1)$$

The latter form confirms that P_{H_ε} belongs to the family of kernel smoothing operators [13]. In contrast with the classical case the usual expansion co-ordinates $f(t_i)$ are replaced by more precise dual frame weighted discretization $L'(f) = \{\langle f, \phi_i' \rangle\}_i$ and in addition to optimal bandwidths a_i also optimal shifts b_i may be found whereas in the classical setting $b_i = t_i$ are fixed [6, 10]. Nevertheless, if desired, the latter restriction is easily incorporated by appropriate choice of index set $J \subseteq \mathcal{A} \times \mathcal{B}$.

Figure 1a) visualizes a true six-element frame (not Riesz basis) $\Phi := \{\phi_1, \dots, \phi_6\}$ derived from lorentzian mother kernel function $\varphi(t) := \frac{1}{1+4t^2}$, $t \in [0, 1]$, as follows: $\phi_i(t) := \varphi\left(\frac{t-b_i}{a_i}\right)$ for $i = 1, 2, \dots, 5$, $\phi_6(t) := \varphi_1(t) + \varphi_3(t)$, with scales $a_1 = 0.1$, $a_2 = 0.3$, $a_3 = 0.5$, $a_4 = 0.3$, $a_5 = 0.1$ and shifts $b_1 = 0.1$, $b_2 = 0.3$, $b_3 = 0.5$, $b_4 = 0.7$, $b_5 = 0.9$. The associated dual frame Φ' is shown in Figure 1b).

Afterward (Figure 2) the function $f(t) := -\phi_1(t) + 2\phi_2(t) + 3\phi_3(t) - 2\phi_4(t) + \phi_5(t) \in \mathcal{L}(\Phi)$ (full line) has been reconstructed (dashed line) in terms of $\phi_i'(t)$ from its discrete samples corrupted with gaussian zero-mean white noise with variance σ^2 . Three uniform sampling meshes in combination with two noise levels $\sigma = 0.2$ and $\sigma = 0.6$ confirm a very good performance of the kernel frame smoothing operator. Rectangular rule was used as the simplest quadrature formula for approximate evaluation of integral scalar products $\langle f, \phi_i \rangle$ which play the role of expansion co-ordinates according to (7.1) — approximation \tilde{L} to the representation operator L .



a) kernel frame basis functions b) dual kernel frame basis functions

Figure 1: six-element lorentzian kernel frame (left) and its dual (right)

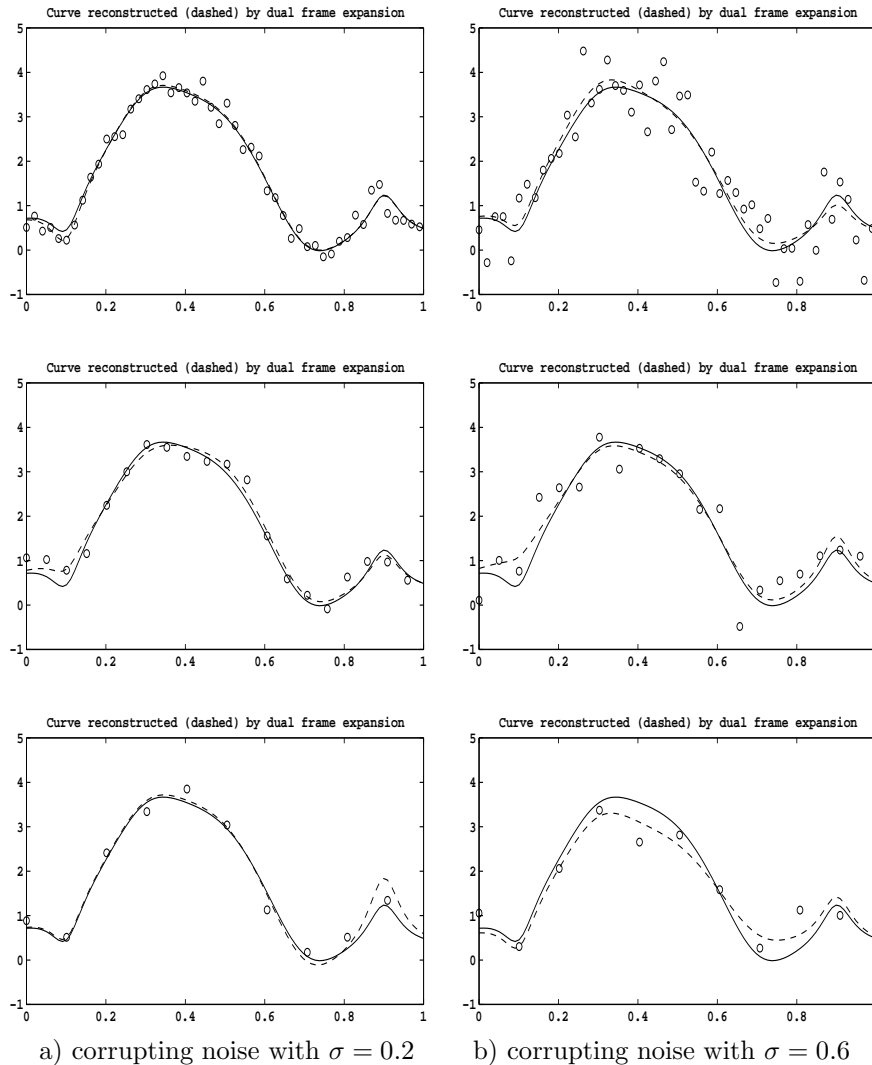


Figure 2: Dual frame reconstruction from 50,20 and 10 samples (top-down)

8. CONCLUSION

A novel geometric approach was outlined which is useful both for the construction of pseudoinverse operators in Hilbert spaces (cf. 2.2, 2.3, 2.7, 2.9) and definition of frames (cf. 3.9) preserving equivalence with the commonly used analytic descriptions of frames (cf. 3.11). A one-to-one correspondence between frames and operators having bounded pseudoinverse could thus be established in a transparent way.

A nearly optimal (in a least-squares sense) approximation problem has been formulated and solved in section 6. The associated numerical discretization effects along with the influence of corrupting random noise are briefly discussed as well.

For a new type of kernel frame smoothing operators introduced in section 7 ε -optimal bandwidths and shifts are easily found as a solution to a special approximation problem stated above.

REFERENCES

- [1] John J. Benedetto (ed.) and Michael M. Frazier (ed.), *Wavelets: Mathematics and Applications.*, Studies in Advanced Mathematics, CRC Press., Boca Raton, FL, 1994 (English).
- [2] Charles K. Chui, *An introduction to wavelets*, Wavelet Analysis and Its Applications, vol. 1, Academic Press, Inc., San Diego, CA, 1992.
- [3] Ingrid Daubechies, *Ten lectures on wavelets*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, vol. 61, SIAM, Philadelphia, Pennsylvania, 1992.
- [4] L. Debnath and P. Mikusiński, *Introduction to Hilbert spaces with applications*, Second ed., Academic Press, SanDiego-London-Boston, 1999.
- [5] R. J. Duffin and A. C. Schaeffer, *A class of nonharmonic Fourier series*, Trans. Amer. Math. Soc. **72** (1952), 341–366.
- [6] J. Fan and I. Gijbels, *Variable bandwidth and local linear regression smoother*, The Annals of Statistics **20** (1992), no. 4, 2008–2036.
- [7] C. W. Groetsch, *Generalized inverses of linear operators. Representation and approximation.*, Monographs and Textbooks in Pure and Applied Mathematics, vol. 37, Marcel Dekker, Inc. VIII, New York-Basel, 1977.
- [8] Christian Houdré, *Wavelets, probability, and statistics: Some bridges*, vol. Wavelets: Mathematics and Applications., pp. 365–398, Studies in Advanced Mathematics, CRC Press., Boca Raton, FL, 1994.
- [9] Jaroslav Michálek, *Kernel estimates: Basic properties and optimal choice of estimated parameters*, In: Proceedings of the winter school ROBUST'94, Malenovice (Prague) (J. Antoch and G. Dohnal, eds.), JČMF–Czechoslovak Mathematical Society, KPMS MFF Charles University, Czech Rep., January 1994, pp. 102–113 (Czech).
- [10] ———, *Kernel smoothing with variable bandwidth*, Proceedings of the summer school MATLAB 94, 95 Velké Karlovice 1994, Čeríněk 1995 (I. Horová, ed.), Folia Fac. Sci. Nat. Univ. Masaryk. Brunensis, Mathematica, vol. 5, Dept. of Appl. Math., Masaryk University of Brno, Czech Rep., 1997, pp. 113–128 (Czech).
- [11] Angus E. Taylor, *Introduction to functional analysis.*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1958.
- [12] Anthony Teolis, *Computational signal processing with wavelets*, Birkhäuser, Boston-Basel-Berlin, 1998.
- [13] V. Veselý, *Kernel estimators — implementation, illustrative examples and applications*, Proceedings of the winter school ROBUST'94, Malenovice (J. Antoch and G. Dohnal, eds.), JČMF (Society of Czech Mathematicians and Physicists), January 1994, In Czech, pp. 160–171.
- [14] ———, *Wavelets and their application to data smoothing*, Proceedings of the summer school ROBUST'96, Lednice, September 1997 (J. Antoch and G. Dohnal, eds.), JČMF (Society of Czech Mathematicians and Physicists), 1997, In Czech, pp. 241–272.
- [15] Kôzaku Yosida, *Functional analysis*, 6-th ed., Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1980.
- [16] Robert M. Young, *An introduction to nonharmonic Fourier series*, Pure and Applied Mathematics, vol. 93, Academic Press, Inc., New York, 1980.

DOC. RNDR. VÍTĚZSLAV VESELÝ, CSC., DEPARTMENT OF APPLIED MATHEMATICS, MASARYK UNIVERSITY OF BRNO, JANÁČKOVO NÁM. 2A, 662 95 BRNO, CZECH REPUBLIC.

TEL.: +420-5-41321251/35, FAX: +420-5-41210337

E-mail address: vesely@math.muni.cz, URL: <http://www.math.muni.cz/~vesely>

REGRESSION WITH HIGH BREAKDOWN POINT

JAN ÁMOS VÍŠEK

ABSTRACT. The paper discusses in details various aspects of the point estimation, classic paradigm, Hampel's program and a new paradigm, including reliability of algorithm and its implementation, the role of accompanying procedures and of heuristics. A special attention is paid to the high breakdown point estimation, corresponding prejudices and misleading ideas. It reports theoretical results as well as practical consequences, describes a reliable algorithm for evaluation of *the least trimmed squares* and finally illustrates by the results of analysis of real data how powerful tool the estimators with high breakdown point can be.

Статья подробно обсуждает различные аспекты оценок в классической парадигме, в Гампелове и в новой парадигме, которая включает достоверность алгоритма и тоже имплементации, место сопровождающих процедур и геуристики. Специальное внимание посвящено оцениванию с высоким бодом отказания, к ним принадлежащие предпассудки и ошибочные представления. Она приносит теоретические результаты точно как и практические следствия. Описывает достоверный алгоритм для вычисления наименьших отрубанных квадратов и потом приносит как иллюстрацию результаты анализа реальных данных и показывает как мощным инструментом могут быть оценки с высоким бодом отказания.

INTRODUCTION AND NOTATION

It is sometimes claimed that nearly 95% of statistical applications are from regression analysis. Of course, such a claim has its roots in fact that not only linear regression is taken into account but also nonlinear models, analysis of variance, logit and probit (or generally probability) regression models, regression trees, over seemingly unrelated equations up to, maybe, cointegration analysis. However, it is not important how large the percentage of regression tasks really is, if it is 95% or “only” about 80 %. In any case, a large number of problems solved in the framework of regression analysis indicates that we should pay an attention to the following question:

What features of modern estimator of regression model we should ask for ? What accompanying equipment of the (robust) estimator is to include ?

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62F35; Secondary 62J99.

Key words and phrases. Point (robust) estimators, classic paradigm, Hampel's program, a new paradigm, high breakdown point, reliability of evaluation and implementation, diagnostics and sensitivity studies, diversity of estimates, export and FDI.

Research was supported by grant of GA AV ČR no. A 2075803.

The present paper tries to find an answer to the question by discussing related topics, starting with a bit of history over some well-known stories which appeared in developing robust analysis and finishing with an illustrative example.

The regression analysis is for the most of its users still connected with *the least squares* and of course with names of Adrien Marie Legendre (1805) and Carl Friedrich Gauss (1809). Although both Gauss as Legendre used the least squares for fitting models to data, it was Sir Francis Galton (1885) who gave the name to the branch. He used the least squares due to their simplicity in comparison with others methods, however it may be of interest that at least three statistical problems which would by today classified as regression analysis, were solved before Legendre and Gauss and what is even more interesting, they were solved by L_1 technique, see Galilei (1632), Boscovich (1757) and Laplace (1793).

It is well known that there was a discussion between Ronald Alyner Fisher and Francis Ysidor Edgeworth which method is to be used but further development confirmed Fisher's "solution" who preferred the least squares before L_1 -approach. Of course, the main reason was the fact that this method offered a "simple" formula for the estimator and hence it was feasible to compute it. As we shall see later, this is and will be probably one of key requirement for any estimator to be useful, namely an existence of a feasible and reliable algorithm (and better an available implementation of it). A lot of theoreticians in past considered "the process of establishing a new estimator" to be finished when the theoretical properties as the consistency, the asymptotic normality and representation were proved. Nowadays, it is very clear that it is not true. A "discovery" of a reliable algorithm, implementation of it, evaluating the (approximation to the) estimator is a reasonable time, verification that the algorithm gives really good results and developing of the "accompanying" procedures (as alternative estimator for the situations when collinearity or dependence between explanatory variables and disturbances appear and corresponding tests for recognizing that) are also very important. Without all this "equipment" the estimator is handicapped, if not disqualified at all. For further discussion see Vížek (2000 d).

First of all, let us introduce notations. Let N denote the set of all positive integers, R the real line and R^p the p dimensional Euclidean space. We shall consider for any $n \in N$ the linear regression model

$$(1) \quad Y_i = X_i^T \beta^0 + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

where $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)^T$ is the response variable, $\{X_i^T\}_{i=1}^n$ ($X_i \in R^p$) is a sequence of vectors of explanatory variables, β^0 is the "true" vector of regression coefficients and $\{e_i\}_{i=1}^n$ ($e_i \in R$) is a sequence of independent and identically distributed random variables, representing random fluctuations (or disturbances, if you wish; since the *disturbances* is shorter, we shall use it). The upper index "T" indicates transposition. (As implicitly follows from this notation, we shall assume all vectors to be column ones.) Finally, let us denote for any $n \in N$ by $X = (X_1^T, X_2^T, \dots, X_n^T)^T$ the design matrix and by $e = (e_1, e_2, \dots, e_n)^T$ the vector of disturbances. Then we can rewrite (1) into (sometimes) more convenient form

$$(2) \quad Y = X\beta^0 + e.$$

We have omitted an indication of the dimension of matrix and of vectors which would presumably unnecessarily burden the notation. Let us notice that in the case that the intercept is included in the model the first coordinates of all vectors X_i 's are assumed to be equal to 1. In other words, if the explanatory vectors X_i 's

are assumed to be random, they have degenerated first coordinate. There are of course, except of special cases, well-known reasons for inclusion of the intercept into the model. Let us realize that in the case when we decide not to include intercept into the model we implicitly assume, in some sense, an absolute character of data and in fact simultaneously give up otherwise natural requirement of scale- and regression-equivariance of the estimator of the regression coefficients. That is why we shall assume in the rest of paper that the intercept is included into the model (there is, of course, at least one other reason for it, for details see Víšek (1997 a, b).

THE LEAST SQUARES AND CLASSIC PARADIGMA OF ESTIMATION

Let us recall that the (ordinary) least squares estimator of β^0 is given by

$$\hat{\beta}^{(LS,n)} = \arg \min_{\beta \in R^p} \sum_{i=1}^n (Y_i - X_i^T \beta)^2 = \arg \min_{\beta \in R^p} (Y - X\beta)^T (Y - X\beta)$$

which yields

$$\hat{\beta}^{(LS,n)} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

where we have assumed that X is of full rank (since in the paper only cross-sectional data will be assumed, this is not substantial restriction of generality).

May be that it is only a statistical folklore but probably already Sir Francis Galton really knew a formula describing sensitivity of the least squares with respect to the deletion of one observation. It reads

$$\hat{\beta}^{(LS,n)} - \hat{\beta}^{(LS,n,\ell)} = \left(X^{\{\ell\}T} X^{\{\ell\}} \right)^{-1} X_{\ell} \left(Y_{\ell} - X_{\ell}^T \hat{\beta}^{(LS,n)} \right)$$

where $X^{\{\ell\}}$ is design matrix without the ℓ -th row. We shall need it later.

It is clear that one can propose an estimator in thousand ways but then it is necessary to prove that such estimator fulfills some collection of desirable properties. Again one may prefer these and other may ask for another features of estimator but we will presumably agree that there is a set of requirements which we all would ask for. Such collection may be called a *classic paradigm*. It has probably following items

- (unbiasedness),
- (\sqrt{n} -)consistency,
- (asymptotic) efficiency,
- asymptotic normality.

The round brackets around the word *unbiasedness* should indicate that for many estimators, especially for modern ones, we are not able to prove unbiasedness. Sometimes we even know that the estimator is not unbiased. In such a case we put up with asymptotic unbiasedness and/or even with consistency (only). A similar facts are indicated by the round brackets in the case of the consistency and the efficiency.

ROBUST APPROACH AND HAMPEL'S PROGRAM

The very beginning of robust studies are connected with name of John Tukey who in forties began studies of model for contamination of data. Although later there appeared some technical reports by him on problems with the contamination

of data, a substantial progress began in middle sixties and is associated with Peter J. Huber and Frank R. Hampel. The first one initiated an approach based on (nearly) strict application of classic statistical principles (as e. g. maximum likelihood or the least favorable pair of distributions) but in his framework instead of (parameterized) families of distribution functions, families of “neighborhoods” of families of distribution functions are taken into account. Converted commas around the word *neighborhoods* hints that we do not have in mind in this case neighborhoods in the topological sense (i. e. open sets) but some sets which contain a central model for disturbances, as an inner point. This central model is usually one of classic stochastic models, e. g. (standard) normal model (an example of such a *neighborhood* will be given below - see definition of min-max bias estimator).

Hampel’s approach is based on the interpretation of any estimator as a function(al) of empirical distribution function and the studies of properties of the estimator are performed then by means of the derivative along some trajectory in the space of all distribution functions. To clarify this let us give a simple example, using the most frequently used statistics, the *mean*. To make the explanation correct, we shall use somewhat more complex notation than it is usual.

First of all, let us realize that we “interpret” the *mean* as a sum of n numbers divided by n but, as the statistics, that is sum of n random variables divided by n . So let us consider a sequence of independent identically distributed random variables $\{Z_i(\omega)\}_{i=1}^{\infty}$, defined of course on a basic probability space (Ω, \mathcal{C}, P) . Then for any $\omega \in \Omega$ we have $\bar{Z}(\omega) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_i(\omega)$.

Secondly, let us recall what is the empirical distribution function for the considered sequence of random variables. Let us denote by $I_A(\omega)$ the indicator of the set A , i. e. $I_A(\omega) = 1$ if $\omega \in A$ and $I_A(\omega) = 0$ otherwise. We usually speak about empirical distribution function in the context of having at disposal of z_1, z_2, \dots, z_n , the *realization* of the first n random variable. Then we consider the empirical distribution function as a step functions, having all steps of magnitude equal to $\frac{1}{n}$ at the points z_1, z_2, \dots, z_n . We shall denote this empirical distribution function by $F_n(z)$. The *realization* z_1, z_2, \dots, z_n is nothing else than the value of the corresponding random variables at some point ω_0 , i. e. $z_1 = Z_1(\omega_0), z_2 = Z_2(\omega_0), \dots, z_n = Z_n(\omega_0)$. The empirical distribution function, now considered as a statistic, at any $\omega \in \Omega$ is given as

$$F_{(n,\omega)}(z) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I_{\{Z_i(\omega) \leq z\}}(\omega).$$

Finally, let us return to the *mean*. Since we have $z_1 = Z_1(\omega_0), z_2 = Z_2(\omega_0), \dots, z_n = Z_n(\omega_0)$, we obtain

$$\begin{aligned} \bar{Z}(\omega_0) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_i(\omega_0) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z_i \\ &= \int_{z \in R} z dF_n(z) = \int_{z \in R} z dF_n(z, \omega_0). \end{aligned}$$

The verification of the equality needs a few second, if we meet with such arguments (and notation) for the first time but principally is straightforward.

The last equality shows that $\bar{Z}(\omega) = T(F_{n,\omega}(z))$, i. e. the empirical mean can be interpreted as a functional T of the empirical distribution function. A theoretical counterpart of it is the fact that the “theoretical” mean is the same functional T of the theoretical distribution function, say F . Hampel’s approach then employs

derivatives of functionals (as Fréchet or Gâteaux) to study the properties of given estimator.

To make Hampel's approach applicable for a wide class of estimators we usually do not ask for existence of Fréchet or Gâteaux derivative but we try to find derivative of corresponding functional along such trajectories which go from the central model to the distribution function degenerated at a point $z \in R$. In other words, the *influence function* is defined as

$$IF(z, F, T) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{T((1-h)F + h \cdot z) - T(F)}{h}$$

at the points where the limit exists. After all, as the name of the function hints, the *influence function* indicates an influence of one additional observation, when we put it at point z , on the value of the estimate. That is why some other characteristics of robust estimators are defined utilizing it.

Nowadays the offer of robust procedures is nearly infinite. (Of course, we speak now about theoretical results, not about available implementations.) But it is still possible to claim that M -, L - and R -estimators are the most popular classes. The first inherited the name from the *maximum likelihood estimators* since the most of M -estimators are similar to the *maximum likelihood estimators*, hence *Maximum-likelihood-like estimators*. The second class is based on *Linear combination of order statistics* and the third one employs the *Rank statistics*. Since in what follows we shall need M -estimators, let us recall that they are given by

$$(3) \quad \hat{\beta}^{(\psi, n)} = \arg \min_{\beta \in R^p} \sum_{i=1}^n \rho(Y_i - X_i^T \beta)$$

where the superindex ψ indicates that the derivatives of ρ (which stays in the normal equations which are in turn used for finding the value of M -estimator) is just ψ .

And quite unexpectedly there appeared one problem which was not felt so acute when the classic, we mean maximum likelihood, moment estimators, etc., were used. The problem was that the robust estimators were not generally scale- and regression-equivariant. Since the requirements of the scale- and regression-equivariance represents the fact that it should be irrelevant how the axes and units of measurement were selected, they are not only very natural but from the application point of view nearly unavoidable. The estimators which does not possess these properties are seriously handicapped in the applications.

The statisticians were aware of it but they (tacitly) believed that the studentization of residuals (in the case of robust estimators of regression coefficients) by means of a preliminary scale-equivariant estimator of standard deviation is the remedy. It appeared that the requirements on the estimator of standard deviation have to be enlarged, namely that it must be also regression-invariant - to reach scale- and regression-equivariance of the estimator of regression coefficients, see Bickel (1975) or Jurečková & Sen (1993). In other words, (3) has to have the form

$$\hat{\beta}^{(\psi, n)} = \arg \min_{\beta \in R^p} \sum_{i=1}^n \rho\left(\frac{Y_i - X_i^T \beta}{s}\right)$$

where s is an estimate of standard deviation which is scale-equivariant and regression-invariant. However it is not very easy to find (theoretically) such estimator, leaving aside that the evaluation would be complicated. Nowadays there are only a few proposals of such estimators, see again Jurečková & Sen (1993) or Víšek (1999a) (the latter even without a theoretical background, being still only implemented and

numerically tested). So it seems that it is preferable to employ the robust estimators which are scale- and regression-equivariant, without any studentization. We shall employ in the rest of this paper two such estimators, having moreover high breakdown point.

The study of the influence function led to establishing some characteristics of robust estimator. Later they were “collected” into a list which became known as *Hampel’s program*. It may be viewed as an enlargement of *classic paradigm*. It reads

- acceptably low *gross-error sensitivity*,
- maximal attainable *efficiency*,
- not very large *local shift sensitivity*,
- preferably *finite rejection point*,
- as high as possible *breakdown point*.

Before giving definitions and an explanation of items of *Hampel’s program* let us remark that the word “enlargement” is of course meant in a somewhat vague way. E. g. for most of robust estimators we are not able to prove unbiasedness. As we have already argued, they are defined (typically) by an extremal problem and hence there is not usually any (simple) formula for them. It makes a proof of unbiasedness nearly impossible. We usually put up with consistency.

DEFINITION 1. *Gross-error sensitivity is given as*

$$(4) \quad \gamma(T, F) = \sup_{z \in R} |IF(z, F, T)|.$$

An idea which is behind the definition of the *gross-error sensitivity* is given by relation

$$(5) \quad \sqrt{n} \left(\hat{\beta}^{(\psi, n)} - \beta^0 \right) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n IF(z_i, F, T) + \text{remainder term}$$

which can be derived for M -estimators, see Hampel et al. (1986), p. 85. So $IF(z_i, F, T)$ is a contribution of the observation z_i to the value of the estimator. On the other hand, we may consider the *contribution of the i -th observation* to be the *sensitivity of the estimator* to the i -th observation. On the other hand, as the *sensitivity of the estimator* to the i -th observation one usually considers the value of the change of estimator when the i -th observation is deleted from data.

Does it coincide with the idea which is “behind” the gross-error sensitivity?

The answer is: **Sometimes yes sometimes no.**

The asymptotic representation of the change of M -estimator of regression coefficients is generally given by

$$(6) \quad n \left(\hat{\beta}^{(\psi, n)} - \hat{\beta}^{(\psi, n, \ell)} \right) = -\kappa^{-1} Q^{-1} X_\ell \psi \left(\frac{Y_\ell - X_\ell^T \hat{\beta}^{(\psi, n)}}{\hat{\sigma}_n} \right) + \mathcal{R}_n \text{ as } n \rightarrow \infty$$

where

$$\kappa = \hat{\sigma}_n \mathbb{E} \psi' \left(\frac{e}{\hat{\sigma}_n} \right) + \sum_{k=1}^s f(\sigma r_k) [\psi(r_k+) - \psi(r_k-)]$$

with r_1, r_2, \dots, r_s being points of discontinuity (if any) of corresponding ψ -function and

$$\mathcal{R}_n = \left(W\left(\sum_{i=1}^n \mu_{i1}^{(j)}(n, t, u)\right), W\left(\sum_{i=1}^n \mu_{i2}^{(j)}(n, t, u)\right), \dots, W\left(\sum_{i=1}^n \mu_{ip}^{(j)}(n, t, u)\right) \right).$$

where W denotes Wiener process and $\mu_{ik}^{(j)}(n, t, u)$ some appropriate stopping times, see Víšek (1996 a). The last term of (6) is present in the formula (6) in the case when ψ -function is discontinuous.

Before proceeding further let us add that the influence function is in fact linearly proportional to ψ -function which generated respective M -estimator. It means that (5) can be rewritten as

$$(7) \quad \sqrt{n} \left(\hat{\beta}^{(\psi, n)} - \beta^0 \right) = \frac{C_n^{(2)}}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n X_i \psi(z_i) + \text{remainder term}$$

(notice that parameters F and T of the influence function (seemingly) disappeared; it is due to fact that the influence function of M -estimator does not depend of the underlying stochastic model and T is in fact indicated by ψ). It means that in the case when ψ -function is continuous (5) (or if you wish, (7)) and (6) give the same indication of the magnitude of contribution of observation z_i to the value of estimator. However, in the case when ψ -function is discontinuous (5) and (6) do not “agree”, i. e. the change of the estimate when we delete one point from data may be much larger than the gross-error sensitivity indicates. What is however much worse, is the fact that we cannot control, by an upper bound of the absolute values of the discontinuous ψ -function, the maximal value of the norm $\left\| n \left(\hat{\beta}^{(\psi, n)} - \hat{\beta}^{(\psi, n, \ell)} \right) \right\|$, for more details see Víšek (1998 c). **It hints that in the case when¹ we decide to employ M -estimator, it is preferable to use a continuous redescending ψ -function.** The last requirement, namely that ψ -function should be redescending, is given by the fact that the M -estimators generated by redescending ψ -functions are able to cope, at least partially, with leverage points.

Of course, the second point of Hampel’s program has no definition but it is nearly evident that it means. First of all, let us recall once again that usually we have at hand no formula for robust estimator, only an extremal problem which defines the estimator. So to prove, that the estimator in question, is the best one among all estimators for all distribution from some Huber model of contaminacy (of some central classic stochastic model), is nearly impossible. So, if we define efficiency, as it is usually done, as the ratio of (asymptotic) variances, e. i. ratio of that minimal attainable variance and the variance of the estimator in question, it is not usually possible to evaluate it. That is why we usually only estimate efficiency in more or less vague way, see Huber (1981).

DEFINITION 2. *The local shift sensitivity is given as*

$$(8) \quad \sup_{z, v \in R} \left| \frac{IF(z, F, T) - IF(v, F, T)}{z - v} \right|.$$

The idea which inspired the definition of *local shift sensitivity* is transparent (and moreover it is hinted by its name). It of course indicates how the estimator reacts on (a large number of) small changes of observations, so, except of others, it also

¹Despite of all what was said about the difficulties with a preliminary estimate of scale for studentization of residuals.

describes how the estimator takes into account that we do not measure the variables in question “precisely”. Let us realize that except of discrete variables all others are always measured as rounded to that level of preciseness which is given by smallest amount of given entity which our instrument can still measure.

DEFINITION 3. *The rejection point is defined as*

$$(9) \quad \inf_{z \in R} \{ |z| : \forall(v, |v| \geq |z|) : IF(v, F, T) = 0 \}.$$

We have already mentioned that it is preferable, if employing M -estimators, to use redescending ψ -function. The requirement that they are to be directly zero, instead of (e. g.) converging (steeply) to zero, is somewhat, more or less of technical character since it is easier to cope with such estimators from both point of views, theoretical and evaluatory.

BREAKDOWN POINT

The most prominent and probably the most misunderstood item of Hampel’s program is the *breakdown point*.

Let us denote Prohorov distance by π .

DEFINITION 4. *The breakdown point of an estimator T_n of the parameter $\theta \in \Theta$*

$$\varepsilon^* = \sup_{0 \leq \varepsilon \leq 1} \{ \varepsilon : \exists K(\varepsilon) \subset \Theta, K(\varepsilon) \text{ compact} :$$

$$\pi(F, G) < \varepsilon \Rightarrow G(T_n \in K(\varepsilon)) \rightarrow 1 \text{ for } n \rightarrow \infty \}.$$

The idea which led to the definition of *breakdown point* is easy to trace out. It says that we try to learn how high level of contamination data could be, without breaking a “reasonable” behaviour of the estimator. The mathematical formalization of course seems at the first glance somewhat strange since it “reflects” reasonable behaviour as *not escaping from a (fixed) compact set*. As however the definition is given in an asymptotic form, it is correct. For finite samples it gives the ratio of “good” and “bad” observation which does not imply explosion or implosion of the estimator. Let us add that it is usual to give the value of breakdown point in “%”, not as it would follow from definition as a number from the interval $[0, 0.5]$.

As an example of estimators, even from the classic statistics, which possess the lowest and highest possible breakdown point are *mean* and *median*. An arbitrarily large change of the former may be caused by one observation placed sufficiently far away from other, however the latter can be substantially shifted only by moving at least half of observations. On the other hand, just opposite situation is what concerns the *local shift sensitivity*, which is the lowest for the median and the highest for the mean.

ENLARGING HAMPEL’S PROGRAM

As we have already mentioned the *breakdown point* is one of the most discussed points and, as from these discussion follows, probably the most misunderstood characteristics of robust estimators. After all, an example of misunderstanding the behaviour of the estimators with high breakdown point, will be given below. Hence before discussing properties of one of the estimator of regression coefficients with possibly high (in fact even controllable) breakdown point we are going to make

an excursion into the history of such estimation and evaluation of corresponding estimators.

What is really worthwhile of our attention is the fact that building the theory of robust statistics was always accompanied by “an empirical” studies made mostly on some simulations, see e. g. Andrews et al. (1972), Huber (1973), Lax (1975), Schweingruber (1980), Ruppert & Carroll (1980) and some papers in *Directions in Robust ...* What is however sorrowful is the fact that most of the programs which were used for these empirical studies were not included into any commercially available statistical package, so that there is evident lack of (reliable) implementations of efficient algorithms.

We have already discussed the *mean*, with zero breakdown point, and the *median*, with 50% breakdown point. In the regression framework a lot of estimators (of model) were established nevertheless no with very high breakdown point. Moreover the result of Maronna (1976) (see also Maronna et al. (1979)) brought a disappointment since it appeared that the breakdown point of M -estimators cannot exceed $\frac{1}{p}$. On the other hand, the existence of the estimator of location having breakdown point as high as 50% was a challenge for statisticians to find also in the regression framework an estimator with such a high breakdown point (or to prove that it is not possible). The challenge can be viewed at least from two standpoints. The first one is to interpret it just as a purely mathematical challenge to reach a boundary of possibility (realize please that 50% breakdown point is the maximal possible, in some sense). The second standpoint is to see the problem of reaching 50% breakdown point as the problem inspired by a hope that such an estimator (even probably losing a lot of efficiency) can hint what is the *true model behind the data*. And since the idea of a *true model behind the data* implicitly assumed that such a *true model* is independent from contamination of data (any under 50%), the high breakdown point was believed to be something which guarantees stability of estimator with respect to nearly any change and/or damage of data.

Of course, this hope was tacit from the very beginning because the idea of some *true*, “objectively existing” *model behind the data* is hardly justifiable and hence misleading at all. Nevertheless, a disappointment which arrived when it appeared that the estimators with high breakdown point work in other way than it was wrongly and senselessly assumed is still at the roots of prevailing part of criticism of the estimators with high breakdown point. We shall return to this discussion later when we will be able understand better the arguments. Now let us perform the promised excursion into the history.

As a winner of the contest for the construction of an estimator with 50% breakdown point is usually assumed the *repeated median* by Siegel (1982), although already in Hampel (1975) can be found an idea which led to *the least median of squares*, (mainly) for the framework of location parameter in details studied in Rousseeuw (1984). We shall not recall the definition of the *repeated median* since it (the definition as well as the estimator per se) is complicated and probably it was never implemented, maybe not even for the experimental purposes. Fortunately, a bit later appeared *the least median of squares* by Peter J. Rousseeuw. The definition in this case is quite transparent.

DEFINITION 5. *The least median of squares is given as*

$$(10) \quad \hat{\beta}^{(LMS,n)} = \arg \min_{\beta \in R^p} \text{med} \{r_i^2(\beta)\}.$$

This is an original definition which gave, for the evident reasons, the name to the estimator. Immediately however it was generalized on *the least h-th order statistic of squared residuals* but this name is not used and the old one overlived. To be able to introduce it, let us denote for any $\beta \in R^p$ the i -th residual by $r_i(\beta) = Y_i - \sum_{j=1}^p X_{ij}\beta_j$ and the order statistics of squared residuals by $r_{(i)}^2(\beta)$, it means that

$$r_{(1)}^2(\beta) \leq r_{(2)}^2(\beta) \leq \dots \leq r_{(h)}^2(\beta) \leq r_{(h+1)}^2(\beta) \leq \dots \leq r_{(n)}^2(\beta).$$

Now, a modified definition of $\hat{\beta}^{(LMS,n)}$ reads as follows.

DEFINITION 6. For an $h, \frac{n}{2} \leq h \leq n$ the least median of squares is given as

$$(11) \quad \hat{\beta}^{(LMS,n,h)} = \underset{\beta \in R^p}{\operatorname{arg\,min}} r_{(h)}^2(\beta)^2.$$

As it was already noted the estimator was studied in details for location parameter in Rousseeuw (1984) and for regression framework in Rousseeuw & Leroy (1987). This reference contains also a short passage devoted to *the least trimmed squares*. They are defined as

DEFINITION 7. For an $h, \frac{n}{2} \leq h \leq n$ the least trimmed squares are given as

$$(12) \quad \hat{\beta}^{(LTS,n,h)} = \underset{\beta \in R^p}{\operatorname{arg\,min}} \sum_{i=1}^h r_{(i)}^2(\beta)^2.$$

Both $\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$ as well as $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ have for $h = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + \lfloor \frac{p+1}{2} \rfloor$ the highest attainable breakdown point (for the scale- and regression-equivariant) estimators, namely $\varepsilon^* = (\lfloor \frac{n-p}{2} \rfloor + 1) / n$. Later there appeared a lot of estimators of regression coefficients with high breakdown point as *S – estimators, minimum distance estimators, minimum volume estimators, minimum determinant estimators, min-max bias estimators*, etc., to name at least a few among many others. The last ones, namely *min-max bias estimators* were studied in Martin et al. (1989). Let us stop for a while with them.

Instead of giving a definition of the *min-max bias estimators*, let us try to describe them in words, since it will clarify immediately the idea which led to their proposal. We shall keep the framework for explanation as simple as possible.

So, let us consider a probability measure on the real line, say in a form of distribution function F , e. g. standard normal distribution $\mathcal{N}(0, 1)$. Denote by \mathcal{H} the set of all distribution functions on the real line. Further, for a fix $\delta \in [0, 1]$ denote

$$\mathcal{F}_{(F,\delta)} = \{G, G(x) = (1 - \varepsilon) \cdot F(x) + \varepsilon \cdot H(x), H \in \mathcal{H}, 0 \leq \varepsilon \leq \delta\}.$$

Moreover, denote by $\mathcal{B} = \{\hat{\beta} : \mathbb{E}_F \hat{\beta} = \beta^0\}$. Now, consider a fix estimator, say $\hat{\beta}^{(1)} \in \mathcal{B}$, and find the distribution function $G^{(\hat{\beta}^{(1)})} \in \mathcal{F}_{(F,\delta)}$ for which the bias of the estimator $\hat{\beta}^{(1)}$ from β^0 is maximal. It means that

$$G^{(\hat{\beta}^{(1)})} = \underset{G \in \mathcal{F}_{(F,\delta)}}{\operatorname{arg\,max}} \left\| \mathbb{E}_G \hat{\beta}^{(1)} - \beta^0 \right\|$$

and put (maximal bias) $MB(\hat{\beta}^{(1)}) = \left\| \mathbb{E}_{G^{(\hat{\beta}^{(1)})}} \hat{\beta}^{(1)} - \beta^0 \right\|$. Finally, put

$$(13) \quad \hat{\beta}^{(MinMaxBias)} = \underset{\hat{\beta} \in \mathcal{B}}{\operatorname{arg\,min}} MB(\hat{\beta}).$$

DEFINITION 8. The estimator given in (13) is called *min-max bias estimator*.

Of course, it is not simple to evaluate such estimator but in special cases it is possible. Since under some technical conditions they are equivalent with S -estimators, we may find them as estimators which minimize scale (of residuals). It means, except of others that we need not to specify $\mathcal{F}_{(F,\delta)}$, \mathcal{B} . etc., we just only minimize scale of residuals. The following picture shows an example of their work (notice please that except of data depicted by crosses there is one datum at the origin, given by a small circle).

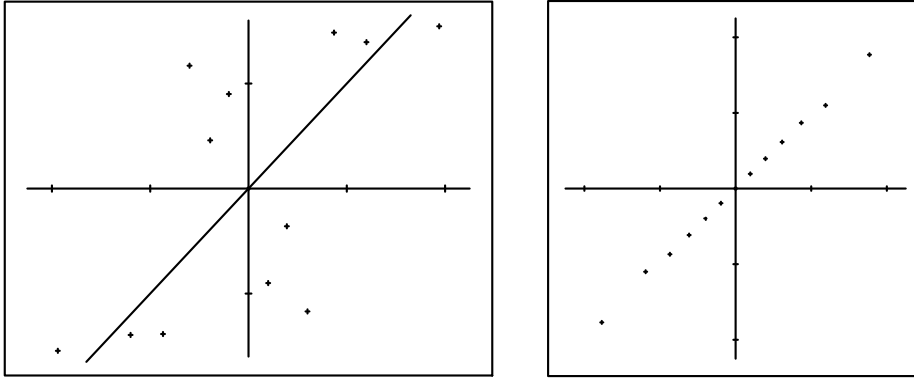


Figure 1 “Pure” data - S -estimate and normal plot of residuals.

The same or only indiscriminately different estimate of model we obtain by the least trimmed squares, by the least median of squares, by M -estimator with Hampel’s ψ -function etc.

Now, let us shift the datum given by circle (at the origin) somewhat right and low

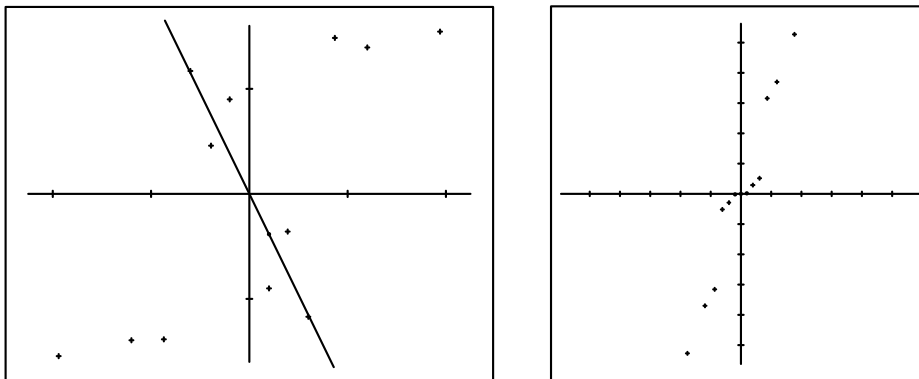


Figure 2 “Contaminated” data - S -estimate and normal plot of residuals.

(Notice the different scale of the right picture of Figure 1 and 2)

A large change of S -estimate quite contrasts with the other mentioned estimates, namely the least trimmed squares, the least median of squares and M -estimate with Hampel’s ψ -function, which remain nearly the same as they were for data given at Figure 1. The normal plots of these estimates also remain nearly as the plot given in the right hand side of Figure 1 while the normal plot of S -estimate (given on the right hand side of Figure 2) is quite unsatisfactory. All these facts hint that for the “contaminated” data a “true” model (or if you wish, reasonable model) is still

that one given in at the left hand side of Figure 1. But it means that min-max bias estimate is considerably biased, much more than the other estimates.

What is a reason for it ?

The reason is simple. The theory built up for min-max bias estimator in Martin et al. (1989) assumed that the regression model is unknown but fix, let us say just “true”, and that the distribution function belongs in $\mathcal{F}_{(F,\delta)}$ for some F and $\delta \in [0, 1]$. In fact δ was just the only restriction which was prescribed *a priori*. But when the estimator was applied on data it “took” into account several, let us stress, very different regression models and according to the corresponding sets of residuals made a conclusion about the underlying regression model and the distribution function of disturbances. So Martin et al. (1989) were betrayed by the assumption (practically always (unconsciously) accepted by most of us when applying any statistical method) that “behind the data” is an *objectively existing, unique true model* and if we could increase number of observations above all limits, we inevitably arrive at it. And that *objectively existing true models* is hence included - or imprint, if you wish - (in a strange way ?) into the world around us. The problems and traps which such an approach implicitly contains were already known to Emmanuel Kant and in modern philosophy of mathematical modeling they were discussed by Ilya Prigogine and Isabella Stengers, see e. g. (1977) or (1984).

Our example demonstrates that S -estimators assumes quite different “true” model from the “true” models assumed by other estimators (for “contaminated data”, i. e. for data with one datum shifted). And for this model, S -estimator gave a model which is minimally biased from “its true”. It may seem strange (at the first glance) but as we shall see later it may be even formalized and then we conclude that for one, fix sequence of data two (strongly) consistent estimators may give quite different model for any size of data. Nevertheless, the conclusion from just closed discussion is that (of course) any new proposal of an estimator is to have a heuristic background, to be easier acceptable in applications, **but** the heuristics are to be well thought-out, i. e. all pros and cons are to be taken into account to arrive at heuristics which really work (especially for finite samples).

We have already mentioned how important is for any new (robust) estimator a reliable algorithm for its evaluation. Of course, it is much better, if there is an available implementation of this algorithm. This “feature” of estimator was “underrated” in the past due to the fact that there was usually available a formula for the estimator. Of course, even then we may have some problems with an implementation, see e. g. how much effort was spent to solve in a reliable way the problem of evaluating the inverse matrix in the formula for the least squares, see Antoch & Vorlíčková (1992).

We have also recalled that there is still a lot of misunderstandings or misbeliefs connected with the robust methods. One very deeply rooted but completely misleading was already discussed, namely erroneously assumed a large loss of efficiency. Another one is a tacit belief that the estimators with high breakdown point are stable under any circumstances. In other words, statistical folklore still assumes that since the estimators with high breakdown point are able to cope with a high level of contamination of data, it would not change too much in any small change of data.

Let us give an example which will illustrate the problems discussed in last two paragraphs and which will indicate how to cope with them. Previous to the example let us recall once again that the robust estimators are defined typically as a solution of an extremal problem. Since in the most cases we are not able to evaluate precise

solution, we put up with a (tight) approximation. We shall return to this problem in details later.

T. P. Hettmansperger & S. J. Sheather published in 1992 results of processing data (originally studied by Mason et al. (1989)) recording dependence of number of engine knocks on the spark timing, on the air/fuel ratio, on the intake temperature and on the exhaust temperature. They reported that when they included the data into memory of PC, they wrote wrongly 15.1 for the value of air/fuel ratio of the second observation rather than the correct value 14.1. (In what follows we shall call data with the wrong value 15.1 as *damaged data* and the data with the correct value 14.1 as *correct data*.) When they noticed the error they recalculate the results with an expectation that the new results would differ from the previous ones slightly. Let us add that they used $\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$, i. e. the estimator with (asymptotically) 50% breakdown point. However, to their great surprise, the change of values of the estimate of regression coefficients was large, see next table. Unfortunately, they did not write by which program (i. e. by which algorithm and by which implementation) they evaluated results. Nevertheless the results, they gave in paper, were up to all given decimal digits the same as the results, the program PROGRESS (see Rousseeuw & Leroy (1987)) returns. (We are grateful to Peter Rousseeuw and Annick Leroy who sent us a diskette with fortran source of PROGRESS, for the possibility to use it.) The same values gives also S-PLUS (version 3.2 which was available at those days; I am afraid that nothing changed). Both programs are based on algorithm which can be called *resampling algorithm*. The algorithm randomly selects an elemental set of p points, then it fits a regression plane to them and then performs (repeatedly) its shift and rotation to decrease the value of the minimized order statistic. This step of program has its justification in the geometric characterization of $\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$ which was found by Joss & Marazzi (1990). It says that at least $p+1$ points are at the same distance from the regression plane, given by any solution of (11). So reaching that requirement this step of program is stopped and the whole procedure, of selecting another elemental set of p points, is repeated. Of course, the *LMS* criterion, see (11), is monitored and at the end, given by a stopping rule (e. g. by performance of *a priori* given number of repetitions), program returns as estimate that vector of regression coefficient for which the criterion was minimal.

Table 1
*Estimates of regression coefficients for Engine Knock Data
 given in Hettmansperger & Sheather (1992)*

	Estimates for correct data	Estimates for damaged data
Intercept	30.08	-86.50
Spark	0.211	4.586
Air/Fuel	2.905	1.209
Intake	0.555	1.468
Exhaust	-0.009	0.069

By a stroke of good luck, at the same time appeared an algorithm based on a dual version of linear programming problem and corresponding form of simplex method, later described in Boček & Lachout (1995) (let us call it *BL-algorithm*). Firstly, *BL-algorithm* is (many times) quicker than the *resampling algorithm*. Secondly, we did not yet find any set of data for which it gives larger value of the minimized order statistics than the other methods, see Víšek (1996 b) and (2000 a). We would like to express our gratitude to Pavel Boek who is the author of the implementation for an offer to use his software. In the next table results of both algorithms are gathered. (The abbreviations are nearly self-explaining, nevertheless let us say that $\hat{\beta}_R^{(LMS,n,h)}$ is $\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$ evaluated by PROGRESS while $\hat{\beta}_{BL}^{(LMS,n,h)}$ is $\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$ yielded by Boček's implementation; finally $r_{(h:n)}^2$ is h -th order statistics among the squared residuals, $h = 11$).

Table 2
*Estimates of regression coefficients given by
 resampling algorithm and BL-algorithm*

Estimator	Estimates for correct data		Estimates for damaged data	
	$\hat{\beta}_R^{(LMS,n,h)}$	$\hat{\beta}_{BL}^{(LMS,n,h)}$	$\hat{\beta}_R^{(LMS,n,h)}$	$\hat{\beta}_{BL}^{(LMS,n,h)}$
Intercept	30.08	30.04	-86.50	48.38
Spark	0.211	0.144	4.586	-0.732
Air/Fuel	2.905	3.078	1.209	3.393
Intake	0.555	0.460	1.468	0.195
Exhaust	-0.009	-0.007	0.069	-0.011
$r_{(h:n)}^2$	0.103	0.053	0.328	0.203

So, the conclusion is that “Hettmansperger-Sheather effect” was caused by poor algorithm they used (and which was not yet abandon). It again underlines the importance of availability of the *reliable algorithm* which is of course acceptably quick (or not very slow, if you wish) to evaluate the estimates in a reasonable time. The last requirement is also very important because when applying robust regression we need to “experiment”. As we shall see later by the promised example we need to evaluate the estimates for various sets of explanatory variables, as it is also usual in the classic least squares analysis, but also for various h 's, i. e. for various numbers

of observations which the least median of squares or the least trimmed squares take into account. Let us add that for solution of the corresponding extremal problems (which defines the robust estimators) the routine methods for finding the extrema are not suitable due to the large number of local minima in the extremal problem of type (11) or (12). Moreover the extrema are sometimes deep sometimes rather flat. It means that in fact for every single robust estimator we have to find a tailored approach which consists of two steps. Firstly, it is necessary to invent a new algorithm (i. e. a trick) for finding an approximation to the theoretical value of the estimator in question. Secondly, another trick has to be found for checking that the algorithm gives really tight approximation.

But it is not yet the end of story. Even when we have verified that a new algorithm gives good approximation to the theoretical solution of given extremal problem, we should equip the estimator by some accompanying procedures. As we have already briefly mentioned, it is clear that similarly as in the classic analysis performed by the least squares we can meet with collinearity (hence we need a “ridge” version of the estimator in question), we may get into a situation when the disturbances are dependent with the explanatory variables (and hence we need a version of the method of instrumental variables for given robust estimator and of Hausman test), we can obtain $AR(p)$ structure of residuals (and hence we need a version of Durbin-Watson statistics for given estimator and a “remedy”, i. e. some version of Prais-Winstone or Cochran-Orcutt transformations) etc. It is sufficient to look into a monograph on classic regression to learn how much accompanying procedures the (ordinary) least squares have to be able to cope with (any ?) situations in which some assumptions are distorted (of course, the handicap of such monographs is that they assume distortion of all assumptions except of the assumption of the (strict) normality). Nowadays, there is not any robust estimator fully equipped by such accompanying procedures. Moreover, it seems that there is not (even) a systematic research in that field (unfortunately).

But it is not yet the end of story. Accomplishing all these steps, we should “sell” new estimator to users (who are conservative and not too much eager to use anything new, at least up to a moment when old methods evidently fail). And that is task for the heuristics which initiated the proposal of the estimator. It is to be so easy acceptable that it should seem to user that the estimator is as “natural” as the least squares (converted commas of course indicates that there is nothing natural on the least squares except of the fact that they are intrinsically connected with Euclidian geometry which we have accepted as natural). Clearly, a few last sentences somewhat played down the role of the heuristics. In fact, its role is, of course, important also for the following reason. As it was already said, most of our results are of asymptotic type. So the heuristic is inevitably also a support that the estimator will work for the finite samples in an appropriate way, too.

It implies that we should establish a new paradigm (according to present level of knowledge) to

- *consistency*,
- *asymptotic normality*,
- reasonably high *efficiency*,
- *scale- and regression-equivariance*,
- quite low *gross-error sensitivity*,

- low *local shift sensitivity*,
- preferably *finite rejection point*,
- controllable *breakdown point*,
- available *diagnostics, sensitivity studies and accompanying procedures*,
- existence of an *algorithm* (better, of an *implementation with acceptable complexity and reliability of evaluation*),
- an efficient and acceptable *heuristics*.

THE LEAST TRIMMED SQUARES - THE THEORY

Now we are going to present somewhat more details about the least trimmed squares $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$, then to describe an efficient algorithm for the evaluation and employing the algorithm to illustrate and then to discuss some, at the first glance, strange effect of (high breakdown point) estimation. Finally, we give an example demonstrating the employment of $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ in the applications. To be able to do it we will need some assumptions.

First of all, denote $G(z)$ the distribution function of e_1^2 . For some $\alpha \in [0, \frac{1}{2})$, u_α^2 will be the upper α -quantile of $G(z)$, i. e. $P(e_1^2 > u_\alpha^2) = 1 - G(u_\alpha^2) = \alpha$. Further, denote by $[a]$ the integer part of a and for any $n \in N$ put $h_n = [(1 - \alpha)n]$. Finally, for an arbitrary sequence $k = \{k_i\}_{i=1}^\infty$ ($k_i \in \{0, 1\}$) such that $\sum_{i=1}^n k_i = h_n$ put $Q_n(k) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n k_i X_i X_i^T$. The promised assumptions are as follows.

Assumptions A. The sequences $\{X_i\}_{i=1}^\infty$ ($X_i \in R^p$) is a fix sequence of nonrandom vectors from R^p . Further, the sequence $\{e_i\}_{i=1}^\infty$ ($e_i \in R$) is a sequence of independent identically distributed random variables. The distribution function $F(z)$ of random fluctuation e_1 is symmetric and absolutely continuous with a bounded density $f(z)$. The density is positive on $(-\infty, \infty)$ and has bounded derivative. Moreover,

$$(14) \quad \sum_{i=1}^n \|X_i\|^3 = \mathcal{O}(n),$$

$$(15) \quad \mathbb{E}e_1^2 = \sigma_{e_1}^2 \in (0, \infty).$$

Uniformly with respect to k (i. e. uniformly with respect to any sequence $k = \{k_i\}_{i=1}^\infty$)

$$(16) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(k) = Q$$

where Q is a regular matrix (and convergence is of course assumed coordinatewise).

REMARK 1. The assumption (16) is somewhat stronger than the usually accepted

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i X_i^T = Q.$$

Since however we cannot guarantee which indices will be selected by $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ into the subsample which is finally taken into account, it has to be given in this form. It is easy to give an example of data demonstrating that without (16), $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ need not be consistent.

REMARK 2. *It follows from Assumptions A that we shall consider the setup with nonrandom carriers (or explanatory variables, if you wish). The theory for the setup with random carriers requires some modifications what concerns the assumptions (orthogonality and sphericity conditions), see Víšek (1999 b). However, what concerns the results comparing those in Víšek (1999 b) and those given in this paper, one concludes that they are nearly identical.*

The absolute continuity of F seems at a first glance rather strong assumption. However, let us realize that firstly the (ordinary) least squares are optimal (among all estimators) only under *strict* normality of random fluctuations e_i 's. The argument that without normality the least squares are still optimal among all linear estimators is true but misleading, since the restriction on the class of linear estimators is drastic. Secondly, any study of order statistics assumes the absolute continuity of the underlying distribution, since without this assumption we have got into some technical troubles as the probability that two order statistics attain the same value need not be zero.

Also assumption that the density is bounded and has bounded derivative everywhere may be considered somewhat strong. As we shall see in the next, we shall need (except of other) to estimate the probability

$$(17) \quad P\left(u_\lambda \leq e_i \leq u_\lambda + n^{-\frac{1}{2}}x_i^T t\right)$$

(of course for the case when $x_i^T t > 0$). Then it is clear that we need some assumptions on $\|X_i\|$ and on $F(z)$. If we assume that for some $K < \infty$

$$(18) \quad \sup_{i \in N} \|X_i\| < K,$$

it is evidently sufficient to assume existence of bounded derivative of density in the neighborhood of u_λ and of $-u_\lambda$. However, the assumption (18) is considered by some statisticians as inadmissibly restricting while they are willing to accept the assumptions of type (14). Then of course, the norms $\|X_i\|$, $i = 1, 2, \dots, n$ are not uniformly bounded and hence to be able to achieve the equality $P(u_\lambda \leq e_i \leq u_\lambda + n^{-\frac{1}{2}}x_i^T t) = \|X_i\|\mathcal{O}(n^{-\frac{1}{2}})$, we need some assumption(s) about $F(z)$ to be fulfilled on the whole support of $F(z)$. Of course, under (18) as well as under (14), it is possible to estimate probability (17), nevertheless in the former case it is straightforward while in the latter it requires rather involving considerations. Moreover, Lemma A.1 shows that from the practical point of view, there is not considerable difference between (14) and (18). Finally, results in Chatterjee, Hadi (1988), Zvára (1989) or Víšek (1996 b), (1997 a, b) (2000 b) indicate that in the case when the norm of some explanatory vectors is out of control, we cannot guarantee anything about subsample sensitivity (see also Theorem 3 below). That is why we shall also assume an alternative version of assumption .

Assumptions B. *The sequences $\{X_i\}_{i=1}^\infty$ ($X_i \in R^p$) is a fix sequence of nonrandom vectors from R^p . Moreover, (16) holds for some regular matrix Q . Further for any $n \in N$*

$$\max_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p} |X_{ij}| = \mathcal{O}(1).$$

The sequence $\{e_i\}_{i=1}^\infty$ ($e_i \in R$) is a sequence of independent identically distributed random variables with absolutely continuous distribution function $F(z)$. There are

neighbourhoods of u_α and of $-u_\alpha$ in which the distribution $F(z)$ has a bounded density $f(z)$ which is positive and has bounded derivative. Finally, (15) holds.

THEOREM 1. *Let Assumptions \mathcal{A} or \mathcal{B} hold. Then $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ is \sqrt{n} -consistent, i. e.*

$$\sqrt{n} \left(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)} - \beta^0 \right) = \mathcal{O}_p(1) \quad \text{as } n \rightarrow \infty.$$

THEOREM 2. *Let Assumptions \mathcal{A} or \mathcal{B} be fulfilled and $(1-\alpha) - u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha)) \neq 0$. Then*

$$\begin{aligned} \sqrt{n} \left(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)} - \beta^0 \right) &= n^{-\frac{1}{2}} Q_n^{-1} [(1-\alpha) - u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha))]^{-1} \times \\ &\quad \times \sum_{i=1}^n (Y_i - X_i^T \beta^0) X_i \cdot I\{e_i^2 \leq u_\alpha^2\} + o_p(1) \end{aligned}$$

and $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ is asymptotically normal with mean value equal to β^0 and covariance matrix

$$V(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}, F) = Q_n^{-1} \left[(1-\alpha) - u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha)) \right]^{-2} \int_{-u_\alpha}^{u_\alpha} z^2 dF(z),$$

i. e.

$$\mathcal{L} \left(\sqrt{n} \left(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)} - \beta^0 \right) \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, V(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}, F)) \quad \text{as } n \rightarrow \infty.$$

THEOREM 3. *Let*

$$\mathcal{R}_n =_{\mathcal{D}} W \left(\sum_{i=1}^n (\tilde{\tau}_i^+ + \tilde{\tau}_i^-) \right)$$

where

$$\tilde{\tau}_i^+ = \text{time for Wiener process } W(s) \text{ to exit the interval } (-\tilde{a}_i^+, \tilde{b}_i^+)$$

with

$$\begin{aligned} (-\tilde{a}_i^+, \tilde{b}_i^+) &= (u_\alpha x_i^T u [1 - \tilde{\pi}_i^+], -u_\alpha x_i^T \delta \tilde{\pi}_i^+) \text{ if } x_i^T \delta \leq 0, \\ (-\tilde{a}_i^+, \tilde{b}_i^+) &= (-u_\alpha x_i^T \delta \tilde{\pi}_i^+, u_\alpha x_i^T \delta [1 - \tilde{\pi}_i^+]) \text{ if } x_i^T \delta > 0 \end{aligned}$$

and

$$\tilde{\tau}_i^- = \text{time for Wiener process } W(s) \text{ to exit the interval } (-\tilde{a}_i^-, \tilde{b}_i^-)$$

with

$$\begin{aligned} (-\tilde{a}_i^-, \tilde{b}_i^-) &= (u_\alpha x_i^T \delta [1 - \tilde{\pi}_i^-], -u_\alpha x_i^T \delta \tilde{\pi}_i^-) \text{ if } x_i^T \delta \leq 0, \\ (-\tilde{a}_i^-, \tilde{b}_i^-) &= (-u_\alpha x_i^T u \tilde{\pi}_i^-, u_\alpha x_i^T \delta [1 - \tilde{\pi}_i^-]) \text{ if } x_i^T \delta > 0 \end{aligned}$$

and where

$$\delta = n \left(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)} - \hat{\beta}^{(LTS,n-1,h,\ell)} \right),$$

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}_i^+ &= P \left(I \left\{ r_i^2(\hat{\beta}^{(LTS,n-1,\ell)}) \leq r_{(h)}^2(\hat{\beta}^{(LTS,n-1,\ell)}) \right\} > \right. \\ &\quad \left. I \left\{ r_i^2(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}) \leq r_{(h)}^2(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}) \right\} \right) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}_i^- &= P \left(I \left\{ r_i^2(\hat{\beta}^{(LTS,n-1,\ell)}) \leq r_{(h)}^2(\hat{\beta}^{(LTS,n-1,\ell)}) \right\} \right. \\ &\quad \left. < I \left\{ r_i^2(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}) \leq r_{(h)}^2(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}) \right\} \right). \end{aligned}$$

Moreover, let $[(1 - \alpha) - u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha)) - \mathcal{R}_n]^{-1} = \mathcal{O}_p(1)$. Then under Assumptions \mathcal{B} we have

$$(19) \quad n \left(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)} - \hat{\beta}^{(LTS,n-1,h,\ell)} \right) = Q_n^{-1} [(1 - \alpha) - u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha)) - \mathcal{R}_n]^{-1} \times \\ \times \left(Y_\ell - X_\ell^T \hat{\beta}^{(LTS,n,h)} \right) X_\ell + o_p(1) \quad \text{as } n \rightarrow \infty.$$

More details can be found in Víšek (2000c) and in (1999b).

As follows from Theorem 3, $n \left(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)} - \hat{\beta}^{(LTS,n-1,\ell)} \right)$ is, except of others, proportional to \mathcal{R}_n which, as we have seen, is a random variable obtained from Wiener process by plugging in appropriate stopping times. Such variable is bounded in probability but we cannot control upper bound of its absolute value by an *a priori* selected parameter. It implies that change of the estimates of regression coefficients evaluated at first for the whole data and then for the data from which the ℓ -th observation was deleted may be considerably large. The asymptotic representation (19) of $n \left(\hat{\beta}^{(LTS,n,h)} - \hat{\beta}^{(LTS,n-1,h,\ell)} \right)$ is nearly the same as the asymptotic representation of the difference $n \left(\hat{\beta}^{(M,n)} - \hat{\beta}^{(M,n-1,\ell)} \right)$, i. e. the difference of M -estimators generated by discontinuous ψ -functions, see (6) and more details in Víšek (1996a).

May be that it is not possible to grasp it immediately and only from results which concern $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ (which were given a few lines ago) but from the proofs it is straightforward that the root of that behavior is in the “sharp” (or complete, if you wish) rejection of some observations. Hence a first conjecture may be:

CONJECTURE 1. *An estimator which comply with the new paradigm (except of the equipment by the accompanying procedures) is the least weighted squares given as*

$$\hat{\beta}^{(LWS,n,h)} = \arg \min_{\beta \in R^p} \sum_{i=1}^h w_i r_{(i)}^2(\beta)$$

$(\frac{n}{2} \leq h \leq n)$ for appropriately selected weights w_i .

REMARK 3. *Notice please that again, similarly as for $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$, the order of words is substantial, i. e. this estimator differs from the classic weighted least squares. For the former the weights are assigned to observations implicitly by the estimator itself while for the latter the weights are generated by an external rule.*

It is well-known that applying the ordinary least squares we may get in troubles when the collinearity of explanatory variables takes place. It is nowadays also well-known that in 1970 Hoerl and Kennard proposed *ridge regression* as a possible solution of the problem. The corresponding estimator is biased but it has, under some technical condition, smaller mean squared error than the classic least squares, see e. g. Zvára (1989). The ridge regression estimator is a special case of estimators with linear constraints, see e. g. Víšek (1997a). The estimators with linear constraints are in some monographs offered as one of classic solution of collinearity, see e. g. Judge et al. (1985) (another one is the regression on the main components). It is not difficult to see that the solution of (12) can be found (theoretically) by a successive application of the least squares on all h -tuples which are subsample of data. Practically this approach is feasible only for data having not more 20 observations. Nevertheless, the algorithm which will be described below for evaluating a (tight) approximation to the solution of (12) applies also in an iterative way the

least trimmed squares. Hence we may get due to collinearity of explanatory variables into the same troubles as the ordinary least squares got in. That is why we have studied also the least trimmed squares under linear constraints. The following theorem brings the asymptotic representation of such an estimator. First of all we have to give a definition of the estimator.

DEFINITION 9. Let C be a matrix of the type $\ell \times p$ and full rank. Moreover let $\gamma \in R^\ell$. For an $h, \frac{n}{2} \leq h \leq n$ the least trimmed squares with the linear constraints given by matrix C are given as

$$(20) \quad \hat{\beta}^{(LTS,C,n,h)} = \underset{\beta \in R^p}{\operatorname{arg\,min}} \left\{ \sum_{i=1}^h r_{(i)}^2(\beta)^2 \text{ with } C\beta = \gamma \right\}.$$

THEOREM 4. Let Assumptions \mathcal{A} or \mathcal{B} be fulfilled and $(1-\alpha)-u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha)) \neq 0$. Moreover, let C be a matrix of the type $\ell \times p$ and full rank. Moreover let $\gamma \in R^\ell$. Denote

$$\tilde{Q}^{-1} = Q^{-1} - Q^{-1}C^T \{CQ^{-1}C^T\}^{-1} C^T Q^{-1}.$$

Then

$$\begin{aligned} \sqrt{n} \left(\hat{\beta}^{(LTS,C,n,h)} - \beta^0 \right) &= n^{-\frac{1}{2}} \tilde{Q}_n^{-1} [(1-\alpha) - u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha))]^{-1} \times \\ &\quad \times \sum_{i=1}^n (Y_i - X_i^T \beta^0) X_i \cdot I\{e_i^2 \leq u_\alpha^2\} + o_p(1) \end{aligned}$$

and $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ is asymptotically normal with mean value equal to β^0 and covariance matrix

$$\tilde{V}(\hat{\beta}^{(LTS,C,n,h)}, F) = \tilde{Q}_n^{-1} \left[(1-\alpha) - u_\alpha (f(u_\alpha) + f(-u_\alpha)) \right]^{-2} \int_{-u_\alpha}^{u_\alpha} z^2 dF(z),$$

i. e.

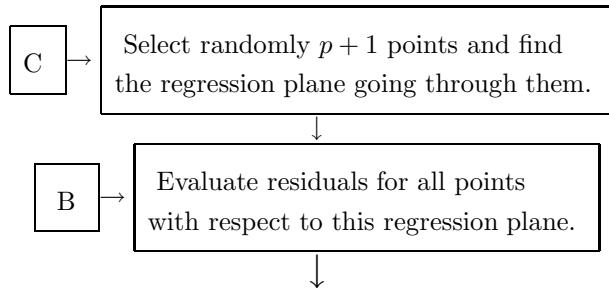
$$\mathcal{L} \left(\sqrt{n} \left(\hat{\beta}^{(LTS,C,n,h)} - \beta^0 \right) \right) \rightarrow \mathcal{N}(0, \tilde{V}(\hat{\beta}^{(LTS,C,n,h)}, F)) \quad \text{as } n \rightarrow \infty.$$

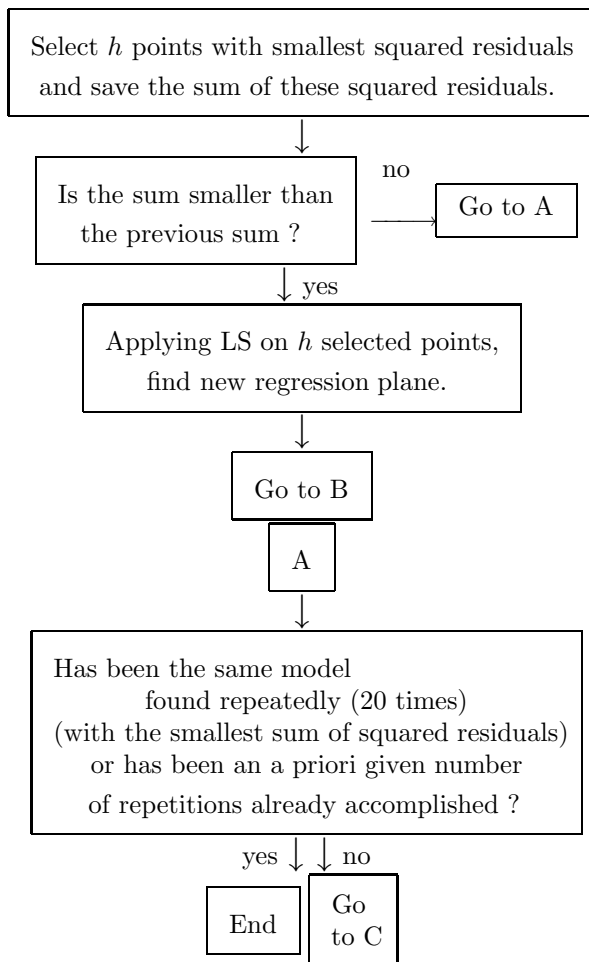
THE LEAST TRIMMED SQUARES - THE ALGORITHM

Now we are going to describe algorithm which is suitable for evaluation of an approximation to the precise solution of (12) and the way how we have confirmed that the approximation is tight.

The algorithm is given by the following scheme:

Figure 3





Let us add that an implementation by Pavel Čížek is possible to access on INTERNET in XPLORE which is a statistical package organized by Wolfgang Hardle from (and on) Humboldt University. By a request a version applicable under DOS is available from present author and soon a WINDOWS-application will be available (also from present author).

Due to the fact that a lot of attention was paid to the study of methods of evaluation of the least squares, the steps in the previous algorithm which employ the least squares do not represent any problem. Nevertheless it does not guarantee that the algorithm is reliable. The next lines bring an information which approves that the algorithm does give a tight approximation to the precise solution of the extremal problem (12).

We have already mentioned that Hettmansperger & Sheather analyzed in 1992 data (let us call them the *Engine Knock Data*) which contained only 16 observations (we have already described what the data recorded). For such data we may find precise solution of the extremal problem (12) by means of a complete inspection over all subsamples of size $11 = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor + \lfloor \frac{p+1}{2} \rfloor$. Since there is “only” 4368 subsamples of size 11, we obtain a solution of the problem in a few minutes. We have also mentioned that not too long after the time when Hettmansperger’s & Sheather’s results appeared

we had at hand Boček-Lachout’s algorithm and we evaluated estimates (after all we have presented them already in previous). Let us give them once again, now in one table with precise results for $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$.

Example 1. Engine Knock Data, $h = 11$ ($\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ - precise values.)

Table 3
Correct data

Method	Interc.	SPARK	AIR	INTK	EXHS.	$\sum_{i=1}^h r_{(i)}^2(\beta)$	$r_{(h)}^2(\beta)$
$\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$	30.04	0.144	3.078	0.460	-0.007	0.423	0.053
$\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$	35.11	-0.028	2.949	0.477	-0.009	0.271	0.096

Table 4
Damaged data

Method	Interc.	SPARK	AIR	INTK	EXHS.	$\sum_{i=1}^h r_{(i)}^2(\beta)$	$r_{(h)}^2(\beta)$
$\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$	48.4	-.732	3.39	.195	-0.011	1.432	0.203
$\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$	-88.7	4.72	1.06	1.57	0.068	0.728	0.291

Let us turn our attention to the last two columns (successively in both tables, i.e. for correct as well as for damaged data). The last but one gives the sums of eleven smallest squared residuals in respective models. We see that smaller are the sums which stay in tables for the least trimmed squares than the sums of the eleven smallest squared residuals which belong to the least median of squares. But it is O. K., since the method of *the least trimmed squares* is an “expert” for finding such models in which corresponding sums of the h smallest squared residuals are minimal. (Moreover in this case we have at hand precise solution of (12), so the sum is really the smallest possible. After all, we see that the sum which corresponds to *the least median of squares* is nearly two times larger.) So, since we found by the throughout inspection “really good” model, we can expect that all residuals (up to the eleventh one) are also small. Nevertheless, comparing items in the last column we notice that Boček-Lachout’s algorithm gave even smaller eleventh order statistics among the squared residuals. It hints that the Boček-Lachout’s algorithm is really efficient.

In the case when the number of observations is however larger than, say 20, we are not able to perform inspection of all subsamples of size h and we have to employ the algorithm, we have just described. It is the case of the next example.

Example 2. Salinity Data (Ruppert, Carroll 1980), 21 cases, $h = 16$.

Concentration of salt in water in North Carolina’s Pamlico Sound probably depends on

- on salinity lagged by two weeks,
- on number of biweekly periods elapsed since,
- on the volume of river discharge into the sound.

Table 5

Method	Interc.	SAL.LAG	TREND	DISCHR.	$\sum_{i=1}^h r_{(i)}^2(\beta)$	$r_{(h)}^2(\beta)$
$\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$	37.4	.362	-.086	-1.33	.874	.315
$\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$	36.7	.389	-.114	-1.31	.698	.379

The items given in table show that the situation is analogous to that one described in previous. Again the sum of the sixteen smallest squared residuals is smaller for

$\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ than for $\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$ while the sixteenth order statistics of squared residuals is smaller for $\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$ than that one for $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$.

The next example only confirm that the algorithms behave in the same way as in previous also for somewhat larger number of observations.

Example 3. Educational Data (Rousseeuw, Leroy 1987), 50 cases, $h = 27$.

Expenditure on public education (per capita) in 50 U. S. states depends on

- on number of residents per thousand residing in urban areas in 1970,
- on personal income (per capita) in 1973,
- on number of residents per thousand under 18 years of age in 1974.

Table 6

Method	Interc.	RESID.	INCM.	YOUNG	$\sum_{i=1}^h r_{(i)}^2(\beta)$	$r_{(h)}^2(\beta)$
$\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$	-272.4	.090	.034	.962	3734.8	16.78
$\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$	-143.5	.043	.035	.639	3414.5	19.04

Some other results of processing “famous” data sets may be found in Víšek (1996 b) and (2000 a).

Let us return to Hettmansperger and Sheather’s study once again. We have said that they expected, after correcting the error in data, that recalculated results would be only somewhat different from the initial ones but they where surprised by the magnitude of their change. We have also showed that the change of their results was only miseffect caused by the bad algorithm they employed for evaluation of the approximation to the solution of (11). Nevertheless, why they were surprised ? Why they expected that the change of results would be small ? It was due to the (well-spread) idea that the estimators with high breakdown point, due to the fact that they are able to cope with a high contamination, are to be stable under any change of data.

We are going to demonstrate that this idea is wrong. We are going to show that it depends on the (character of the) change of data whether the change of estimates will be small or large, even in a rather small change of data. We shall use once again *Engine Knock Data*.

Example 4. Engine Knock Data, $h = 11$.

(Please remember that in this case estimates evaluated by $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ are precise values of estimates, no approximation.)

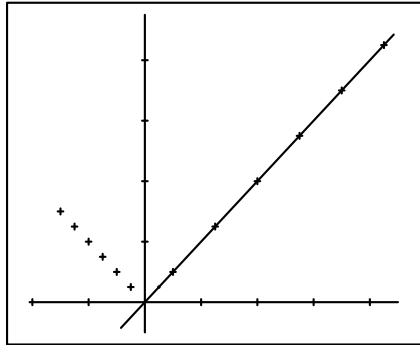
Table 7

Data	Interc.	SPARK	AIR	INTK	EXHS.
Correct data (with 14.1)	35.11	-0.028	2.949	.477	-.009
Damaged data (with 15.1)	-88.7	4.72	1.06	1.57	.068

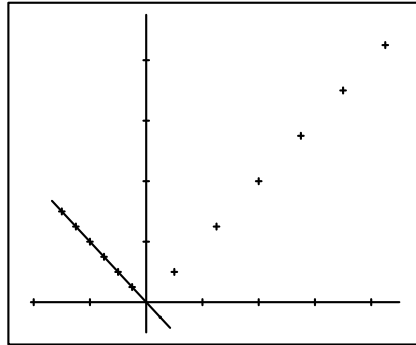
So, we see that a small change, even of one datum, may cause a large change of estimate.

To enlighten what is behind this behavior let us give an *academic example*. As any other *academic example* also this is unrealistic, quite senseless, etc. but has one advantage, it is immediately clear what was the reason for the behavior of $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$ described by previous table.

“Decreasing true” model



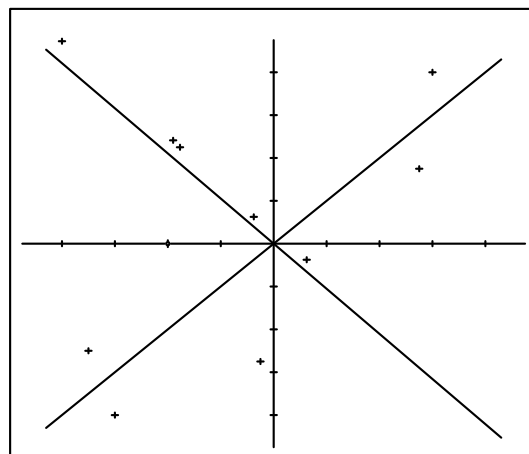
“Increasing true” model



The pictures hint that a small change, even of one datum, may cause a large change of (our ideas about) the “underlying” model.

Returning to the table for damaged data of Example 1 we notice that *the least trimmed squares* and *the least median of squares* offered quite different estimates of underlying model. Let us recall that we gave arguments why we may expect that for the extremal problem (11) we have at hand a tight approximation of its precise solution. For *the least trimmed squares* we have at hand even the precise value of the estimator. Keeping that in mind we may be surprised that the estimators gave so different estimates of coefficients.

An academic example (again in the form of a picture) may enlighten the situation so that it is immediately clear what is the reason for a “strange” behavior of estimators.



$\hat{\beta}^{(LMS,n,h)}$ versus $\hat{\beta}^{(LTS,n,h)}$

The fact that two consistent estimators may give rather different (even orthogonal) estimates of underlying model was already studied, formalized and is known as the *diversity of estimates*. Since the formalization is in easily available sources, see Víšek (1996 b), (1997 c) or (2000 a), we shall not repeat it. Let us only add that the formalization demonstrates that two consistent estimators may give completely different estimates of regression coefficients and an increase of sample size need not help. In fact, the phenomenon may appear both for strong as well as for weak consistency and for any size of data.

Now let us turn to the promised example about the Czech economy.

EXAMPLE OF ANALYSIS BY HIGH BREAKDOWN POINT ESTIMATOR

In the study of data describing the Czech economy in 1994 we have looked for factors having a significant influence on the export and on the foreigner direct investment, only. We shall present below results for foreigner direct investment. The reason is that the paper is already rather long and moreover in both cases, as we shall after all mention it in the next text, the conclusion were very similar. At the beginning of study we have taken into account the whole set of raw data recording the export (X)², the import, the total sales (S), the labour (L), the quality of labour given by number of the university educated workers and other labour, the total production, total profit, the value added (VA), the wages (W), total expenditures on labour (cost of labour), the capital (K), percentage of production sailed by 3 largest producers (and so representing concentration in given industry), the development of prices (DP) (given by weighted mean of inflation in given industry), Ballasa index (difference of export and import divided by sum of export and import), the debts, an increasing return to scale (IRS), negative externalities (waste, chemicals, etc.), the total factor productivity (TFPW) (related to the level of wages) in the Czech republic and Germany, the foreigner direct investments (FDI), the research and development (R&D), sensitive products (there are industries which, due to a better organized lobby, such as in textile, clothing, agricultural products, steel, automobiles and some chemicals, are subject to a higher protection tariffs), energy intensity (including, coal, gas, oil and electricity), depreciations, kilogram prices, etc. were collected for 92 industries. Finally, we have tried to use also some explanatory variables which were derived from these (which were just given) as unit labour cost, capital per labour, profit per value added, etc.

It is not necessary to be expert on the Czech economy to be aware that such industries as *Tobacco* (due to Philip-Morris) and *Energy production* (due to ČEZ) are completely atypical. Since both have a special status one can justifiably conclude that they may damage the study and try to exclude them at first. It appeared that it is sufficient to exclude *Tobacco* since the foreigner direct investment was completely atypical, namely zero at respective year.

Moreover, it is clear that the industries have different sizes and that is why we need some standardization of them. It need not be clear at the first glance that there was no suitable unique variable for standardization of all variables. E. g. *value added* may seem to be appropriate for such role but empirical results demonstrated that it is not the case. So at the end we have standardized different factors (explanatory variables) as well as the response variable by different variable (see model given

²Abbreviations are given only for those variables which are used in below given reported results of regression analysis.

below). Maybe that in stabilized market economy with prices representing at least vaguely real information about situation on the market, value added may serve well for this purpose.

Of course, we have started with the least squares and due to not very large number of observations (91) and a limited number of explanatory variables (about 30) we could experiment with a lot of combination of them. We were not satisfied by the results. Even the coefficients of determination were not very large leaving aside that other characteristics (as e.g. normality of residuals) were also rather poor.

That was the reason we have applied the least trimmed squares (why just the least trimmed squares is clear from the previous). In this case we were somewhat limited in experimenting by time since the algorithm described in previous is of course a bit slower than that one for evaluating the least squares. Nevertheless we have tried more than twenty combinations of explanatory variables for several transformation of response variable. Moreover, we had to try to fit the model for various value of h . For each combination we started with h equal to 45 and increased it. At we end we have arrived to the conclusion that the model given below is the best one. The reason was not only the good statistical characteristics but also the fact that after fluctuations of estimates of coefficients for several starting values of h we arrived to an interval of values, approximately from 48 to 56, for which the corresponding subsamples of data, i.e. corresponding collections of industries were nested and fluctuations of the estimates of coefficients of regression models were small (in the next text we call these subpopulations as *main* while the complementary ones are denoted as *complementary*). Also the increase of the estimate of variance of disturbances was acceptable. Outside this interval of values of h we met with (much) more “wild” behaviour of all items in question.

$$\log\left(\frac{FDI_i}{W_i}\right) = \beta_0 + \beta_1 \cdot \frac{X_i}{W_i} + \beta_2 \cdot \frac{VA_i}{W_i} + \beta_3 \cdot \frac{R\&D_i}{VA_i} + \beta_4 \cdot IRS_i + \beta_5 \cdot DP_i + e_i \text{ for } i = 1, 2, \dots, h,$$

(21)

The next table is a pattern of results we have collected. (In all tables which follow *Estimates* and *Standard* mean *Estimates of regression coefficients* and *Estimates of standard errors of estimates of regression coefficients*, respectively.)

Table 8
Estimates of coefficients for main subpopulation for model (21)

91 cases $h = 48$

Item	Estimates	Standard	t-value	P-value
Intercept	-11.4878	0.4606	-24.9422	0
X/W	0.1785	0.0445	4.016	0.00024
VA/W	0.6082	0.0567	10.7189	0
R&D/PH	0.001	0.0003	3.4167	0.001419
IRS	4.5787	0.2182	20.9841	0
DP	0.304	0.0831	3.6601	0.000699

Having gathered tables of results for $h = 45, 46, \dots, 62$ we collected estimates of coefficients and of other characteristics of models in the next two tables (of course, for $h = 48, 49, \dots, 55$ - see arguments given in previous).

Table 9

The estimates of coefficients for all models for $h = 48, 49, \dots, 55$.

Number of cases	48	49	50	51	52	53	54	55
Intercept signif.	-11.49 (0.0000)	-11.02 (0.0000)	-11.40 (0.0000)	-11.41 (0.0000)	-11.16 (0.0000)	-11.15 (0.0000)	-11.13 (0.0000)	-10.88 (0.0000)
X/W signif.	0.1785 (0.0002)	0.1592 (0.0014)	0.19 (0.0003)	0.204 (0.0002)	0.2057 (0.0002)	0.2142 (0.0002)	0.2256 (0.0001)	0.2194 (0.0003)
PH/W signif.	0.6082 (0.0000)	0.5661 (0.0000)	0.5571 (0.0000)	0.5517 (0.0000)	0.5412 (0.0000)	0.5504 (0.0000)	0.5577 (0.0000)	0.5661 (0.0000)
RD/PH signif.	0.001 (0.0014)	0.0009 (0.0027)	-0.0003 (0.0131)	-0.0003 (0.0192)	-0.0003 (0.0136)	-0.0003 (0.0233)	-0.0003 (0.0312)	-0.0003 (0.0297)
IRS signif.	4.5787 (0.0000)	4.4467 (0.0000)	4.5885 (0.0000)	4.6169 (0.0000)	4.5003 (0.0000)	4.4717 (0.0000)	4.4377 (0.0000)	4.3186 (0.0000)
DP signif.	0.304 (0.0007)	0.2953 (0.0015)	0.3553 (0.0003)	0.3394 (0.0006)	0.3454 (0.0007)	0.3259 (0.0018)	0.3114 (0.0035)	0.3066 (0.0056)

Table 10

Values of sum of squares (SS), estimates of variance, coefficients of determination, Durbin-Watson (DW) and χ^2 -statistics

Number of cases	48	49	50	51	52	53	54	55
SS	14.01	15.76	17.29	18.94	20.60	22.62	24.59	27.44
$\hat{\sigma}^2$	0.334	0.367	0.393	0.421	0.448	0.481	0.512	0.560
R^2	0.941	0.936	0.942	0.937	0.933	0.926	0.920	0.911
DW	1.947	1.809	1.843	1.820	1.763	1.611	1.548	1.641
χ^2 ¹⁰	8.84(8)	6.42(7)	9.01(9)	7.12(9)	5.48(9)	8.33(8)	6.97 (8)	6.31 (8)

Now let us turn to *complementary* subpopulations. In the same way as described in previous we have found also for complementary subpopulations regression models. We concluded that the model

$$\log\left(\frac{FDI_i}{W_i}\right) = \beta_0 + \beta_1 \cdot \frac{VA_i}{W_i} + \beta_2 \cdot \frac{R\&D_i}{VA_i} + \beta_3 \cdot IRS_i + \beta_4 \cdot DP_i + e_i$$

¹⁰The degrees of freedom (7, 8 and 9) were given as the results of the application of the χ^2 test procedure which automatically divided residuals into cells so that to have at every cell at least 5 in.

(22)
$$\text{for } i = 1, 2, \dots, n - h - \ell,$$

is the best fitting to the complementary subpopulations.

Table 11

Estimates of coefficients for complementary subpopulation for model (22)

41 cases $h = 37$

Item	Estimates	Standard	t-value	P-value
Inter	3.099	1.6823	1.8422	0.07473
VA/W	1.5768	0.5000	3.1539	0.003493
RD/VA	0.0034	0.0007	5.0475	0.000017
IRS	-2.9364	0.5448	-5.3896	0.000006
TFPW	-3.3955	1.5883	-2.1378	0.040269

Table 12

Other characteristics of models, estimates of coefficients of which are given in Table 11

Number of cases / size of subsample, i. e. h	38/36	41/37
Sum of squares	74.2522	63.2336
Estimate of scale	2.3952	1.976
Coefficient of determination	0.5988	0.6263
Durbin - Watson	1.9453	1.8932
χ^2	6.69(4)	9.28(5)

There is of course (legitimate and interesting) question:

Is such division on the main and the complementary subpopulations justifiable ?

The answer is **Yes**.

At the late forties P.H. Douglas studied the question whether there is a model for the production based on the labor and capital, and on the base of some empirical material proposed the function which is nowadays commonly known as *Cobb-Douglas production function*, see Douglas (1948) or Kmenta(1986). For further details see e. g. Arrow et al. (1961), Greene (1993) or Judge et al. (1985)). It may be written as

$$Q_i = \mu L_i^\lambda K_i^{1-\lambda}$$

where Q_i is the output in the i -th industry (and L and K are labor and capital, respectively, as already denoted in previous). Moreover, the results given in tables in previous text hint that there is a positive influence of the characteristic which is called *increasing return to scale* in the *main* subpopulation and negative in the *complementary*, we may try at the first analysis to fit this function to the subpopulation given by our division. Assuming e. g. that $\lambda = 1$ and taking into account (again) that industries are of different magnitudes (and hence we have to standardize corresponding items), we may try to estimate the coefficients of the regression model

(23)
$$\frac{K_i}{W_i} = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot \frac{S_i}{L_i} + \nu_i$$

where of course ν_i are some disturbances. Prior to reporting the results of such experiment, let us say that we were successful for the *main* subpopulations but the model was unsuitable for the *complementary* ones. Again, after some experimentation we arrived to the conclusion that for the *complementary* subpopulations the

best fit is evidently achieved by the model

$$(24) \quad \frac{K_i}{W_i} = \gamma_1 + \gamma_2 \cdot \frac{L_i}{S_i} + \kappa_i.$$

The corresponding coefficients of determination are given in Tables 13 and 14 below.

Table 13

Coefficients of determination for main subpopulations

Cases	48	49	50	51	52	53	54	55
Model (23)	0.7436	0.7442	0.7399	0.7408	0.7432	0.7446	0.7456	0.7467
Model (24)	0.1676	0.1694	0.1807	0.1816	0.1681	0.1375	0.1307	0.1319

Table 14

Coefficients of determination for complementary subpopulations

Cases	43	42	41	40	39	38	37	36
Model (24)	0.0084	0.0343	0.1047	0.1092	0.1105	0.1162	0.1221	0.1288
Model (23)	0.5444	0.5588	0.5572	0.5492	0.5576	0.5421	0.5443	0.5353

The results may be, with a grain of salt, interpreted so that the *main* subpopulations behave like in the *market economy* while the others as in a *centrally planned economy* (we stress once again that it is somewhat exaggerated). Moreover, the results given in tables in previous text hint that there is a positive influence of the characteristic which is called *increasing return to scale* in the *main* subpopulation and negative in the *complementary*. It supports the same conclusion.

CONCLUSIONS

The conclusions are quite clear. Earlier, when the classic statistics studied the estimators as the maximum likelihood or the minimum χ^2 , the evaluation of them seemed to be not very difficult task. The evaluation of the modern (robust) estimators is much more involving and a naive algorithm may betray us. So, the evaluation of them is to be taken as seriously as the proving plausible the theoretical features. Similarly, equipping the estimator by the accompanying tools, i. e. by test for the verification of the assumptions is unseparable part of establishing new estimator. Also searching for the consequences of under- or overfitting the model, presence of an influential point and/or collinearity etc. should be included into that process.

The *least trimmed squares* fulfill nearly all items of a modern paradigm of point estimation (the research on *the least weighted squares* which should rid us some problems with the least trimmed squares, is under process). Moreover, the heuristics of the least trimmed squares are so easy acceptable, that they may be apply even by the believers into a traditional paradigm of mathematical modeling. Finally, and it is also significant, the interpretation of results is not very far from the interpretation of *the ordinary least squares*. The advantage of the estimator is that nowadays several implementations are available

1. Appendix

LEMMA A.1. *Let us have $\sum_{i=1}^n \|x_i\| = \mathcal{O}(n)$. Then for any $\Delta \in (0, 1]$ there is a $K_\Delta < \infty$ such that denoting for any $n \in N$*

$$m_n = \# \{i : 1 \leq i \leq n, \|x_i\| > K_\Delta\}$$

we have $m_n < \Delta \cdot n$ (where “#A” denotes the number of elements of the set A).

PROOF. Due to the assumptions of lemma there is C such that for all $n \in N$ we have $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x_i\| < C$. Fix $\Delta \in (0, 1]$ and put $K_\Delta = \frac{C}{\Delta} + 1$. Then

$$C > \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x_i\| = \frac{1}{n} \left\{ \sum_{\{i:\|x_i\| \leq K_\Delta\}} \|x_i\| + \sum_{\{i:\|x_i\| > K_\Delta\}} \|x_i\| \right\} > \frac{1}{n} m_n K_\Delta$$

and hence $m_n < n \cdot \frac{C}{K_\Delta} < n \cdot \Delta$.

Table A1

Data which were discussed in Figure 2

Datum given as a small circle is in the first column of the lower table.

x	0.2	0.39	0.6	0.87	1.2	1.94
y	-0.9	-0.459	-1.17	1.485	1.394	1.545

x	0.2	-0.2	-0.39	-0.6	-0.87	-1.2	-1.94
y	-0.3844	0.9	0.459	1.17	-1.485	-1.394	-1.545

Table A2

A pattern of data which were used in numerical illustration, i. e. data about the Czech economy

case	OKEC	X/S	VS/PH	SZ/PH	K/PH	R&D/PH	PH/W W)
1	101	0.49	2.85	3.79	5.21	51.2	2.16
2	102+103	0.13	1.36	2.59	3.98	51.2	3.67
3	111+112	0.18	1.51	2.87	3.98	1522	3.23
4	120+132	0.05	19.04	25.29	44.03	4417	0.37
5	141+142	0.22	1.32	3.16	5.04	472.9	3.4
6	143-145	0.31	2.46	4.68	4.88	472.9	2.32
7	151	0.02	3.44	5.66	4.1	10.1	2.2
8	152	0.04	0	5.01	2.26	10.1	2.91
.
.
83	352	0.39	2.81	4.32	4.2	312.4	2.49
84	353	0.03	6.46	2.42	2.54	2945.3	3.87
85	354	0.56	5.59	8.37	5.31	312.4	1.71
86	361	0.36	2.87	6.71	2.97	4.2	2.09
87	362	0.24	0.8	3.04	1.77	203.3	3.94
88	363-223	0.73	1.54	3.6	2.11	203.3	3.33
89	364-365	0.47	5.85	7.7	2.9	203.3	1.99
90	296-366	0.54	2.82	5.12	2.48	38.7	2.53
91	401	0.02	0.84	0.76	13.3	2.3	10.67

Table A2 (continued)

case	OKEC	CR3	TFPW	BAL	DP	Ln(FDI/W)
1	101	0.99	1.05	0.69	1.56	-4.6
2	102+103	0.94	1.64	1	1.86	-3.58
3	111+112	0.94	1.5	-0.98	1.66	-5.52
4	120+132	1	0.16	-0.74	1.97	-6.62
5	141+142	0.22	1.45	0.32	2.35	0.43
6	143-145	0.94	1.12	-0.14	1.8	-0.46
7	151	0.15	1.14	-0.08	1.38	-4.46
8	152	0.81	1.66	-0.42	1.97	-3.85
9	153	0.31	1.13	-0.46	1.39	-3.19
.
.
.
82	351	1	0.7	0.76	1.02	-3.21
83	352	0.59	1.23	0.86	4.12	-3.19
84	353	0.8	1.95	0.65	3.05	-0.72
85	354	0.6	0.88	0.09	3.24	0.28
86	361	0.27	1.21	0.29	2.02	-0.55
87	362	0.72	2.2	0.47	2.03	-1.84
88	363-223	0.39	1.86	-0.11	2.11	-3.42
89	364-365	0.31	1.18	-0.35	2.27	-0.1
90	296-366	0.31	1.46	0.45	2.15	-2.8
91	401	0.77	2.41	0.35	3.01	0.82

REFERENCES

- [1] Andrews, D. F., P. J. Bickel, F. R. Hampel, P. J. Huber, W. H. Rogers, J. W. Tukey (1972): *Robust Estimates of Location: Survey and Advances*. Princeton University Press, Princeton, N. J.
- [2] Antoch, J., Vorlíčková, D. (1992): *Vybrané metody statistické analýzy dat*. Academia, Praha, 1992.
- [3] Arrow, K., H. Chenery, B. Minhas, R. Solow (1961): Capital-labor substitution and economic efficiency. *Review of Economic and Statistics*, 45, 225 - 247.
- [4] Bickel, P. J. (1975): One-step Huber estimates in the linear model. *J. Amer. Statist. Assoc.* 70, 428-433.
- [5] Boček, P., P. Lachout (1995): Linear programming approach to LMS-estimation. *Memorial vol. of Comput. Statist. Data Analysis 19*, 129 - 134.
- [6] Boscovisch, R. J. (1757): De litteraria expeditione per pontificiam ditionem, et synopsis amplioris operis, ac habentur plura eius ex exemplaria etiam sensorum impressa. *Bonomiensi Scientiarum et Artium Instituto Atque Academia Commentarii 4*, 353-396.
- [7] *Directions in Robust Statistics and Diagnostics*. W. Stahel, S. Weisberg, eds., New York: Springer-Verlag, 1991.
- [8] Douglas, P. H. (1948): Are there laws of production? *American Economic Review*, 38, 1 - 41.
- [9] Galilei, G. (1632): *Dialogo dei masimi sistemi*.
- [10] Galton F. (1886): Regression towards mediocrity in hereditary stature. *Journal of the Anthropological Institute vol. 15*, pp. 246-263.
- [11] Gauss F. C. (1809): *Theoria molus corporum celestium*. Hamburg, Perthes et Besser.
- [12] Greene, W.H. (1993): *Econometric Analysis*, Macmillam Press, New York.
- [13] Hampel, F. R. (1975): Beyond location parameters: Robust concepts and methods (with discussion). *Proceedings of the 40th Session of the ISI, vol. XLVI*
- [14] Hampel, F. R., E. M. Ronchetti, P. J. Rousseeuw, W. A. Stahel (1986): *Robust Statistics – The Approach Based on Influence Functions*. New York: J.Wiley Sons.

- [15] Hettmansperger, T. P., S. J. Sheather (1992): A Cautionary Note on the Method of Least Median Squares. *The American Statistician* 46, 79–83.
- [16] Hoerl, A. E., R. W. Kennard (1970 a): Ridge regression: Biased estimation for nonorthogonal problems *Technometrics* 12, 55 - 68.
- [17] Hoerl, A. E., R. W. Kennard (1970 b): Ridge regression: Application to nonorthogonal problems *Technometrics* 12, 69 - 82.
- [18] Huber, P. J. (1973): Robust regression: Asymptotics, conjectures and Monte Carlo. *Ann. Statist.* 1, 799–821.
- [19] Huber, P.J.(1981): *Robust Statistics*. New York: J.Wiley & Sons.
- [20] Joss, J., A. Marazzi (1990): Probabilistic algorithms for *LMS* regression. *Computational Statistics & Data Analysis* 9, 123–134.
- [21] Judge, G. G., Griffiths, W. E., Hill, R. C., Lutkepohl, H., Lee, T. C. (1985): *The Theory and Practice of Econometrics*. New York: J.Wiley & Sons (second edition).
- [22] Jurečková, J. and Sen, P. K. (1993): Regression rank scores scale statistics and studentization in linear models. *Proceedings of the Fifth Prague Symposium on Asymptotic Statistics, Physica Verlag*, 111-121.
- [23] Kmenta, J. (1986): *Elements of econometrics*, Macmillan Publishing Company, New York.
- [24] Laplace, P. S. (1793): Sur quelques points du système du mode. *Memoires de l'Academie Royale des Sciences de Paris*, 1-87.
- [25] Lax, D. A. (1975): An interim report of a Monte Carlo study of robust estimators of width. *Technical Report 93, Series 2, Dept. of Statistics, Princeton University, Princeton*.
- [26] Legendre A. M. (1805): Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes. *Paris, Courcier*.
- [27] Maronna, R. A. (1976): Robust *M*-estimators of multivariate location and scatter. *Annals of Statistics* 4, 51 - 67.
- [28] Maronna, R. A., O. H. Bustos, V. J. Yohai (1979): Bias- and efficiency-robustness of general *M*-estimators for regression with random carriers. In *Smoothing Techniques for Curve Estimation*. Eds. T. Gasser and M. Rosenblatt, New York: Springer-Verlag, 91 - 116.
- [29] Martin, R. D., V. J. Yohai, R. H. Zamar (1989): Min-max bias robust regression. *Ann Statist.* 17, 1608 - 1630.
- [30] Mason, R. L., R. F. Gunst, J. L. Hess (1989): *Statistical Design and Analysis of Experiments*, New York: J.Wiley & Sons.
- [31] Prigogine, I., I. Stengers (1977): La Nouvelle Alliance. *SCIENTIA*, 1977, issues 5-12.
- [32] Prigogine, I., I. Stengers (1984): *Out of Chaos*. William Heinemann Ltd 1984.
- [33] Rousseeuw, P.J. (1984): Least median of square regression. *Journal of Amer. Statist. Association* 79, pp. 871-880.
- [34] Rousseeuw, P. J., A. M. Leroy (1987): *Robust Regression and Outlier Detection*. New York: J.Wiley & Sons.
- [35] Ruppert, D., R. J. Carroll (1980): Trimmed least squares estimation in linear model. *J. American Statist. Ass.*, 75 (372), pp. 828–838.
- [36] Schweingruber, M. (1980): Das Monte Carlo Verhalten einiger Verwerfungsregeln. *Diploma thesis. Fachgruppe für Statistik. ETH. Zurich*.
- [37] Siegel, A. F. (1982): Robust regression using repeated medians. *Biometrika*, 69, 242 - 244.
- [38] Věšek, J. Á. (1994): A cautionary note on the method of Least Median of Squares reconsidered. *Transactions of the Twelfth Prague Conference on Information Theory, Statistical Decision Functions and Random Processes, Prague, 1994*, 254 - 259.
- [39] Věšek J. Á. (1996 a): Sensitivity analysis of *M*-estimates. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 48(1996), 469-495.
- [40] Věšek J. Á. (1996 b): On high breakdown point estimation. *Computational Statistics (1996)* 11:137-146, Berlin.
- [41] Věšek J. Á. (1997 a): *Statistická analýza dat*. Vydavatelství Českého vysokého učení technického v Praze, 1997, ISBN 80-01-01735-4.
- [42] Věšek J. Á. (1997 b): *Ekonomie I*. Nakladatelství Univerzity Karlovy, 1997, ISBN 80-7184-483-7.
- [43] Věšek J. Á. (1997 c): Contamination level and sensitivity of robust tests. *Handbook of Statistics, volume 15, 633 - 642*, eds. G. S. Maddala & C. R. Rao, 1997, Amsterdam: Elsevier Science B. V., ISBN 0-444-82172-4

- [44] Víšek, J.Á.(1998 a): Robust specification test. *Proceedings of Prague Stochastics'98* (eds. Marie Hušková, Petr Lachout & Jan Ámos Víšek, published by Union of Czechoslovak Mathematicians and Physicists), 1998, pp. 581 - 586.
- [45] Víšek, J.Á.(1998 b): Robust instruments. *Robust'98* (ed. Jaromír Antoch & Gejza Dohnal, published by Union of Czechoslovak Mathematicians and Physicists), 1998, pp. 195 - 224.
- [46] Víšek J. Á. (1998 c): What is characterized by gross error sensitivity ? *Bulletin of the Czech Econometric Society, Volume 5 (1998), Issue 7, 111 - 124.*
- [47] Víšek J. Á. (1999 a): Robust estimation of regression model. *Bulletin of the Czech Econometric Society, Volume 9/1999, 57 - 79.*
- [48] Víšek J. Á. (1999 b): The least trimmed squares - random carriers. *Bulletin of the Czech Econometric Society, Volume 10/1999, 1 - 30.*
- [49] Víšek J. Á. (2000 a): On the diversity of estimates. *Computational Statistics and Data Analysis 34, (2000) 67 - 89.*
- [50] Víšek, J.Á.(2000 b): Sensitivity analysis of M -estimates of nonlinear regression model: Influence of data subsets. To appear in *Annals of the Institute of Statistical Mathematics.*
- [51] Víšek, J.Á.(2000 c): The least trimmed squares. Consistency, asymptotic normality and sensitivity study. *Preprint.*
- [52] Víšek, J.Á.(2000 d): A new paradigm of (high breakdown point) estimation. Submitted to the proceedings the seminar "Data Analysis".
- [53] Zvára, K. (1989): *Regressní analýza* (Regression Analysis – in Czech). Prague: Academia.

CHARLES UNIVERSITY, DEPARTMENT OF MACROECONOMICS AND ECONOMETRICS, INSTITUTE OF ECONOMIC STUDIES, FACULTY OF SOCIAL SCIENCES, OPLETALOVA 26, CZ – 110 00 PRAGUE 1, CZECH REPUBLIC

E-mail address: `visek@mbbox.fsv.cuni.cz`

DEPARTMENT OF STOCHASTIC INFORMATICS, INSTITUTE OF INFORMATION THEORY AND AUTOMATION, CZECH ACADEMY OF SCIENCES, POD VODÁRENSKOU VĚŽÍ 4, CZ – 182 08 PRAGUE 8, CZECH REPUBLIC

E-mail address: `visek@utia.cas.cz`

STATISTICAL MODELS AND ANALYSIS OF CUMULATED DAMAGE PROCESSES

PETR VOLF

ABSTRACT. The contribution deals with a stochastic process which cumulates random increments at random moments. It is described by the intensity of random (counting) process of these moments and by a distribution of increments. The resulting process is here called the cumulative process. We derive its martingale - compensator decomposition and then we propose the estimator of characteristics of distribution of increments. An application deals with the process of growing damage of a technical device leading to a break of device when the cumulated damage exceeds a certain level. We also discuss the problem of prediction of the cumulative process behaviour.

V článku se zabýváme procesem kumulujícím náhodné přírůstky v časech daných náhodným bodovým procesem. Uvažujeme poměrně obecný model s martingalovou strukturou "inovace" procesu, tj. proces rozložitelný na martingal a kompenzátor adaptovaný na příslušnou filtraci. Uvažujeme model jako regresní a zabýváme se odhadem intenzity bodového procesu a charakteristik rozdělení přírůstků. Je také zkoumán problém predikce chování procesu. Jako aplikaci analyzujeme proces růstu poškození výrobku či materiálu.

Резюме: В статье рассмотрены случайные точечные и кумулятивные процессы – случайные суммы. Показано разложение процесса в мартингал и компензатор. Далее представлены оценки интенсивности и характеристик приращений, обсуждается вопрос предсказания поведения процесса. В качестве примера исследованы процессы накопления повреждения, которые влияют на вероятность отказа технического продукта.

1. THE MODEL OF CUMULATIVE PROCESS

The counting process is a stochastic point process registering random events and counting their number. The trajectory of such a process starts at zero and has jumps +1 at random moments of events. The main characteristic is the intensity of the stream of events. A review of theory and applications of counting process models is given, for instance, in Andersen et al (1993), or Fleming and Harrington (1991).

In the present paper, we consider random process

$$(1) \quad C(t) = \int_0^t Y(s) dN(s), \quad (C(0) = 0),$$

where $N(t)$ is a counting process and $Y(t)$ is a set of random variables. Such a process combining the counting process with the process of random increments is called the compound counting process, or sometimes also the cumulative process

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 60K05; Secondary 62N05, 62P30.

Key words and phrases. Counting process, compound process, hazard function/intensity, reliability, damage process, shock model.

The research was supported by the grant No 402/98/0742 of GA ČR and by the project No VŠ 97084 of MŠMT ČR..

(Volf, 2000). Its model is suitable for the description of many real-world technological, environmental, biological and also financial processes (especially in the field of insurance, cf. Embrechts et al, 1997, Rolski et al, 1999). The objective of the present paper is to describe the process (1) with the aid of characteristics of both its components, i.e. the hazard function of $N(t)$ and the distribution of $Y(t)$, and to apply it to the modeling of growing damage of a technical device. We also discuss the problem of prediction of the cumulative process behaviour.

In the scenario considered in Volf (2000) it was assumed that each $Y(t)$ was independent of the history of the process $C(s)$ up to t (on the other hand, the intensity of $N(t)$ could depend on the history). It is a rather strong condition which in some cases is not fulfilled, though we can imagine a number of examples for which such an independence of increments on the history is a quite realistic property.

In the present paper we propose a model allowing for the dependence of distribution of $Y(t)$ on $\mathcal{S}(t^-)$, where $\mathcal{S}(t)$ is a corresponding filtration, i.e. a nondecreasing sequence of σ -algebras defined on the sample space of $\{N(s), J(s), \mathbf{Z}(s), Y(s), 0 \leq s \leq t\}$, so that $\mathcal{S}(t^-)$ is its left-continuous version, a 'history'. Intensity of $N(t)$ is $\lambda(t) = h(t, \mathbf{Z}(t))J(t)$, cumulative intensity $L(t) = \int_0^t \lambda(s)ds$, $h(t, z)$ is a hazard function, $J(t)$ and $\mathbf{Z}(t)$ are $\mathcal{S}(t^-)$ measurable predictable processes, e.g. an indicator of observability of $C(t)$ ($J(t) = 1$ if $C(t)$ is observed, $J(t) = 0$ otherwise), and a covariate process. It is assumed that they are left-continuous, while the processes $C(t)$ and $N(t)$ are right-continuous.

As regards the distribution of random variables $Y(t)$, we assume that the conditional distribution of $Y(t)$, given $\mathcal{S}(t^-)$, can be described via a density function $f(y; t, \mathbf{Z}(t))$, and it possesses the first and second conditional moments $E(Y(t)|\mathcal{S}(t^-)) = \mu(t, \mathbf{Z}(t))$, $var(Y(t)|\mathcal{S}(t^-)) = \sigma^2(t, \mathbf{Z}(t))$. These definitions imply that the processes $N(t), C(t)$ depend on $\mathcal{S}(t^-)$ through $\mathbf{Z}(t)$ and $J(t)$.

The processes are followed throughout a time interval $[0, T]$, the covariate can be multidimensional and its values are from a set $\mathcal{Z} \in R^K$, say. For the sake of better estimability, let us assume that functions h, μ, σ are bounded and continuous. By the way, if $h(t, z)$ is a bounded function, it follows that the probability of two events at one moment is zero, which is one of basic assumptions of the event-history models based on continuous-time counting processes.

A similar case, with parametrized function μ , has been studied in Scheike (1994), with the focus on estimation of the parameter, and, eventually, on a kernel estimation of both μ, σ in a nonparametrized scheme (cf. Orsáková in the present volume, and references in Scheike, 1994). Our objective is to derive the estimator of the rate of the cumulative process and of the characteristics of random increments. Then the model will be applied to the description of processes of growing damage, with an numerical example and with an attempt to predict the future behaviour of process.

1.1. The compensator of cumulative process. Let us now recall the compensator – martingale decomposition of the counting process, namely $N(t) = L(t) + M(t)$, $M(t)$ being the martingale adapted to σ -algebras $\mathcal{S}(t)$, with variance process $L(t)$ (cf. for instance Andersen et al 1993). Notice also that under our assumptions, $Y(t)$ is conditionally independent, given $\mathcal{S}(t^-)$, of $dM(t)$, where by $dM(t)$ we denote the increment of $M(t)$ in a small interval $[t, t + dt)$. Similarly, by $d\langle M \rangle(t) = var\{dM(t)|\mathcal{S}(t^-)\}$ we mean the increment of the variance process of $M(t)$, which we denote by $\langle M \rangle(t)$. This martingale innovation structure is crucial for

the theory and methods of statistical inference, namely for the consistency and asymptotic normality of estimates. That is why we search for a similar decomposition of the cumulative process, too.

Let us denote $Y^*(t) = Y(t) - \mu(t, \mathbf{Z}(t))$, so that $E(Y^*(t)|\mathcal{S}(t^-)) = 0$. Then we can write

$$C(t) = \int_0^t (Y^*(s) + \mu(s, \mathbf{Z}(s))) dN(s) = \int_0^t \mu(s, \mathbf{Z}(s)) dL(s) + \mathcal{M}(t),$$

where

$$\mathcal{M}(t) = \mathcal{M}_1(t) + \mathcal{M}_2(t) = \int_0^t Y^*(s) dN(s) + \int_0^t \mu(s, \mathbf{Z}(s)) dM(s).$$

Proposition 1. The processes $\mathcal{M}(t)$, $\mathcal{M}_1(t)$, $\mathcal{M}_2(t)$ are martingales adapted to σ -algebras $\mathcal{S}(t)$, the variance process of $\mathcal{M}(t)$ is

$$\langle \mathcal{M} \rangle(t) = \int_0^t (\sigma^2(s, \mathbf{Z}(s)) + \mu^2(s, \mathbf{Z}(s))) dL(s).$$

The proposition is proved in Volf (2000).

Corollary. Process $\int_0^t \mu(s, \mathbf{Z}(s)) dL(s)$ is the compensator of process $C(t)$.

Evidently, process $\int_0^t \mu(s, \mathbf{Z}(s)) dL(s)$ is $\mathcal{S}(t^-)$ -measurable and predictable (the paths are continuous).

2. LARGE SAMPLE PROPERTIES

Let n realizations $C_i(t) = \int_0^t Y_i(s) dN_i(s)$ of process $C(t)$, together with corresponding processes $J_i(t), \mathbf{Z}_i(t)$, be observed in an interval of the interest, $[0, T]$. More precisely, we observe the paths of processes $J_i(t), \mathbf{Z}_i(t)$, and, provided $J(t) = 1$, the moments of events T_{ij} of counting processes $N_i(t)$ and increments $Y_i(T_{ij})$ (for $i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, n_i = N_i(T)$). It is assumed that random variables $Y_i(t), i = 1, 2, \dots, n$ have the same conditional probability densities $f(y; t, \mathbf{z})$ and that $N_i(t)$ are characterized by the same hazard function $h(t, \mathbf{z})$. Now the common filtration $\mathcal{S}(t)$ is constructed above all paths of $\{C_i(s), N_i(s), J_i(s), \mathbf{Z}_i(s), s \leq t, i = 1, 2, \dots, n\}$. Counting processes $N_i(t)$ have intensities $\lambda_i(t) = h(t)J_i(t)$, by $L_i(t) = \int_0^t \lambda_i(s) ds$ we denote the cumulative intensity processes, $M_i(t) = N_i(t) - L_i(t)$ are martingales. As we assumed the boundedness of $h(t, \mathbf{z})$, and also processes $J_i(t)$ are bounded, than the probability of two increments at one moment is zero and the martingales are mutually orthogonal, i.e. $d\langle M_i, M_j \rangle(t) = 0$ for $i \neq j$. The same holds for $\mathcal{M}_i(t)$, the martingales defined in the same way as $\mathcal{M}(t)$ in the preceding section, i.e. $d\langle \mathcal{M}_i, \mathcal{M}_j \rangle(t) = 0$ for $i \neq j$. Actually, from this impossibility of simultaneous events it also follows that the increments of $C_i(t)$ are conditionally orthogonal, given the history of the process.

From the conditional independence of innovation of the processes the multiplicative form of the likelihood process follows (it is actually a generalization of the likelihood function of Poisson process):

$$\mathcal{L} = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^{n_i} \{ \lambda_i(T_{ij}) f(Y_i(T_{ij}); T_{ij}, \mathbf{Z}_i(T_{ij})) \} \cdot \exp \left\{ - \int_0^T \lambda_i(t) dt \right\},$$

where $\lambda_i(t) = h(t, \mathbf{Z}_i(t))J_i(t)$. Consequently, the part containing the intensities and the part containing the distribution of Y 's are separated (and therefore both characteristics can be estimated independently). In the case of parametrized function f , its parameters can be estimated from the maximum likelihood estimation procedure

based on $\mathcal{L}(f) = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^{n_i} f(Y_i(T_{ij}); T_{ij}, \mathbf{Z}_i(T_{ij}))$ only. In a nonparametrized case, estimates of functions $\mu(t, z)$, $\sigma^2(t, z)$ can be obtained with the help of the smoothing (kernel) technique. Even the density $f(y; t, z)$ could be then estimated via the kernel method.

2.1. Estimates and their convergence. Let us first recall several results from Volf (2000), where the influence of covariates was not considered. In such a case, the most common estimator of the cumulative hazard function $H(t) = \int_0^t h(s)ds$ is the Nelson-Aalen one:

$$\hat{H}_n(t) = \sum_{i=1}^n \int_0^t \frac{1[J(s) > 0]}{J(s)} dN_i(s) = \int_0^t \frac{1[J(s) > 0]}{J(s)} dN(s), \tag{2}$$

where $J(s) = \sum_{i=1}^n J_i(s)$, $N(s) = \sum_{i=1}^n N_i(s)$ (and we put $0/0 = 0$ when $J(s) = 0$). It is well known that such an estimator is uniformly consistent and asymptotically normal (in the sense of the weak convergence of normalized residual process to a Wiener process) on $[0, T]$, provided $J(s)$ tends to infinity uniformly in the whole interval. Let us assume even a stronger condition:

A1. There exists the limit $r(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{J(s)}{n}$ in probability such that

- a) the limit is uniform on $[0, T]$,
- b) $r(s) \geq e$ on $[0, T]$, for some $e > 0$.

As an analogy to (2), let us now define the following "averaged" processes:

$$\bar{C}_n(t) = \sum_{i=1}^n \int_0^t \frac{1[J(s) > 0]Y_i(s)}{J(s)} dN_i(s), \quad \bar{K}(t) = \int_0^t \frac{\mu(s)}{r(s)} dH(s),$$

where function $\bar{K}(t)$ actually represents an averaged rate of the development of the process $C(t)$. Under assumption **A1**, the following large sample results can be proven:

Proposition 2. $\bar{C}_n(t)$ is a uniformly consistent estimate of $\bar{K}(t)$ on $[0, T]$, i.e. $\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} |\bar{C}_n(t) - \bar{K}(t)| = 0$ in probability.

If a proper version of Lyapunov condition is added, for instance that uniformly bounded $E\{|Y(t)|^3\}$ exists, asymptotic normality can be shown, too:

Proposition 3. The process $\sqrt{n}(\bar{C}_n(t) - \bar{K}(t))$ converges weakly on $[0, T]$ to a continuous Gaussian process with zero mean and independent increments, which has the variance function $w(t) = \int_0^t \frac{(\mu^2(s) + \sigma^2(s))}{r^2(s)} dH(s)$.

On the basis of this convergence, the statistical tests, both of the goodness-of-fit and of homogeneity, were derived in Volf (2000). They used, similarly as the Kolmogorov-Smirnov type tests, the crossing probability results of Brownian motion and Brownian bridge processes. An application to the analysis of sequences of financial transactions, with particular attention to detection of atypical (possibly 'fraud') set of transactions, was suggested.

Let us now return to the more complex setting with regression on covariates (processes) $Z(t)$. Then the average from n cumulative processes is

$$\bar{C}_n(t) = \sum_i \int_0^t \frac{\varphi_i(s)}{J(s)} dN_i(s) = \sum_i \int_0^t \left\{ \frac{\mu(s, Z_i(s))}{J(s)} dL_i(s) + \frac{dM_i(s)}{J(s)} \right\}$$

where the first part (a compensator) characterizes again an average (random) rate of growth of the process, while the second part tends to zero. It is possible to formulate a set of 'stability' assumptions, for instance requiring existence of limits

$\bar{\mu}(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mu(t, Z_i(t)) J_i(t)$, such that certain variants of Propositions 2 and 3 hold. However, the meaning of $\bar{\mu}(t)$ is then rather vague.

2.2. Estimation of process' characteristics. Another and more practical problem is the estimation of moments (and density function, say) of distribution of $Y(t)$ provided $Z(t) = z$. First, the distribution of the design of random points $(T_{ij}, Z_i(T_{ij}))$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, n_i$, should be estimated, then it will be used in the kernel estimation of "regression functions" $\mu(t, z)$, $\sigma^2(t, z)$.

The basic results from the field of kernel estimation of density function and of regression function are summarized elsewhere, also in 'Robust' papers of Antoch (1982, 1986), Michálek (1994). Let us consider the simplest versions of estimates and their consistency at a given point (t, z) (and the case with random design of points $(T_{ij}, Z_i(T_{ij}))$). Let $W_1(u)$ and $W_2(w)$ be two kernel functions. At point (t, z) let us define

$$\hat{\varphi}(t, z) = \frac{1}{d_1 d_2 N(T)} \sum_{i=1}^n \int_0^T W_1\left(\frac{t-s}{d_1}\right) W_2\left(\frac{z-Z_i(s)}{d_2}\right) dN_i(s),$$

where

$$N(T) = \sum_{i=1}^n \int_0^T dN_i(t).$$

Further, assume that d_1 and $d_2 \rightarrow 0$, while $d_1 d_2 N(T) \rightarrow \infty$ when $n \rightarrow \infty$. Actually, points $(T_i, Z_i(T_i))$ are not i.i.d. variables, nevertheless, we just assume the following: A2: $\hat{\varphi}(t, z)$ converges (at given (t, z)) to a value $\varphi(t, z) > 0$, in probability,

where $\varphi(t, z)$ taken as a function on $[0, T] \times \mathcal{Z}$ means a density of marginal distribution of one (observed) point $(t, Z(t))$ for a set of processes $Z(t), J(t)$.

Let us define the following estimator at point (t, z) :

$$\hat{\mu}(t, z) = \frac{1}{\hat{\varphi}(t, z) d_1 d_2 N(T)} \sum_{i=1}^n \int_0^T Y_i(t) W_1\left(\frac{t-s}{d_1}\right) W_2\left(\frac{z-Z_i(s)}{d_2}\right) dN_i(s),$$

if $\hat{\varphi}(t, z) > 0$, $\hat{\mu}(t, z) = 0$ otherwise. It is a kernel estimator of regression function $EY(t)$, given t and z and given the fact that t is a point of corresponding point process $N(s)$. Notice, that the probability of the realization of point t depends on $Z(t^-)$. Continuity of μ at point (t, z) , together with A2, suffice for the P -consistency of $\hat{\mu}(t, z)$. The same holds for the estimate of $\mu_2(t, z) = E(Y^2(t)|Z(t) = z)$ (at point (t, z)), which is

$$\hat{\mu}_2(t, z) = \frac{1}{\hat{\varphi}(t, z) d_1 d_2 N(T)} \sum_{i=1}^n \int_0^T Y_i^2(t) W_1\left(\frac{t-s}{d_1}\right) W_2\left(\frac{z-Z_i(s)}{d_2}\right) dN_i(s),$$

and, hence, also for $\hat{\sigma}^2(t, z) = \hat{\mu}_2(t, z) - (\hat{\mu}(t, z))^2$.

3. DAMAGE PROCESSES

In many situations, the lifetime of an object is affected by a process of growing damage. We can, for instance, imagine the process of wear, corrosion, growth of cracks, in the field of technical products reliability. Similar processes cumulating a certain important quantity influencing the risk of a crucial event can be encountered in many other fields (e.g. chemistry, environmental processes, biological and even medical studies). One of models used for the description of such a "damage process"

is based on a trend function and the Wiener process describing the uncertainty, for instance

$$D(t) = g(t) + \sigma W(t).$$

The second class of models are the random sums, i.e. the point processes with random increments, cumulative processes $C(t)$. In both cases, it is assumed that there exists an upper bound B , the lifetime ends when the damage process exceeds the bound. Quite naturally, B may be a random variable, in certain instances it is not observed directly but with censoring (it will also be the case of our example). The damage modeled via $C(t)$ increases at discrete time moments, therefore these models are sometimes called the shock models. Their investigation can lead to a deeper understanding to reasons of failures, compared to a mere analysis of lifetime distribution.

In the present paper it is assumed that the most of processes are observed fully (for instance like in assumption A1), though a certain censoring is allowed. Kahle and Wendt (2000) consider also the cases when the damage processes are observed in random moments when the actual level of process is registered (the scheme of random inspections). Then, without any assumption that the number of processes observed at each small interval Δt tends to infinity, the nonparametric inference is not reliable. Nevertheless, the parametric model evaluation is still possible, with consistent results. However, Kahle and Wendt do not consider the influence of covariates, which, again, should be observed, or at least reliably predicted.

In the next example, the regression is described via the Cox's model. Its general form assumes that the hazard function can be decomposed to two factors, $h(t, z) = h_0(t) \cdot h_1(z)$, the most common form then uses $h_1(z) = \exp(\beta z)$. Cumulative baseline hazard function $H_0(t) = \int_0^t h_0(s) ds$ is then estimated as

$$\widehat{H_0}(t) = \sum_{i=1}^n \int_0^t \frac{dN_i(s)}{\sum_{j=1}^n \exp(\beta Z_j(s)) J_j(s)},$$

while parameter β is obtained by (iterative) maximization of log partial likelihood

$$\log \mathcal{L}_p = \sum_{i=1}^n \int_0^T \log \left(\frac{\exp(\beta Z_i(t))}{\sum_{j=1}^n \exp(\beta Z_j(t)) J_j(t)} \right) dN_i(t).$$

Consistency and asymptotic normality are guaranteed by the conditions of stability (the more complex variants of our A1) and by a version of Lindeberg condition – see Andersen and Gill (1982), Andersen et al (1993).

3.1. Example. As an artificial example with simulated data, let us consider a point process with events – failures of a car. Failures are repaired, the quantized seriousness of failure is cumulated to the cumulative process, until, finally, a non-repairable failure occurs and the lifetime of the car ends. Figure 1 a) and b) shows the processes observed for 40 cars. The reference time was the age of car, the maximal survival was about 20 years while the mean survival was 17,4052. The cars were of different year production, from new ones to cars produced 25 years ago. Figure 1 c) shows the development of the risk set, i.e. the number of cars of corresponding age remaining in the study. Several (11) trajectories of $N(t)$ and $C(t)$ end by a dot – it means that the lifetime of card ended by a non-repairable failure, while the other cars were still in use at the time of data collection. The values of $C_i(t)$ at these dots represent the distribution of upper bound B , they actually approximate the bound from below, the “right” values of the bound are censored. Nevertheless, we took the average of

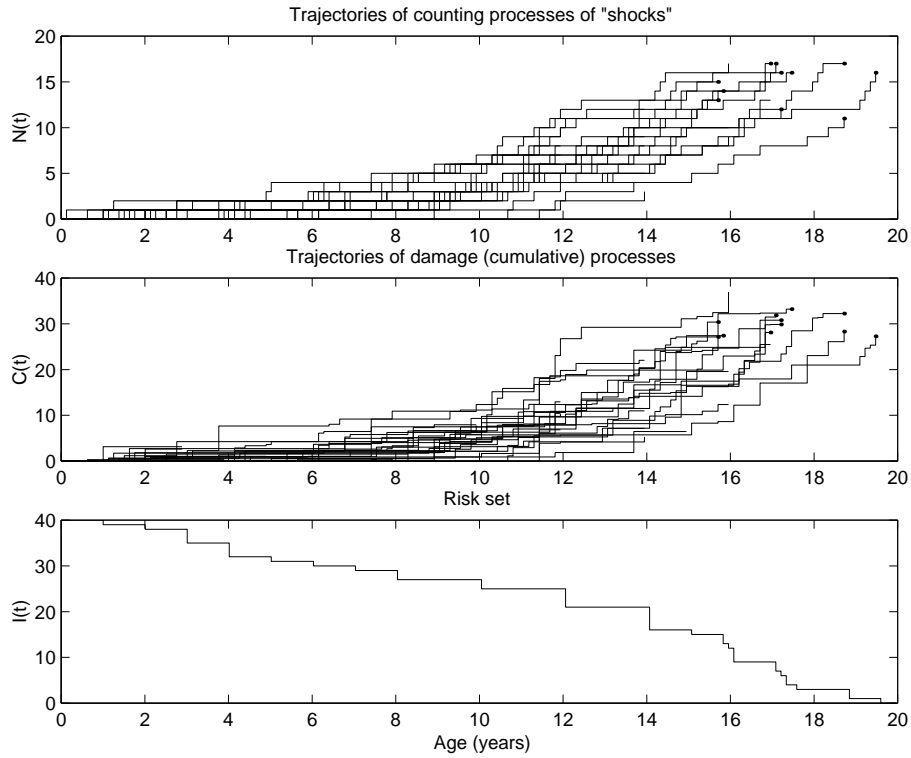


FIGURE 1. Observed processes $N_i(t)$, $C_i(t)$ and process $J(t)$

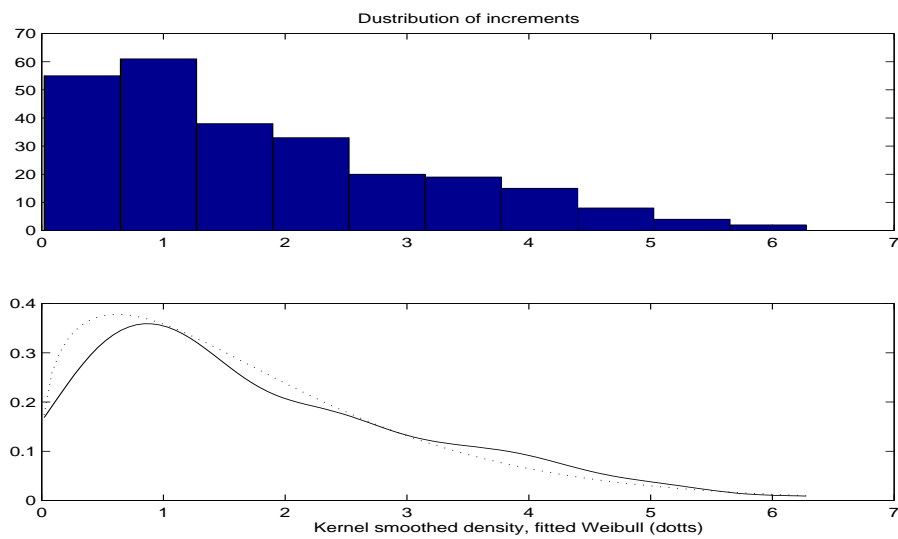


FIGURE 2. Histogram and estimated density of distribution of increments $Y(t)$

these values ($\bar{B} = 30.6130$) as a maximal damage limit used in the prediction of the fate of cars, e. g. in Figure 4.

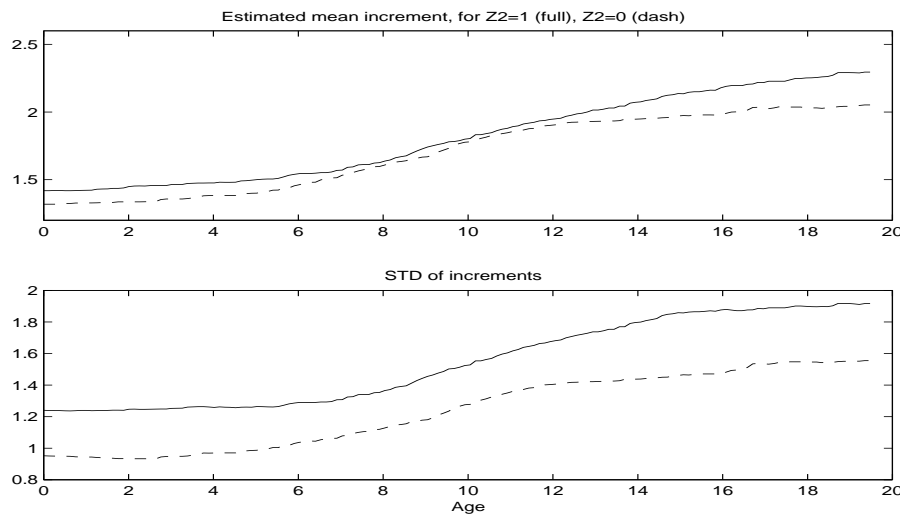


FIGURE 3. Estimated development of mean increment and STD of increments

In observed data, together 256 failures were registered. The distribution of increments is displayed in Figure 2, as a histogram and kernel-estimated density, together with the best fitted Weibull distribution. Average increment was 1.8392, estimated standard deviation 1.5039. Naturally, it was expected that both the distribution of increments $Y(t)$ and the intensity of point process $N(t)$ depended on the time and on covariates. Two covariates were considered, namely Z_1 – the year of production ($Z_1 = 1$ for 25 years old cars, $Z_1 = 25$ for new cars) and $Z_2(t)$ characterizing the conditions of car's usage, $Z_2(t) = 0$ if conditions and service was good, $Z_2(t) = 1$ if conditions were hard and/or service was bad. The dependence on these covariates was analyzed in standard Cox's regression model. Estimated parameters, with corresponding asymptotic 95% confidence intervals, were $\beta_1 = -0.0124$ ($-0.0405, 0.0156$) and $\beta_2 = 0.8306$ ($0.5959, 1.0664$), i. e. the second covariate was statistically significant. Figure 3 shows kernel estimates of means and standard deviations of increments, as functions of time, separately for $Z_2 = 0$ and 1 (Z_1 was not taken into account).

On the basis of these results, and for given process $Z_2(t)$, we are able to characterize (at least roughly) both components of damage process, the intensity of random point process of events and the distribution of increments – the latter for instance by Weibull distribution with means and variances depending on t and Z_2 (as in Figure 3), dependence on Z_1 being neglected. Then, we are also able to generate the trajectories of such a damage process and to predict the fate of a car. Figure 4 shows one randomly generated (predicted) trajectory of $N(t)$ and $C(t)$, for a new car and $Z_2(t) \equiv 1$, and also for 5 year old car (with actual $C(5) = 3$) and under assumption that $Z_2(t)$ will be 0 through the rest of its lifetime. Dotted line shows the upper limit of damage \bar{B} . Naturally, one randomly generated trajectory is not a reliable prediction. It is better to generate a large set of trajectories and to compute from them the mean trajectory, quantile intervals and prediction bands. The next section discusses such a problem.

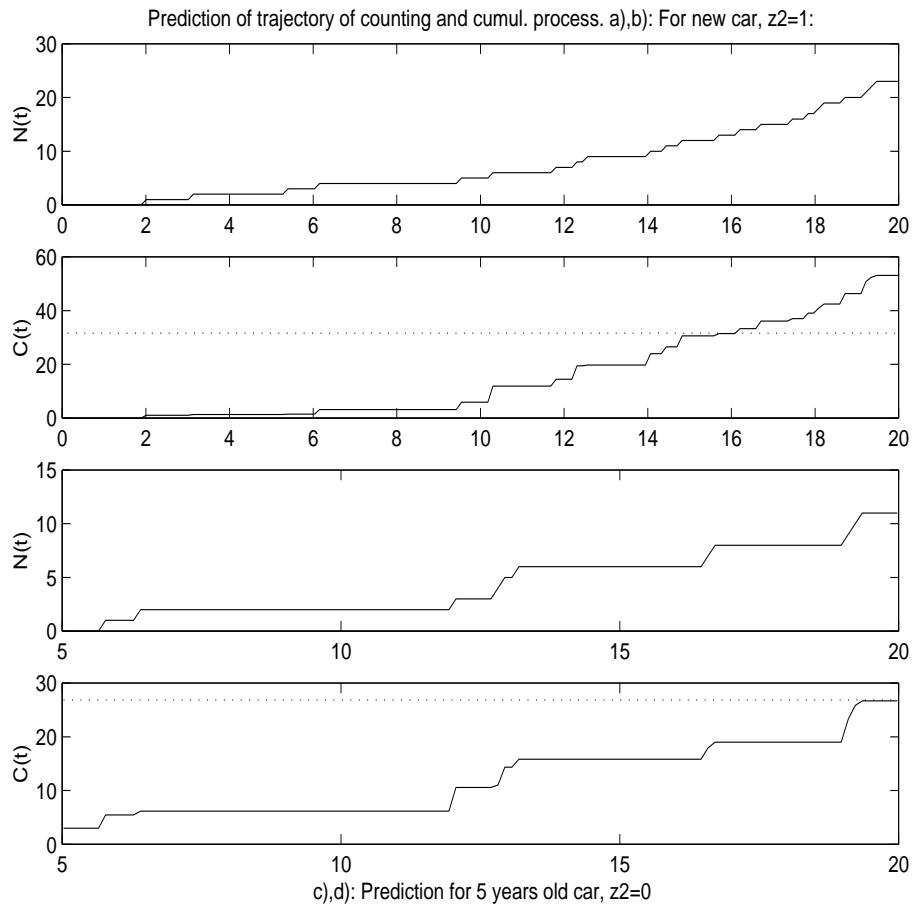


FIGURE 4. Predicted trajectories $N(t), C(t)$ for two cars

4. THE PROBLEM OF PREDICTION

The asymptotic normality shown in Proposition 3 yields actually the joint confidence regions for the model functions (μ, σ, h) , based on observed data, both on the whole interval $[0, T]$ and at each fixed t , too. However, we are also interested, from practical reasons, in α -prediction regions, i.e. the intervals (at fixed t) and the regions, bands for all $t \in [0, T]$, in which the trajectory of processes $N(t)$ or $C(t)$ is expected to lie with a given probability α .

For instance, insurance mathematics solves the problem of the ruin probability, which is equivalent to the problem of construction of prediction bands. In that field, mostly a simple case of compound Poisson process and the linear 'ruin band' are considered.

In the case considered here, the development of process depends on the development of covariates. So that, for reliable prediction, we need estimates of process characteristics and we also have to be able to predict relevant covariate process. Let us assume that such a prediction $z(t)$ is available, so that we can compute would-be

cumulated intensity $L(t)$ (assuming that $J(t) \equiv 1$, say). Then, as regards the prediction of the counting process trajectories, the connection with Poisson process can be utilized:

α -prediction intervals for Poisson process are derived directly from α -quantiles of Poisson distribution. Intervals for counting process, conditionally for given intensity process, are obtained by a time transformation from the Poisson intervals. This transformation is possible due the continuous growth of cumulative intensity. Let T_i be times of events of a counting process with cumulated intensity $L(t)$. Then $\tau_i = L(T_i)$ are times of Poisson process with intensity 1.

Practical α -prediction band for counting process can be selected as the curve joining the end points of α^* -prediction intervals, for a conveniently chosen $\alpha^* > \alpha$. Proper α^* is obtained empirically, from analyzed or simulated data.

As regards the intervals and bands for the cumulative process, they depend on a complicated (and random) convolution of distributions of increments. We may consider an approximation depending only on cumulated means and variances of increments, though they actually depend also on the shape of distribution. A practical construction can for instance select the bound

$$b(t) = b_0(t) \cdot \{\mu(t, z(t)) + c\sigma(t, z(t))\},$$

where $b_0(t)$ is the corresponding bound (i.e. of the interval or of the band) for the counting process, c is a constant derived empirically for the actual shape of distribution of increments.

Another possibility consists in the simulation, i.e. in the "empirical" derivation of prediction regions. At a fixed point t , the empirical prediction interval is given directly by the empirical quantiles obtained from the sample of realized values $C_i(t), i = 1, 2, \dots, n$. The derivation of the empirical prediction bands for trajectories of $C(t)$ on the whole interval $[0, T]$ is not so easy, though one can imagine an algorithm shifting the bands joining the empirical quantiles until, for instance, 90% of observed trajectories are inside the region.

5. CONCLUSION

The main purpose of the paper was to describe and analyze the random process (called here the cumulative process) consisting in the combination of the counting process with the process of random increments, and to show its application to the models of damage processes in the field of reliability analysis. Successful use of such models requires the development of the methods for estimation of the model characteristics and also the methods for the prediction of process behaviour under different conditions. Then, provided we are able to influence these conditions (i.e. covariates entering the process), we are also able to control (to slower) the growth of the damage and to prolong the lifetime of the device.

REFERENCES

- [1] Andersen P.K., Borgan O., Gill R.D. and Keiding N. (1993). *Statistical Models Based on Counting Processes*. New York, Springer.
- [2] Andersen P. K. and Gill R. D. (1982). Cox's regression model for counting processes: A large sample study. *Annals of Statist.* 10, 1100-1120.
- [3] Antoch J. (1982). *Odhady hustoty*. Robust'82, JČSMF Praha.
- [4] Antoch J. (1986). *Neparametrické odhady regresních křivek*. Robust'86, JČSMF Praha.
- [5] Embrechts P., Klüppelberg K. and Mikosch T. (1997). *Modelling Extremal Events*. Springer, Berlin.

- [6] Fleming T.R. and Harrington D.P. (1991). Counting Processes and Survival Analysis. Wiley, New York.
- [7] Kahle W. and Wendt H. (2000). Statistical analysis of damage processes. In Recent Advances in Reliability Theory (N. Limnios and M. Nikulin, editors), Birkhauser, 199–212.
- [8] Michálek J. (1994). Jádrové odhady. Robust'94, JČMF Praha.
- [9] Orsáková M. (2000), in Robust'2000.
- [10] Rolski T., Schmidli H., Schmidt V. and Teugels J. (1999). Stochastic Processes for Insurance and Finance. Wiley.
- [11] Scheike T. H. (1994). Parametric regression for longitudinal data with counting process measurement times. Scand. J. Statist. 21, 245–263.
- [12] Volf P. (2000). On cumulative process model and its statistical analysis. Kybernetika 36, 165–176.

ÚTIA AV ČR, POD VODÁRENSKOU VĚŽÍ 4, CZ–182 08 PRAHA 8, CZECH REPUBLIC & KTM
TU LIBEREC, HÁLKOVA 6, CZ–461 17 LIBEREC, CZECH REPUBLIC
E-mail address: volf@utia.cas.cz

TU LIBEREC, PF KTM, HÁLKOVA 6, CZ–461 17 LIBEREC, CZECH REPUBLIC

VÝPOČET NIEKTORÝCH EXAKTNÝCH ROZDELENÍ POMOCOU CHARAKTERISTICKÝCH FUNKCIÍ

VIKTOR WITKOVSKÝ

ABSTRAKT. The inversion formula allows to evaluate (numerically) the distribution function of a linear combination of independent random variables. The method is not new, it is based on the result derived by Gil-Pelaez (1951). In this paper we discuss the method for evaluation of the distribution function of the linear combination of independent variables distributed as $\chi_\nu^2(\delta^2)$ (non-central chi-square distribution), $1/\chi_\nu^2$ (inverted chi-square distribution), t_ν (Student's t distribution) and F_{ν_1, ν_2} (Fisher-Snedecor distribution). The numerical evaluation of the distribution functions and the quantiles of the distributions is illustrated by several examples: the power analysis of one test, distribution of the Durbin-Watson test statistic, exact confidence interval for the common mean of several normal populations.

Резюме. Обратная формула позволяет вычислить функцию распределения линейной комбинации независимых случайных величин. Метод основывается на результатах полученных Гил-Пелаетом (1951). В статье рассмотрен метод вычисления функции распределения, линейной комбинации независимых случайных величин, которые распределены по $\chi_\nu^2(\delta^2)$ (нецентральное хи-квадрат распределение), $1/\chi_\nu^2$ (обратное хи-квадрат распределение), t_ν (распределение Студента) и F_{ν_1, ν_2} (распределение Фишер-Снедекора). Полученные значения функций распределения и квантилей иллюстрируются несколькими примерами.

1. ÚVOD

Gil-Pelaez (1951) publikoval verziu vety o inverznej transformácii charakteristickej funkcie, ktorá umožňuje výpočet distribučnej funkcie (v prípade spojitého rozdelenia aj hustoty) pomocou jednorozmernej numerickej integrácie. V tomto príspevku ponúkame podrobnejší prehľad metódy a jej aplikácie na výpočet distribučnej funkcie lineárnej kombinácie nezávislých náhodných premenných s rozdelením $\chi_\nu^2(\delta^2)$, $1/\chi_\nu^2$ (čo je špeciálny prípad inverzného gamma rozdelenia), t_ν a F_{ν_1, ν_2} . Charakteristické funkcie inverzného gamma, t a F rozdelenia závisia od špeciálnych matematických funkcií (vo všeobecnosti komplexnej premennej). Presnejšie, charakteristická funkcia inverzného gamma rozdelenia a Studentovho t rozdelenia závisí od modifikovanej Besselovej funkcie druhého druhu a charakteristická funkcia Fisherovho-Snedecorovho F rozdelenia závisí od konfluentnej hypergeometrickej funkcie druhého druhu.

Prvou zaujímavou aplikáciou tejto metódy bol tzv. Imhofov algoritmus (pozri Imhof (1961), tiež Davies (1973)), ktorý odvodil formulu na numerický výpočet

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62E15; Secondary 62E25.

Key words and phrases. Characteristic function of the $\chi_\nu^2(\delta^2)$, $1/\chi_\nu^2$, t_ν and F_{ν_1, ν_2} distribution; Linear combination of independent random variables.

The research has been supported by the Grant VEGA 1/7295/20 from the Science Grant Agency of the Slovak Republic.

rozdelenia lineárnej kombinácie nezávislých necentrálne rozdelených chi-kvadrát náhodných premenných. V prácach Witkovský (1999), Witkovský (2001a) a Witkovský (2001b) bola táto metóda výpočtu aplikovaná na výpočet distribučnej funkcie, kvantily a konfidenčné intervaly pre lineárne kombinácie inverzného gamma rozdelenia, Studentovho t rozdelenia a Fisherovho F rozdelenia. Ako prehľadový článok o numerickej inverzii charakteristickej funkcie ako nástroja na získanie distribučnej funkcie možno odporúčiť prácu Waller et al. (1995).

Táto metóda môže byť využitá aj na numerický výpočet hustoty a kvantilov rozdelenia lineárnej kombinácie nezávislých náhodných premenných. V príspevku je použitie metódy ilustrované na niekoľkých príkladoch: analýza sily testu, rozdelenie Durbin-Watsonovej štatistiky, Behrens-Fisherov problém, výpočet konfidenčného intervalu pre spoločnú strednú hodnotu výberu z niekoľkých normálnych populácií.

2. VETA O INVERZNEJ TRANSFORMÁCIÍ

V tejto časti uvádzame výsledok z práce Gil-Pelaez (1951), kde bola odvodená verzia vety o inverznej transformácii charakteristickej funkcie, ktorá je vhodná na numerický výpočet hodnoty distribučnej funkcie pomocou jednorozmernej numerickej integrácie.

Veta 1. *Nech $\phi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} dF(x)$ označuje charakteristickú funkciu jednorozmernej distribučnej funkcie $F(x)$. Potom, ak x označuje bod, v ktorom je distribučná funkcia spojitá, platia nasledujúce vzťahy:*

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left(\frac{e^{-itx}\phi(t) - e^{itx}\phi(-t)}{2it} \right) dt \\ (1) \quad &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Im} \left(\frac{e^{-itx}\phi(t)}{t} \right) dt. \end{aligned}$$

Navyše, ak ide o spojitú hustotu je daná vzťahom

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} (e^{itx}\phi(-t) - e^{-itx}\phi(t)) dt \\ (2) \quad &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} (e^{-itx}\phi(t)) dt. \end{aligned}$$

Základné vlastnosti podintegrovaného funkcie zo vzťahu (1) charakterizované v hraničných bodoch sú uvedené v nasledujúcom tvrdení:

Lema 1. *Nech $F(x)$ označuje distribučnú funkciu náhodnej premennej X , pričom existuje jej stredná hodnota $E(X)$, a nech $\phi(t)$ označuje jej charakteristickú funkciu. Potom*

$$(3) \quad \lim_{t \rightarrow 0} \operatorname{Im} \left(\frac{e^{-itx}\phi(t)}{t} \right) = E(X) - x, \quad a \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \operatorname{Im} \left(\frac{e^{-itx}\phi(t)}{t} \right) = 0.$$

Dôkaz. Pre prvú rovnosť platí:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \operatorname{Im} \left(\frac{e^{-itx}\phi(t)}{t} \right) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{i} \left(\frac{e^{-itx}\phi(t) - e^{itx}\phi(-t)}{2t} \right) \\ &= \frac{1}{i} (e^{-itx}\phi(t))' \Big|_{t=0} \\ &= \frac{1}{i} ((-ix)e^{-itx}\phi(t) + e^{-itx}\phi'(t)) \Big|_{t=0} \\ (4) \quad &= \frac{1}{i} (\phi'(t)|_{t=0} - ix) = E(X) - x. \end{aligned}$$

Druhá rovnosť vyplýva priamo z faktu, že funkcia $e^{-itx}\phi(t)$ je ohraničená v module. \square

Uvažujme teraz lineárnu kombináciu nezávislých náhodných premenných $X = \sum_{k=1}^n \lambda_k X_k$. Nech $\phi_{X_k}(t)$ označuje charakteristickú funkciu náhodnej premennej X_k , $k = 1, \dots, n$. Potom charakteristická funkcia náhodnej premennej X je

$$(5) \quad \phi_X(t) = \phi_{X_1}(\lambda_1 t) \cdots \phi_{X_n}(\lambda_n t),$$

a jej distribučnú funkciu $F_X(x) = \Pr\{X \leq x\}$ možno určiť zo vzťahu (1), pričom $\phi(t) = \phi_X(t)$. Všimnime si, že podľa lemy 1 platí

$$(6) \quad \lim_{t \rightarrow 0} \operatorname{Im} \left(\frac{e^{-itx} \phi_X(t)}{t} \right) = \sum_{k=1}^n \lambda_k E(X_k) - x,$$

$$(7) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \operatorname{Im} \left(\frac{e^{-itx} \phi_X(t)}{t} \right) = 0.$$

Vzťah (1) možno priamo využiť na približný numerický výpočet hodnoty distribučnej funkcie $F_X(x)$ použitím konečnej oblasti integrovania $0 \leq t \leq T$, $T < \infty$. Vo všeobecnosti, pri výpočte treba pracovať s komplexnými funkciami. Stupeň presnosti numerickej aproximácie závisí od chyby spôsobenej useknutím oblasti integrovania a od chyby spôsobenej numericou integračnou metódou.

3. CHARAKTERISTICKÉ FUNKCIE $\chi_\nu^2(\delta^2)$, $IG_{\alpha,\beta}$, t_ν A F_{ν_1,ν_2} NÁHODNEJ PREMENNEJ

V tejto časti uvedieme uzavretý tvar charakteristických funkcií pre náhodné premenné $\chi_\nu^2(\delta^2)$ (necentrálny chi-kvadrát) $IG_{\alpha,\beta}$ (inverzný gamma), t_ν (Studentovo t) a F_{ν_1,ν_2} (Fisher-Snedecorovo F).

3.1. Necentrálne chi-kvadrát rozdelenie.

Veta 2. Nech $X \sim \chi_\nu^2(\delta^2)$ označuje náhodnú premennú s necentrálnym chi-kvadrát rozdelením s ν stupňami voľnosti a parametrom necentrality δ^2 . Potom charakteristická funkcia náhodnej premennej X je

$$(8) \quad \phi_{\nu,\delta^2}^{\chi^2}(t) = E(e^{itX}) = (1 - 2it)^{-\frac{1}{2}\nu} \exp \left\{ \frac{it\delta^2}{1 - 2it} \right\}.$$

Dôkaz. Pozri napr. Stuart & Ord (1987, str. 278). \square

3.2. Inverzný gamma rozdelenie. Nech $Z \sim G(\alpha, \beta)$ označuje náhodnú premennú s gamma rozdelením, t.j. s hustotou $f_Z(z) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)\beta^\alpha} z^{\alpha-1} e^{-z/\beta}$, kde $\alpha > 0$ je parameter tvaru a $\beta > 0$ je parameter škály. Centrálne rozdelená chi-kvadrát náhodná premenná χ_ν^2 s ν stupňami voľnosti je špeciálnym prípadom gamma náhodnej premennej, $\chi_\nu^2 \sim G(\frac{\nu}{2}, 2)$. Potom náhodná premenná $Y = Z^{-1}$ je známa ako inverzná gamma náhodná premenná, $Y \sim IG(\alpha, \beta)$. Jej hustota rozdelenia $f_Y(y)$ je definovaná pre $y \geq 0$ vzťahom

$$(9) \quad f_Y(y) = \frac{1}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \left(\frac{1}{y} \right)^{\alpha+1} \exp \left\{ -\frac{1}{\beta y} \right\}.$$

Veta 3. *Nech $Y \sim IG(\alpha, \beta)$ označuje inverznú gamma náhodnú premennú s hustotou $f_Y(y)$ danou vzťahom (9). Potom charakteristická funkcia náhodnej premennej Y je*

$$(10) \quad \phi_{\alpha, \beta}^{IG}(t) = E(e^{itY}) = \frac{2(-it\beta)^{\frac{1}{2}\alpha} K_{\alpha} \left\{ \frac{2}{\beta}(-it\beta)^{\frac{1}{2}} \right\}}{\beta^{\alpha} \Gamma(\alpha)},$$

pričom $K_{\alpha}(z)$ označuje modifikovanú Besselovu funkciu druhého druhu.

Dôkaz. S využitím vzťahu (2.2.16.1) v práci Prudnikov et al. (1981):

$$(11) \quad \int_0^{\infty} y^{\nu-1} e^{-py - \frac{q}{y}} dy = 2 \left(\frac{q}{p} \right)^{\frac{\nu}{2}} K_{\nu} \left\{ 2(pq)^{\frac{1}{2}} \right\},$$

kde ν, p, q sú také komplexné čísla, že $\text{Re}(p) > 0$ a $\text{Re}(q) > 0$, a $K_{\nu}(z)$ označuje modifikovanú Besselovu funkciu druhého druhu (podrobnosti pozri v Abramiwitz & Stegun (1965, str. 374)), priamo dostávame Laplaceovu transformáciu Y :

$$(12) \quad E(e^{-tY}) = \frac{2(t\beta)^{\frac{1}{2}\alpha} K_{\alpha} \left\{ \frac{2}{\beta}(t\beta)^{\frac{1}{2}} \right\}}{\beta^{\alpha} \Gamma(\alpha)}.$$

Substitúciou t za $\varepsilon - it$, kde ε je malé kladné reálne číslo, a limitným prechodom $\varepsilon \rightarrow 0$, dostávame charakteristickú funkciu $\phi_{\alpha, \beta}^{IG}(t)$ náhodnej premennej Y , ktorá je daná vzťahom (10). □

Bez dôkazov uvedieme niektoré vlastnosti charakteristickej funkcie (10).

Lema 2. *Nech $Y \sim IG(\alpha, \beta)$ označuje inverznú gamma náhodnú premennú s charakteristickou funkciou $\phi_{\alpha, \beta}^{IG}(t)$ danou vzťahom (10). Nech $Z = \lambda Y$, kde λ je reálne číslo. Nech ďalej $\kappa_Z(t)$ označuje kumulantovú vytvárajúcu funkciu náhodnej premennej Z , teda $\kappa_Z(t) = \log \phi_Z(t) = \log \phi_{\alpha, \beta}^{IG}(\lambda t)$. Potom prvá a druhá derivácia funkcie $\kappa_Z(t)$ je daná vzťahmi:*

$$(13) \quad \kappa'_Z(t) = \frac{\alpha}{t} + \frac{i\lambda}{(-it\lambda\beta)^{\frac{1}{2}}} R(t),$$

$$(14) \quad \kappa''_Z(t) = -\frac{\alpha}{t^2} + \frac{i\lambda}{t\beta} \left(R^2(t) - \frac{(1+\alpha)\beta}{(-it\lambda\beta)^{\frac{1}{2}}} R(t) - 1 \right),$$

kde

$$(15) \quad R(t) = \frac{K_{\alpha+1} \left\{ \frac{2}{\beta}(-it\lambda\beta)^{\frac{1}{2}} \right\}}{K_{\alpha} \left\{ \frac{2}{\beta}(-it\lambda\beta)^{\frac{1}{2}} \right\}}.$$

Ako priamy dôsledok dostávame vzťah pre strednú hodnotu a rozptyl náhodnej premennej Z :

$$(16) \quad E(Z) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\kappa'_Z(t)}{i} = \frac{\lambda}{(\alpha - 1)\beta}, \quad \alpha > 1,$$

$$(17) \quad \text{Var}(Z) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\kappa''_Z(t)}{i^2} = \frac{\lambda^2}{(\alpha - 1)^2 \beta^2 (\alpha - 2)}, \quad \alpha > 2.$$

Lema 3. Nech $Y_n \sim IG(\alpha_n, \beta)$ označuje inverznú gamma náhodnú premennú s parametrami $\alpha_n = n + \frac{1}{2}$ a $\beta > 0$ pre $n = 0, 1, 2, \dots$. Označme ďalej $w = \frac{2}{\beta}(-2it)^{\frac{1}{2}}$. Potom charakteristická funkcia $\phi_n(t)$ náhodnej premennej Y_n je daná vzťahmi

$$(18) \quad \begin{aligned} \phi_0(t) &= \exp\{-w\} \\ \phi_1(t) &= \exp\{-w\}(1+w) \\ \phi_2(t) &= \exp\{-w\} \left(1+w+\frac{1}{3}w^2\right). \end{aligned}$$

Pre $n \geq 2$, možno funkciu $\phi_{n+1}(t)$ vyjadriť rekurentným vzťahom:

$$(19) \quad \phi_{n+1}(t) = \frac{w^2}{(2n+1)(2n-1)}\phi_{n-1}(t) + \phi_n(t).$$

3.3. Studentovo t rozdelenie.

Veta 4. Nech $X \sim t_\nu$ označuje náhodnú premennú, ktorá má Studentovo t rozdelenie s ν stupňami voľnosti, ktorej hustota je daná vzťahom:

$$(20) \quad f(x) = \frac{\Gamma(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})}{(\pi\nu)^{\frac{1}{2}}\Gamma(\frac{\nu}{2})} \left(1 + \frac{x^2}{\nu}\right)^{-\left(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}\right)},$$

pričom $-\infty < x < \infty$. Potom charakteristická funkcia náhodnej premennej $X \sim t_\nu$ je

$$(21) \quad \phi_\nu^t(t) = \frac{1}{2^{\frac{\nu}{2}-1}\Gamma(\frac{\nu}{2})} \left(\nu^{\frac{1}{2}}|t|\right)^{\frac{\nu}{2}} K_{\frac{\nu}{2}}\left\{\nu^{\frac{1}{2}}|t|\right\},$$

kde $K_\alpha\{z\}$ označuje modifikovanú Besselovu funkciu druhého druhu.

Dôkaz. Charakteristická funkcia náhodnej premennej $X \sim t_\nu$ je

$$(22) \quad \begin{aligned} \phi_\nu^t(t) &= E(e^{itX}) = \frac{\Gamma(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})}{(\pi\nu)^{\frac{1}{2}}\Gamma(\frac{\nu}{2})} \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} \left(1 + \frac{x^2}{\nu}\right)^{-\left(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}\right)} dx \\ &= \frac{\Gamma(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})\nu^{\frac{\nu}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(\frac{\nu}{2})} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{itx}}{(\nu + x^2)^{\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}}} dx \\ &= \frac{\Gamma(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})\nu^{\frac{\nu}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(\frac{\nu}{2})} \left[\int_{-\infty}^0 \frac{e^{itx}}{(\nu + x^2)^{\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}}} dx + \int_0^{\infty} \frac{e^{itx}}{(\nu + x^2)^{\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}}} dx \right] \\ &= \frac{\Gamma(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})\nu^{\frac{\nu}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(\frac{\nu}{2})} \int_0^{\infty} \frac{e^{-itx} + e^{itx}}{(\nu + x^2)^{\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}}} dx \\ &= \frac{\Gamma(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})\nu^{\frac{\nu}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma(\frac{\nu}{2})} \int_0^{\infty} \frac{2 \cos(tx)}{(\nu + x^2)^{\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}}} dx. \end{aligned}$$

V súlade so vzťahom (9.6.25) v Abramowitz & Stegun (1965, str. 376) dostávame

$$(23) \quad K_{\frac{\nu}{2}}\{tz\} = \frac{\Gamma(\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2})(2z)^{\frac{\nu}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}t^{\frac{\nu}{2}}} \int_0^{\infty} \frac{\cos(tx)}{(x^2 + z^2)^{\frac{\nu}{2} + \frac{1}{2}}} dx$$

pre $\operatorname{Re}(\nu) \geq -1$, $t > 0$ a $|\arg z| < \frac{1}{2}\pi$. Voľbou $z = \nu^{\frac{1}{2}}$ a s využitím faktu, že $\cos(tx) = \cos(-tx)$ dostávame tvrdenie vety. \square

Nasledujúca lema je v zhode so známym výsledkom daným v práci Mitra (1978). Pozri tiež Johnson et al. (1995, str. 367). Dôkaz vyplýva priamo z vlastností modifikovanej Besselovej funkcie druhého druhu, pozri Abramowitz & Stegun (1965, str. 444).

Lema 4. *Nech ν je nepárne číslo, $\nu = 2n + 1$ pre nejaké celé číslo n , potom charakteristická funkcia náhodnej premennej $X \sim t_\nu$ je daná vzťahom*

$$(24) \quad \phi_\nu^t(t) = \varphi_n(t) \exp \left\{ -\nu^{\frac{1}{2}} |t| \right\},$$

kde $\varphi_n(t)$ je funkcia daná rekurentným vzťahom

$$(25) \quad \varphi_{k+1}(t) = \frac{\nu t^2}{(2k+1)(2k-1)} \varphi_{k-1}(t) + \varphi_k(t),$$

$k = 1, \dots, n-1$, pričom $\varphi_0(t) = 1$ a $\varphi_1(t) = 1 + \nu^{\frac{1}{2}} |t|$.

Dôsledok 1. *Charakteristická funkcia $\phi_\nu^t(t)$ náhodnej premennej $X \sim t_\nu$ s $\nu = 2n + 1$ stupňami voľnosti, pričom $n = 0, 1, 2, 3$ je daná vzťahmi*

$$(26) \quad \begin{aligned} \phi_1^t(t) &= \exp \{-|t|\} \\ \phi_3^t(t) &= \left(1 + \sqrt{3}|t| \right) \exp \left\{ -\sqrt{3}|t| \right\} \\ \phi_5^t(t) &= \left(1 + \sqrt{5}|t| + \frac{5}{3}t^2 \right) \exp \left\{ -\sqrt{5}|t| \right\} \\ \phi_7^t(t) &= \left(1 + \sqrt{7}|t| + \frac{14}{5}t^2 + \frac{7\sqrt{7}}{15}|t|^3 \right) \exp \left\{ -\sqrt{7}|t| \right\}. \end{aligned}$$

3.4. Fisher-Snedecorovo F rozdelenie.

Veta 5. *Nech $X \sim F_{\nu_1, \nu_2}$ označuje náhodnú premennú, ktorá má centrálné Fisher-Snedecorovo F rozdelenie s ν_1 a ν_2 stupňami voľnosti a hustotou danou vzťahom*

$$(27) \quad f(x) = \frac{\Gamma(\frac{\nu_1}{2} + \frac{\nu_2}{2})}{\Gamma(\frac{\nu_1}{2})\Gamma(\frac{\nu_2}{2})} \left(\frac{\nu_1}{\nu_2}\right)^{\frac{\nu_1}{2}} x^{\frac{\nu_1}{2}-1} \left(1 + \frac{\nu_1}{\nu_2}x\right)^{-\left(\frac{\nu_1}{2} + \frac{\nu_2}{2}\right)},$$

pričom $0 < x < \infty$. Potom charakteristická funkcia náhodnej premennej $X \sim F_{\nu_1, \nu_2}$ je

$$(28) \quad \phi_{\nu_1, \nu_2}^F(t) = \frac{\Gamma(\frac{\nu_1}{2} + \frac{\nu_2}{2})}{\Gamma(\frac{\nu_2}{2})} \Psi \left(\frac{\nu_1}{2}, 1 - \frac{\nu_2}{2}; -it \frac{\nu_2}{\nu_1} \right),$$

pričom $\Psi(a, c; z)$ označuje konfluentnú hypergeometrickú funkciu druhého druhu definovanú integrálnou rovnicou

$$(29) \quad \Psi(a, c; z) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^\infty e^{-zt} t^{a-1} (1+t)^{c-a-1} dt.$$

Dôkaz. Phillips (1982). □

4. APLIKÁCIE

4.1. Analýza sily testu.

Príklad 1. Uvažujme experiment na porovnanie efektu rôznych druhov hnojív určených na zvýšenie úrody, v ktorom bude n experimentálnych políčok. Ide o tzv. *cross-over trial*, teda taký experiment, že na každom poličku použijeme všetky úrovne ošetrovania (kontrolná vzorka bez hnojiva, hnojivo typu P, hnojivo typu K, hnojivo typu N).

Po skončení experimentu chceme testovať, či rôzne úrovne ošetrovania majú rovnaký efekt na úrodu. Chceli by sme odhaliť (minimálny) rozdiel vo výnose asi 40g medzi jednotlivými ošetrovaniami. Z predchádzajúcich experimentov a z odborných článkov

je odhadnutá *between subject* smerodajná odchýlka (55.2g) a *within subject* smerodajná odchýlka (23g), ktoré budeme považovať za skutočné parametre. Otázka je, koľko políčok potrebujeme v experimente, aby sme s vysokou pravdepodobnosťou mohli zamietnuť nulovú hypotézu o rovnosti efektov jednotlivých ošetrení, pokiaľ skutočný rozdiel je aspoň 40g.

Budeme uvažovať zmiešaný vyvážený model dvojitého triedenia:

$$(30) \quad y_{ij} = \mu + \tau_i + \beta_j + \epsilon_{ij},$$

kde $i = 1, \dots, k$, pričom $k = 4$ a $j = 1, \dots, n$. Označme $y = (y_{11}, \dots, y_{kn})'$, $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_k)'$, $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n)'$, a $\epsilon = (\epsilon_{11}, \dots, \epsilon_{kn})'$. Pretože výber políčok do experimentu je náhodný z vopred určenej populácie políčok, budeme predpokladať normalitu rozdelenia vektora $\beta \sim N(0, \sigma_\beta^2 I_n)$ a vektora chýb $\epsilon \sim N(0, \sigma_\epsilon^2 I_{kn})$. Efekt ošetrenia budeme považovať za pevný (nenáhodný) pričom budeme predpokladať platnosť reštrikcie $\sum_{i=1}^k \tau_i = 0$ pre skutočné hodnoty úrovni ošetrenia. Model možno zapísať v maticovom tvare

$$(31) \quad y = (I_k \otimes I_n)\mu + (I_k \otimes I_n)\tau + (I_k \otimes I_n)\beta + (I_k \otimes I_n)\epsilon.$$

Navyše, z prepokladov vyplýva rozdelenie vektora y :

$$(32) \quad y \sim N((I_k \otimes I_n)\mu + (I_k \otimes I_n)\tau, \sigma_\beta^2(J_k \otimes I_n) + \sigma_\epsilon^2(I_k \otimes I_n)).$$

Zodpovedajúca tabuľka analýzy rozptylu pre daný model je nasledovná:

	Efekt	SS_i	DF_i	$E(MS_i)$
1	μ	$y'(J \otimes J)y$	1	$kn\mu^2 + \sigma_\epsilon^2$
2	τ	$y'(\bar{C} \otimes \bar{J})y$	$k - 1$	$\frac{n}{k-1} \sum_{i=1}^k \tau_i^2 + \sigma_\epsilon^2$
3	β	$y'(\bar{J} \otimes \bar{C})y$	$n - 1$	$k\sigma_\beta^2 + \sigma_\epsilon^2$
4	ϵ	$y'(\bar{C} \otimes \bar{C})y$	$(k - 1)(n - 1)$	σ_ϵ^2
5	Celkom	$y'(I \otimes I)y$	kn	$\mu^2 + \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \tau_i^2 + \sigma_\beta^2 + \sigma_\epsilon^2$

kde $\bar{J} = 1(1'1)^{-1}1'$ a $\bar{C} = I - \bar{J}$. Pre test hypotézy $H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_k = 0$ použijeme F -štatistiku z ANOVA-tabuľky:

$$(33) \quad F = \frac{MS_2}{MS_4} = \frac{y'(\bar{C} \otimes \bar{J})y/(k-1)}{y'(\bar{C} \otimes \bar{C})y/(k-1)(n-1)} \sim F_{k-1, (k-1)(n-1)}(\lambda),$$

ktorá má necentrálne F -rozdelenie s $k - 1$ a $(k - 1)(n - 1)$ stupňami voľnosti a parametrom necentrality $\lambda = n \sum_{i=1}^k \tau_i^2 / \sigma_\epsilon^2$. Za platnosti nulovej hypotézy má F -štatistika centrálnu F -rozdelenie s $k - 1$ a $(k - 1)(n - 1)$ stupňami voľnosti.

Parameter necentrality λ závisí od n , takže aj sila testu $\beta(n, \lambda(n))$ závisí od n . Chceme odhaliť akýkoľvek rozdiel úrovni ošetrení, ktorý prevyšuje 40g. Extrémnym prípadom je situácia keď $\tau_1 = 20$, $\tau_2 = -20$ a $\tau_3 = \tau_4 = 0$. V takom prípade $\sum_{i=1}^k \tau_i^2 = 800$. Takže, keď budeme predpokladať, že parameter necentrality bude $\lambda = n \sum_{i=1}^k \tau_i^2 / \sigma_\epsilon^2 = n \frac{800}{23^2} = 1.5123n$, potom silu testu možno vypočítať pomocou Imhofovho algoritmu zo vzťahu:

$$\begin{aligned} \beta(n, \lambda(n)) &= \Pr\left(F_{k-1, (k-1)(n-1)}(\lambda(n)) > F_{k-1, (k-1)(n-1)}^\alpha\right) \\ &= \Pr\left(\frac{\chi_{(k-1)}^2(\lambda(n))}{\chi_{(k-1)(n-1)}^2} \frac{(k-1)(n-1)}{(k-1)} > F_{k-1, (k-1)(n-1)}^\alpha\right) \\ &= \Pr\left(\frac{\chi_{(k-1)}^2(\lambda(n))}{(k-1)} - F_{k-1, (k-1)(n-1)}^\alpha \frac{\chi_{(k-1)(n-1)}^2}{(k-1)(n-1)} > 0\right), \end{aligned}$$

kde $F_{k-1,(k-1)(n-1)}^\alpha$ je kritická hodnota $F_{k-1,(k-1)(n-1)}$ rozdelenia, taká, že

$$\Pr(F_{k-1,(k-1)(n-1)} \leq F_{k-1,(k-1)(n-1)}^\alpha) = 1 - \alpha.$$

Výsledky takých výpočtov pre rôzne vopred zvolené hodnoty hladiny významnosti testu $\alpha = 0.01, 0.05, 0.1$ a pre $n = 2, \dots, 15$ sú uvedené v nasledujúcej tabuľke. Z uvedeného vyplýva, že potrebujeme aspoň 15 políčok v experimente, aby sme odhalili rozdiel medzi jednotlivými úrovňami ošetrovania väčší ako 40g s pravdepodobnosťou väčšou ako 90%.

n	$\alpha = 0.01$	$\alpha = 0.05$	$\alpha = 0.1$	n	$\alpha = 0.01$	$\alpha = 0.05$	$\alpha = 0.1$
2	0.0261	0.1200	0.2223	9	0.5843	0.8246	0.9033
3	0.0657	0.2326	0.3729	10	0.6644	0.8725	0.9335
4	0.1284	0.3575	0.5126	11	0.7339	0.9087	0.9549
5	0.2095	0.4796	0.6320	12	0.7925	0.9355	0.9697
6	0.3022	0.5901	0.7289	13	0.8406	0.9550	0.9799
7	0.3994	0.6848	0.8044	14	0.8792	0.9689	0.9868
8	0.4949	0.7627	0.8614	15	0.9096	0.9788	0.9914

4.2. Durbin-Watsonov test. Durbin-Watsonov test je často používaným nástrojom na testovanie adekvátnosti modelu. Presnejšie, test overuje nulovú hypotézu o nekorelovanosti chýb oproti alternatíve, že chyby sa správajú ako stacionárny AR(1) proces.

Uvažujme lineárny model

$$y = X\beta + \varepsilon,$$

kde X označuje (nenáhodnú) maticu plánu, β je vektor neznámych parametrov a vektor chýb $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I_n)$. Označme $e = (e_1, \dots, e_n)'$, $e = y - X\hat{\beta}$ vektor rezíduí, pričom $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$ je odhad parametra β obvyčajnou metódou najmenších štvorcov. Potom Durbin-Watsonova štatistika je definovaná ako

$$(34) \quad DW = \frac{\sum_{t=2}^n (e_t - e_{t-1})^2}{\sum_{t=1}^n e_t^2} = \frac{e' Ae}{e'e} = \frac{\varepsilon' M A M \varepsilon}{\varepsilon' M \varepsilon},$$

kde $M = I - X(X'X)^{-1}X'$ a matica A je

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nech $\varepsilon \sim N(0, V)$, kde V je pozitívne definitná matica, a nech Q je symetrická matica patričných rozmerov. Označme rôzne nenulové vlastné čísla matice QV ako $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ s násobnosťami ν_1, \dots, ν_m . Potom pre rozdelenie kvadratickej formy $\varepsilon' Q \varepsilon$ platí

$$(35) \quad \varepsilon' Q \varepsilon \sim \sum_{i=1}^m \lambda_i \chi_{\nu_i}^2,$$

kde $\chi_{\nu_i}^2$ sú nezávislé náhodné premenné s centrálnym chi-kvadrát rozdelením a ν_i stupňami voľnosti.

Za platnosti nulovej hypotézy teda platí $V = \sigma^2 I_n$. Na testovanie nulovej hypotézy oproti alternatíve (existuje pozitívna autokorelácia prvého rádu) využijeme p -hodnotu, ktorá je daná ako

$$\begin{aligned}
 p &= \Pr(DW < DW_{obs}) \\
 &= \Pr\left(\frac{\varepsilon' M A M \varepsilon}{\varepsilon' M \varepsilon} < DW_{obs}\right) \\
 &= \Pr(\varepsilon' M A M \varepsilon - DW_{obs} \varepsilon' M \varepsilon < 0) \\
 &= \Pr(\varepsilon' M (A - DW_{obs} I_n) M \varepsilon < 0) \\
 (36) \quad &= \Pr\left(\sum_{i=1}^m \lambda_i \chi_{\nu_i}^2 < 0\right),
 \end{aligned}$$

kde DW_{obs} označuje realizáciu Durbin-Watsonovej DW štatistiky a $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ sú rôzne nenulové vlastné čísla matice $M(A - DW_{obs} I_n)M$ s násobnosťami ν_1, \dots, ν_m . Poznávame, že za platnosti nulovej hypotézy pravdepodobnosť (36) nezávisí od parametra σ^2 . Nulovú hypotézu zamietame pokiaľ p -hodnota je menšia ako zvolená hladina významnosti testu.

Príklad 2. Pri analýze lineárneho modelu

$$y_t = \beta_0 + \beta_1 t + \varepsilon_t, \quad t = 1, \dots, 10,$$

bola určená hodnota Durbin-Watsonovej štatistiky $DW_{obs} = 0.879$. Nenulové vlastné čísla matice $M(A - 0.879 I_{10})M$ sú

λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7	λ_8
-0.4970	-0.0628	0.5030	1.1187	1.7390	2.2960	2.7390	3.0231

pričom násobnosť všetkých je rovná jednej. Potom p -hodnota, ktorá slúži na testovanie nulovej hypotézy oproti alternatíve, že existuje pozitívna autokorelácia, určená podľa (36), je $p = 0.0043$. Teda, nulovú hypotézu, že chyby sú nekorelované, na hladine významnosti $\alpha = 0.05$, zamietame.

Poznávame, že hodnota 0.879 je zhodná s dolnou medzou DW_L pre kvantil rozdelenia štatistiky DW , ktorá je určená z tabuliek Durbin-Watsonovej štatistiky pre $n = 10$ a $k' = 1$ (počet regresorov bez interceptu) na hladine významnosti $\alpha = 0.05$. Pre hornú medzu $DW_U = 1.320$ dostávame p -hodnotu $p = 0.0506$.

4.3. Behrens-Fisherov problém. Nech $X = (X_1, \dots, X_m) \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$ a $Y = (Y_1, \dots, Y_n) \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$ sú dva nezávislé náhodné výbery z normálnych populácií s charakterizovaných parametrami μ_1, μ_2, σ_1^2 , a σ_2^2 . Nech $\bar{X} = \frac{1}{m} \sum X_k$, $\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum Y_k$ označujú výberové priemery a $S_1^2 = \frac{1}{m} \sum (X_k - \bar{X})^2$, $S_2^2 = \frac{1}{n} \sum (Y_k - \bar{Y})^2$ označujú výberové rozptyly. $(\bar{X}, \bar{Y}, S_1^2, S_2^2)$ vytvára postačujúcu štatistiku pre parametre rozdelenia. Platí, že

$$(37) \quad \bar{X} \sim N\left(\mu_1, \frac{\sigma_1^2}{m}\right) \quad \text{a} \quad \bar{Y} \sim N\left(\mu_2, \frac{\sigma_2^2}{n}\right),$$

$$(38) \quad \frac{m}{\sigma_1^2} S_1^2 \sim \chi_{m-1}^2 \quad \text{a} \quad \frac{n}{\sigma_2^2} S_2^2 \sim \chi_{n-1}^2,$$

sú navzájom nezávislé náhodné premenné.

Nech $\theta = \mu_1 - \mu_2$ a $\vartheta = (\sigma_1^2, \sigma_2^2)$. Chceli by sme testovať hypotézu

$$(39) \quad H_0 : \theta = \theta_0 \quad \text{vs.} \quad H_1 : \theta \neq \theta_0.$$

V tomto testovacom probléme je parametrom záujmu θ , zatiaľ čo ϑ je vektor rušivých parametrov.

Nech $x = (x_1, \dots, x_m)$ je vektor realizovaných hodnôt náhodného vektora X a $y = (y_1, \dots, y_n)$ je vektor realizovaných hodnôt náhodného vektora Y . Pre testovanie hypotézy H_0 a konštrukciu intervalového odhadu pre θ definujeme zovšeobecnenú testovaciu premennú (pozri Tsui & Weerahandi (1989) a Weerahandi (1995)):

$$(40) \quad T(X, Y, x, y, \theta, \vartheta) = \frac{(\bar{X} - \bar{Y} - \theta)^2}{\left(\frac{\sigma_1^2}{m} + \frac{\sigma_2^2}{n}\right)} \left(\frac{\sigma_1^2 s_1^2}{m S_1^2} + \frac{\sigma_2^2 s_2^2}{n S_2^2} \right).$$

Poznamenávame, že pre ľubovoľné dané $\theta = \theta_0$, $t_{obs} = (\bar{x} - \bar{y} - \theta_0)^2$ nezávisí od neznámych parametrov a za platnosti H_0 označme $T_0 = T(X, Y, x, y, \theta_0, \vartheta)$. Potom rozdelenie náhodnej premennej T_0 je

$$(41) \quad T_0 \sim \chi_1^2 \left(\frac{s_1^2}{\chi_{m-1}^2} + \frac{s_2^2}{\chi_{n-1}^2} \right).$$

Pre pevné x, y a $\vartheta = (\sigma_1^2, \sigma_2^2)$, T je stochasticky rastúca pre $\theta > \bar{x} - \bar{y}$ a stochasticky klesajúca pre $\theta < \bar{x} - \bar{y}$.

Zovšeobecnená p -hodnota je definovaná ako $p(\theta) = \Pr \{T > t_{obs} | \theta\}$. Test významnosti hypotézy H_0 je založený na $p(\theta_0)$:

$$(42) \quad p(\theta_0) = \Pr \left\{ \frac{s_1^2}{\chi_{m-1}^2} + \frac{s_2^2}{\chi_{n-1}^2} - \frac{(\bar{x} - \bar{y} - \theta_0)^2}{\chi_1^2} > 0 \right\}.$$

Hypotézu H_0 zamietame, pokiaľ je p -hodnota malá (menšia ako zvolená kritická p -hodnota, povedzme $p_{crit} = 0.05$).

Potom $100(1 - p_{crit})\%$ interval spoľahlivosti založený na zovšeobecnenej p -hodnote je

$$(43) \quad (\bar{x} - \bar{y}) \pm \delta_{crit}$$

pričom δ_{crit} je dané vzťahom:

$$(44) \quad p_{crit} = \Pr \left\{ \frac{s_1^2}{\chi_{m-1}^2} + \frac{s_2^2}{\chi_{n-1}^2} - \frac{\delta_{crit}^2}{\chi_1^2} > 0 \right\}.$$

Príklad 3. Simulovali sme realizácie z dvoch náhodných výberov $X_i \sim N(3, 4)$, $i = 1, \dots, 7$, a $Y_j \sim N(5, 9)$, $j = 1, \dots, 10$, pričom $\bar{x} = 2.871$, $\bar{y} = 5.8685$, $s_1^2 = 4.1014$, a $s_2^2 = 7.5135$.

Potom, podľa (42), p -hodnota pre test významnosti hypotézy $H_0 : \theta = 0$ vs. $H_1 : \theta \neq 0$ je

$$(45) \quad p = \Pr \left\{ \frac{4.1014}{\chi_6^2} + \frac{7.5135}{\chi_9^2} - \frac{(-2.9975)^2}{\chi_1^2} > 0 \right\} = 0.0424,$$

takže, pre $p_{crit} = 0.05$ zamietame nulovú hypotézu, že $\theta = 0$. Podľa (43) a (44) 95% intervalový odhad parametra $\theta = \mu_1 - \mu_2$ založený na zovšeobecnenej p -hodnote je

$$\langle -5.8732; -0.1218 \rangle.$$

4.4. Konfidenčný interval pre spoločnú strednú hodnotu z niekoľkých normálnych populácií. Budeme predpokladať, že máme náhodný výber z $k \geq 2$ nezávislých populácií, pričom rozdelenie i -tej populácie je normálne, $N(\mu, \sigma_i^2)$, so spoločnou strednou hodnotou μ a (vo všeobecnosti nerovnakým) rozptylom σ_i^2 , $i = 1, \dots, k$.

Nech X_{ij} , $j = 1, \dots, n_i$ ($n_i \geq 2$), označuje náhodný výber z i -tej populácie. Definujeme \bar{X}_i a S_i^2 :

$$(46) \quad \bar{X}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} X_{ij}, \quad S_i^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{X}_i)^2,$$

$i = 1, \dots, k$. Náhodné premenné \bar{X}_i a S_i^2 sú navzájom nezávislé a

$$(47) \quad \bar{X}_i \sim N\left(\mu, \frac{\sigma_i^2}{n_i}\right), \quad (n_i - 1)S_i^2 \sim \sigma_i^2 \chi_{n_i-1}^2, \quad i = 1, \dots, k.$$

Odtiaľ dostávame

$$(48) \quad t_i = \frac{\sqrt{n_i}(\bar{X}_i - \mu)}{S_i} \sim t_{n_i-1}, \quad F_i = \frac{n_i(\bar{X}_i - \mu)^2}{S_i^2} \sim F_{1, n_i-1},$$

$i = 1, \dots, k$.

Fairweather (1972) navrhol konštrukciu exaktného konfidenčného intervalu pre μ za pomoci váženej lineárnej kombinácie Studentových t_i štatistík. Presnejšie

$$(49) \quad W_t = \sum_{i=1}^k u_i t_i, \quad u_i = \frac{(\text{Var}(t_i))^{-1}}{\sum_{i=1}^k (\text{Var}(t_i))^{-1}} = \frac{(n_i - 3)/(n_i - 1)}{\sum_{j=1}^k (n_j - 3)/(n_j - 1)}.$$

Rozptyl $\text{Var}(t_i)$ existuje iba keď $n_i > 3$. Ak ako $b_{\alpha/2}$ označíme hornú kritickú hodnotu rozdelenia náhodnej premennej W_t , takú, že pre dané $\alpha \in (0, 1)$

$$(50) \quad \Pr(|W_t| \leq b_{\alpha/2}) = 1 - \alpha,$$

potom exaktný (symetrický, obojstranný) $100(1 - \alpha)\%$ -konfidenčný interval pre μ je určený vzťahom

$$(51) \quad \left\langle \frac{\sum_{i=1}^k \sqrt{n_i} u_i \bar{X}_i / S_i - b_{\alpha/2}}{\sum_{i=1}^k \sqrt{n_i} u_i / S_i}, \frac{\sum_{i=1}^k \sqrt{n_i} u_i \bar{X}_i / S_i + b_{\alpha/2}}{\sum_{i=1}^k \sqrt{n_i} u_i / S_i} \right\rangle.$$

Na odvodenie približnej kritickej hodnoty $b_{\alpha/2}^*$ Fairweather (1972) navrhol aproximovať rozdelenie náhodnej premennej W_t rozdelením ct_ν , kde ν a $c > 0$ sú určené tak, aby sa druhý a štvrtý moment ct_ν zhodoval s momentami W_t . Teda, ak navyše $n_i > 5$ pre všetky $i = 1, \dots, k$, dostávame

$$(52) \quad \nu = 4 + \frac{1}{\sum_{i=1}^k u_i^2 / (n_i - 5)}, \quad c = \sqrt{\frac{\nu - 2}{\nu \sum_{i=1}^k (n_i - 3) / (n_i - 1)}}.$$

Jordan and Krishnamoorthy (1996) navrhli použiť váženú lineárnu kombináciu F_i štatistík, pričom váhy sú inverzne proporcionálne rozptylom $\text{Var}(F_i)$, teda

$$(53) \quad W_f = \sum_{i=1}^k w_i F_i, \quad w_i = \frac{[(n_i - 3)^2 (n_i - 5)] / [(n_i - 1)^2 (n_i - 2)]}{\sum_{i=1}^k [(n_j - 3)^2 (n_j - 5)] / [(n_j - 1)^2 (n_j - 2)]}.$$

Rozptyl $\text{Var}(F_i)$ existuje iba keď $n_i > 5$. Ak ako a_α označíme kritickú hodnotu rozdelenia náhodnej premennej W_f , takú, že pre $\alpha \in (0, 1)$

$$(54) \quad \Pr(W_f \leq a_\alpha) = 1 - \alpha,$$

potom exaktný (symetrický, obojstranný) $100(1 - \alpha)\%$ -konfidenčný interval pre μ je určený vzťahom

$$(55) \quad \left\langle \sum_{i=1}^k p_i \bar{X}_i - \Delta, \sum_{i=1}^k p_i \bar{X}_i + \Delta \right\rangle,$$

kde

$$(56) \quad p_i = \frac{w_i n_i / S_i^2}{\sum_{j=1}^k w_j n_j / S_j^2}$$

a

$$(57) \quad \Delta^2 = \frac{a_\alpha}{\sum_{i=1}^k w_i n_i / S_i^2} - \left\{ \sum_{i=1}^k p_i \bar{X}_i^2 - \left(\sum_{i=1}^k p_i \bar{X}_i \right)^2 \right\}.$$

Na určenie približnej hodnoty a_α^* Jordan and Krishnamoorthy (1996) navrhli aproximovať rozdelenie náhodnej premennej W_f rozdelením $cF_{k,\nu}$, kde ν a $c > 0$ sú určené tak, že prvé dva momenty $cF_{k,\nu}$ sú zhodne s prvými dvomi momentami W_f . Presnejšie, ak $n_i > 5$ pre všetky $i = 1, \dots, k$, potom

$$(58) \quad \nu = \frac{4kM_2 - 2(k+2)M_1^2}{kM_2 - (k+2)M_1^2}, \quad c = \frac{\nu - 2}{\nu} M_1,$$

kde

$$(59) \quad M_1 = E(W_f) = \sum_{i=1}^k \frac{w_i(n_i - 1)}{(n_i - 3)}$$

a

$$(60) \quad M_2 = E(W_f)^2 = 3 \sum_{i=1}^k \frac{w_i^2(n_i - 1)^2}{(n_i - 3)(n_i - 5)} + 2 \sum_{i>j} \frac{w_i w_j (n_i - 1)(n_j - 1)}{(n_i - 3)(n_j - 3)}.$$

Nasledujúci príklad bol analyzovaný v článkoch Jordan and Krishnamoorthy (1996) a Yu et al. (1999). Tu porovnáme konfidenčné intervaly určené pomocou približných a exaktných kritických hodnôt.

Príklad 4. Meier (1953) študoval percentuálny podiel albuminu v proteinovej plazme ľudí.

Experiment	n_i	X_i	S_i^2
A	12	62.3	12.986
B	15	60.3	7.840
C	7	59.5	33.433
D	16	61.5	18.513

Dáta v tabuľke sú založené ne štyroch nezávislých experimentoch. Predpoklad je, že výbery pochádzajú z normálnej populácie.

Chceme kombinovať výsledky štyroch experimentov tak, aby sme skonštruovali $100(1 - \alpha)\%$ -konfidenčný interval pre spoločnú strednú hodnotu μ pre $\alpha = 0.05$.

Približnú kritickú hodnotu $b_{0.025}^*$ váženej lineárnej kombinácie

$$W_t = \sum_{i=1}^4 u_i t_{n_i-1}$$

s váhami

$$u = (0.2550, 0.2671, 0.2078, 0.2701),$$

možno určiť podľa (52) z rozdelenia náhodnej premennej ct_ν , pričom $\nu = 26.3984$ a $c = 0.5367$. Táto aproximácia vedie k hodnote $b_{0.025}^* = 1.1024$. Potom výsledná realizácia konfidenčného intervalu pre μ je

$$\langle 59.8973, 62.1921 \rangle.$$

Skutočná pravdepodobnosť pokrytia (spočítaná numerickou integráciou na základe (1), (5) a (21)) je však

$$\Pr(|W_t| < b_{0.025}^*) = 0.9504.$$

Exaktná kritická hodnota (zaokrúhlená na štyri desatinné miesta) je $b_{0.025} = 1.1002$. Potom exaktný konfidenčný interval je

$$\langle 59.8996, 62.1899 \rangle.$$

Približnú kritickú hodnotu $a_{0.05}^*$ váženej lineárnej kombinácie

$$W_f = \sum_{i=1}^4 w_i F_{1, n_i - 1}$$

s váhami

$$w = (0.2601, 0.3137, 0.0987, 0.3276),$$

možno určiť podľa (58) z rozdelenia náhodnej premennej $cF_{4, \nu}$, pričom $\nu = 15.6082$ a $c = 1.0548$. Táto aproximácia vedie k hodnote $a_{0.05}^* = 3.1918$ a výsledná realizácia konfidenčného intervalu pre μ je

$$\langle 59.5621, 62.4430 \rangle.$$

Skutočná pravdepodobnosť pokrytia (spočítaná numerickou integráciou na základe (1), (5) a (28)) je

$$\Pr(W_f < a_{0.05}^*) = 0.9503.$$

Exaktná kritická hodnota (zaokrúhlená na štyri desatinné miesta) je $a_{0.05} = 3.1853$. Potom exaktný konfidenčný interval je

$$\langle 59.5640, 62.4410 \rangle.$$

5. ZÁVEREČNÉ POZNÁMKY

Implementácia uvedených algoritmov je pomerne jednoduchá, za predpokladu, že máme k dispozícii spoľahlivé a efektívne algoritmy na výpočet Besselovej funkcie druhého rádu, resp. konfluentnej hypergeometrickej funkcie druhého rádu. Pozri napr. Amos (1986), Nardin et al. (1992).

LITERATÚRA

- [1] Amos, D.E., 1986. A portable package for Bessel functions of a complex argument and nonnegative order. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 12, 265–273.
- [2] Abramowitz, M., Stegun, I.A., 1965. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York.
- [3] Davies, R.B., 1973. Numerical inversion of a characteristic function. *Biometrika* 60 (1973), pp. 415–417.
- [4] Fairweather, W.R., 1972. A method of obtaining an exact confidence interval for the common mean of several normal populations. *Applied Statistics* 21, 229–233.
- [5] Gil-Pelaez, J., 1951. Note on the inversion theorem. *Biometrika* 38, 481–482.
- [6] Imhof, J.P., 1961. Computing the distribution of quadratic forms in normal variables. *Biometrika* 48, 419–426.
- [7] Johnson, N.L., Kotz, S., Balakrishnan, N., 1995. *Continuous Univariate Distributions*. Volume 2. Second Edition. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- [8] Jordan, S.M., Krishnamoorthy, K., 1996. Exact confidence intervals for the common mean of several normal populations. *Biometrics* 52, 77–86.
- [9] Mitra, S.S., 1978. Recursive formula for the characteristic function of Student t distributions for odd degrees of freedom. Manuscript, Pennsylvania State University, State College.
- [10] Nardin, M., Perger, W.F., Bhalla, A., 1992. Algorithm 707: Solution to the confluent hypergeometric function. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 18, 345–349.
- [11] Phillips, P.C.B., 1982. The true characteristic function of the F distribution. *Biometrika* 69, 261–264.

- [12] Prudnikov, A.P., Brychkov, Y.A., Marichev, O.I., 1981. *Integrals i Rjady. (Integrals and Series)*. Nauka, Moscow.
- [13] Stuart, A., Ord, J.K., 1987. *Kendall's Advanced Theory of Statistics, Volume I, Distribution Theory (5th ed.)*, Oxford: Oxford University Press.
- [14] Tsui, K.W., Weerahandi, S., 1989. Generalized p values in significance testing of hypotheses in the presence of nuisance parameters. *J. Am. Statist. Assoc.* 84, pp. 602–607.
- [15] Weerahandi, S., 1995. *Exact Statistical Methods for Data Analysis*. Springer-Verlag, New York.
- [16] Witkovský, V., 1999. Exact tests of variance components using generalized p -values. *DA-TASTAT 99, Rusava-Jesřábí, 30.8.–3.9. 1999, ĀR*.
- [17] Witkovský, V., 2001a. Computing the distribution of a linear combination of inverted gamma variables. Submitted for publication to *Kybernetika*.
- [18] Witkovský, V., 2001b. On the exact computation of the density and of the quantiles of linear combinations of t and F random variables. *Journal of Statistical Planning and Inference* 94, 1–13.
- [19] Yu, P.L.H., Sun, Y., Sinha, B.K., 1999. On exact confidence intervals for the common mean of several normal populations. *Journal of Statistical Planning and Inference* 81, 263–277.

SLOVAK ACADEMY OF SCIENCES, INSTITUTE OF MEASUREMENT SCIENCE, DUBRAVSKA CESTA 9,
SK – 842 19 BRATISLAVA, SLOVAKIA
E-MAIL: umerwitk@savba.sk

JÁDROVÉ ODHADY DERIVACE REGRESNÍ FUNKCE

JIŘÍ ZELINKA, IVANA HOROVÁ

ABSTRAKT. It is possible to review the quality of kernel estimations of the regression function and its derivative from several points of view. According to them we can choose the parameters influencing the kernel estimations. The parameters are: the bandwidth, the shape and the order of the used kernel function. It can be shown that it is possible to introduce the criterion for the optimal shape as well as for optimal order of kernel function. This paper shortly aspires to summarize attained results from this branch and to demonstrate their application for simulated and real data sets.

Резюме: Качество оценок функции регрессии и её производной при помощи ядер возможно обсуждать из различных точек зрения и смотря по ним потом выбирать параметры которые влияют на эти оценки: прежде всего это ширина сглаживающего окна, но тоже форма ядра и его порядок. Возможно ввести критерий не только для выбора оптимальной формы ядра, но тоже для его порядка. Эта статья кратко подытоживает результаты в этой области включительно их приложений к имитирующим и реальным данным.

V tomto příspěvku budeme uvažovat pouze model s pevným plánem, tj. mějme pevně zadané body x_i , $i = 1, \dots, n$, v nich naměřené hodnoty Y_i a předpokládáme model v obecném tvaru

$$(1) \quad Y_i = m(x_i) + \sqrt{v(x_i)} \cdot \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

kde m je neznámá regresní funkce, ε_i jsou nezávislé chyby jednotlivých měření, pro něž platí

$$E\varepsilon_i = 0, \quad \text{Var}(\varepsilon_i) = 1, \quad i = 1, \dots, n,$$

a $v(x)$ je nezáporná varianční funkce. Bez újmy na obecnosti můžeme dále předpokládat, že všechny body x_i leží v intervalu $[0, 1]$ a jsou vzestupně uspořádány.

Pro odhad regresní funkce m , resp. její ν -té derivace $m^{(\nu)}$ použijeme tzv. jádrové odhady. Ty se konstruují užitím jádrových funkcí (zkráceně jader) označovaných zpravidla $K(x)$. Ukazuje se, že při výpočtu statistických vlastností jádrových odhadů regresní funkce je vhodné použít jádra splňující určité momentové podmínky. Proto zavádíme následující definici:

Definice: Nechť ν , k jsou nezáporná celá čísla stejné parity, $k > \nu$. Symbolem $\mathcal{M}_{\nu, k}$ označíme třídu funkcí K spojitých na \mathbf{R} s nosičem $[-1, 1]$, které jsou na tomto intervalu lipschitzovsky spojitě a které splňují následující podmínky:

$$(2) \quad \int_{-1}^1 x^j K(x) dx = \begin{cases} 0, & 0 \leq j < k, j \neq \nu \\ (-1)^{\nu \nu!}, & j = \nu \\ \beta_k \neq 0, & j = k. \end{cases}$$

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 93E14; Secondary 30C40.

Klíčová slova. Jádrové odhady, Gasser-Müllerův odhad, křížové ověřování.

Příspěvek vznikl s podporou výzkumného záměru MŠMT, CEZ: J07/98:143100001.

Poznámka: Ze spojitosti funkcí K plyne $K(-1) = K(1) = 0$. Funkce třídy $\mathcal{M}_{\nu,k}$ nazýváme jádra řádu k .

Odhad ν -té derivace funkce m můžeme nyní zapsat pomocí Gasser-Müllerova tvaru odhadu jako

$$(3) \quad \hat{m}_{GM}^{(\nu)}(x) = \hat{m}^{(\nu)}(x) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{h^{\nu+1}} \int_{s_{i-1}}^{s_i} K\left(\frac{x-u}{h}\right) du Y_i,$$

kde $K \in \mathcal{M}_{\nu,k}$ a hraniční meze jednotlivých integrálů jsou ve tvaru

$$s_0 = 0, \quad s_i = (x_{i+1} + x_i)/2 \text{ pro } i = 1, \dots, n-1, \quad s_n = 1.$$

Místo $\hat{m}^{(0)}$ budeme psát \hat{m} . Parametr h se nazývá šířka vyhlazovacího okna a má podstatný vliv na kvalitu jádrového odhadu regresní funkce m nebo její derivace. Mezi další významné faktory ovlivňující odhad patří tvar jádra K a také jeho řád k .

Pro posouzení kvality jádrového odhadu v bodě x zpravidla používáme střední kvadratickou chybu

$$(4) \quad \begin{aligned} MSE(\hat{m}^{(\nu)}(x), h) &= E\left(\hat{m}^{(\nu)}(x) - m^{(\nu)}(x)\right)^2 = \\ &= Var \hat{m}^{(\nu)}(x) + (E\hat{m}^{(\nu)}(x) - m(x))^2. \end{aligned}$$

Za předpokladu dostatečné hladkosti funkce m lze tuto střední kvadratickou chybu v bodě x zapsat ve tvaru (viz [5])

$$(5) \quad MSE(\hat{m}^{(\nu)}(x), h) = \frac{v(x)[V(K) + o(1)]}{nh^{2\nu+1}} + h^{2(k-\nu)} \left[\frac{\beta_k^2}{(k!)^2} \left(m^{(k)}(x)\right)^2 + o(1) \right],$$

kde

$$V(K) = \int_{-1}^1 K^2(t) dt, \quad \beta_k = \int_{-1}^1 t^k K(t) dt.$$

Vidíme, že pokud n poroste do nekonečna a současně se bude měnit šířka vyhlazovacího okna $h = h_n$ tak, aby platilo $h_n \rightarrow 0$, $n \cdot h_n^{2\nu+1} \rightarrow \infty$, bude střední kvadratická chyba $MSE(\hat{m}^{(\nu)}(x), h_n)$ konvergovat k nule, tj. jedná se o konzistentní odhad $m^{(\nu)}$ v bodě x .

V dalším textu budeme používat tzv. hlavní člen střední kvadratické chyby, který označíme \overline{MSE} a který dostaneme zanedbáním členů $o(1)$ konvergujících k nule pro $n \rightarrow \infty$. Platí tedy

$$(6) \quad \overline{MSE}(\hat{m}^{(\nu)}(x), h) = \frac{v(x)V(K)}{nh^{2\nu+1}} + h^{2(k-\nu)} \frac{\beta_k^2}{(k!)^2} \left(m^{(k)}(x)\right)^2$$

Jako globální kritérium kvality odhadu použijeme průměrnou střední kvadratickou chybu

$$\begin{aligned} AMSE(\hat{m}^{(\nu)}, h) &= \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E\left(\hat{m}^{(\nu)}(x_i) - m^{(\nu)}(x_i)\right)^2 \approx \\ &\approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{v(x_i)V(K)}{nh^{2\nu+1}} + h^{2(k-\nu)} \frac{\beta_k^2}{(k!)^2} \left(m^{(k)}(x_i)\right)^2 \right) = \\ &= \frac{V(K)}{nh^{2\nu+1}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n v(x_i) + h^{2(k-\nu)} \frac{\beta_k^2}{(k!)^2} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(m^{(k)}(x_i)\right)^2. \end{aligned}$$

Pokud označíme

$$\bar{v} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n v(x_i), \quad (\bar{m}^{(k)})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(m^{(k)}(x_i)\right)^2,$$

dostaneme pro hlavní člen průměrné střední kvadratické chyby vztah

$$(7) \quad \overline{AMSE}(\hat{m}^{(\nu)}, h) = \frac{V(K)\bar{v}}{nh^{2\nu+1}} + h^{2(k-\nu)}\beta_k^2 \frac{(\bar{m}^{(k)})^2}{(k!)^2}.$$

Známe-li varianční funkci v i regresní funkci m (např. pro simulovaná data), můžeme určit hodnotu šířky okna $h_{opt,\nu,k}$, která minimalizuje \overline{AMSE} . Výpočtem dostaneme

$$(8) \quad h_{opt,\nu,k}^{2k+1} = \frac{(2\nu+1)V(K)\bar{v}(k!)^2}{2n(k-\nu)\beta_k^2(\bar{m}^{(k)})^2}.$$

Dalším cílem je taková úprava vztahu (7), která by umožnila zbavit se neznámého výrazu $\bar{m}^{(k)}$. K tomu použijeme následující postup použitý v [4]:

Zavedeme označení $K_\delta(\cdot) = \frac{1}{\delta^{\nu+1}}K(\frac{\cdot}{\delta})$ pro $\delta > 0$. Použitím jádra K_δ dostaneme stejný efekt, jako kdybychom šířku vyhlazovacího okna h nahradili šířkou $h^* = h/\delta$. Platí totiž, že „množství vyhlazení“ pomocí jádra K s vyhlazovacím parametrem h je stejné jako „množství vyhlazení“ jádrem K_δ s parametrem $h^* = h/\delta$, neboť

$$\begin{aligned} \hat{m}^{(\nu)}(x) &= \frac{1}{h^{\nu+1}} \sum_{i=1}^n \int_{s_{i-1}}^{s_i} K\left(\frac{x-u}{h}\right) du Y_i = \\ &= \frac{1}{(h^*\delta)^{\nu+1}} \sum_{i=1}^n \int_{s_{i-1}}^{s_i} K\left(\frac{x-u}{h^*\delta}\right) du Y_i = \\ &= \frac{1}{h^{*\nu+1}} \sum_{i=1}^n \int_{s_{i-1}}^{s_i} \frac{1}{\delta^{\nu+1}} K\left(\frac{x-u}{h^*}\right) du Y_i = \\ &= \frac{1}{h^{*\nu+1}} \sum_{i=1}^n \int_{s_{i-1}}^{s_i} K_\delta\left(\frac{x-u}{h^*}\right) du Y_i. \end{aligned}$$

Průměrná střední kvadratická chyba vyjádřená pomocí jádra K_δ pak má tvar:

$$(9) \quad \overline{AMSE}(\hat{m}^{(\nu)}, h^*) = \frac{\bar{v}}{nh^{*2\nu+1}} \int_{-\delta}^{\delta} K_\delta^2(t) dt + h^{*2(k-\nu)} \frac{(\bar{m}^{(k)})^2}{(k!)^2} \left(\int_{-\delta}^{\delta} t^k K_\delta(t) dt \right)^2.$$

Snažíme se určit δ tak, aby „příspěvek“ jader k oběma částem chyby byl stejný, tedy aby platilo

$$(10) \quad \int_{-\delta}^{\delta} K_\delta^2(t) dt = \left(\int_{-\delta}^{\delta} t^k K_\delta(t) dt \right)^2.$$

Takové δ se dá snadno určit:

$$\delta^{2k+1} = \frac{\int_{-1}^1 K^2(x) dx}{\left(\int_{-1}^1 x^k K(x) dx \right)^2},$$

tj.

$$\delta^{2k+1} = \frac{V(K)}{\beta_k^2}.$$

Toto číslo se nazývá kanonický faktor a značíme ho δ_0 , tedy

$$(11) \quad \delta_0 = \left(\frac{V(K)}{\beta_k^2} \right)^{\frac{1}{2k+1}}.$$

Jádro K_{δ_0} příslušné tomuto kanonickému faktoru se nazývá kanonické jádro.

Položme nyní $h = h^* \delta_0$ a dosadíme tuto hodnotu do vztahu (7) pro \overline{AMSE} . Po úpravách dostaneme

$$(12) \quad \overline{AMSE}(\hat{m}^{(\nu)}, h^*) = T(K) \left\{ \frac{\bar{v}}{nh^{*2\nu+1}} + h^{*2(k-\nu)} \frac{(\bar{m}^{(k)})^2}{(k!)^2} \right\},$$

kde $T(K)$ je funkcionál závislý jenom na jádrové funkci K a dá se zapsat ve tvaru

$$(13) \quad T(K) = \left(\left| \int_{-1}^1 x^k K(x) dx \right|^{2\nu+1} \left(\int_{-1}^1 K^2(x) dx \right)^{k-\nu} \right)^{\frac{2}{2k+1}}.$$

Toto vyjádření \overline{AMSE} pomocí funkcionálu $T(K)$ umožňuje posoudit vliv tvaru jádra na \overline{AMSE} .

Najít funkci, která jej minimalizuje, je úloha variačního počtu. Její řešení lze nalézt např. v článku [4]. Jedná se o polynom s nosičem $[-1, 1]$, který se dá vyjádřit pomocí Legendrových polynomů. Následující tabulka udává explicitní tvar těchto jádrových funkcí pro některé hodnoty ν a k a současně také příslušný kanonický faktor δ_0 .

$\nu = 0$		
k	δ_0	K_{opt}
2	1.7188	$-\frac{3}{4}(x^2 - 1)$
4	2.0165	$\frac{15}{32}(x^2 - 1)(7x^2 - 3)$
6	2.0834	$-\frac{105}{256}(x^2 - 1)(33x^4 - 30x^2 + 5)$
8	2.1021	$\frac{315}{4096}(x^2 - 1)(715x^6 - 1001x^4 + 385x^2 - 35)$
10	2.1062	$-\frac{3465}{65536}(x^2 - 1)(4199x^8 - 7956x^6 + 4914x^4 - 1092x^2 + 63)$
12	2.1051	$\frac{9009}{524288}(x^2 - 1)(52003x^{10} - 124355x^8 + 106590x^6 - 39270x^4 + 5775x^2 - 231)$

$\nu = 1$		
k	δ_0	K_{opt}
3	1.4204	$\frac{15}{4}x(x^2 - 1)$
5	1.7656	$-\frac{105}{32}x(x^2 - 1)(9x^2 - 5)$
7	1.8931	$\frac{315}{32}x(x^2 - 1)(143x^4 - 154x^2 + 35)$
9	1.9526	$-\frac{3465}{4096}x(x^2 - 1)(1105x^6 - 1755x^4 + 819x^2 - 105)$
11	1.9843	$\frac{45045}{65536}x(x^2 - 1)(6783x^8 - 14212x^6 + 10098x^4 - 2772x^2 + 231)$
13	2.0027	$-\frac{45045}{524288}x(x^2 - 1)(260015x^{10} - 676039x^8 + 646646x^6 - 277134x^4 + 51051x^2 - 3003)$

$\nu = 2$		
k	δ_0	K_{opt}
4	1.3925	$-\frac{105}{16}(x^2 - 1)(5x^2 - 1)$
6	1.6964	$\frac{315}{64}(x^2 - 1)(77x^4 - 58x^2 + 5)$
8	1.8269	$-\frac{3465}{2048}(x^2 - 1)(1755x^6 - 2249x^4 + 721x^2 - 35)$
10	1.8946	$\frac{45045}{8192}(x^2 - 1)(3553x^8 - 6392x^6 + 3618x^4 - 672x^2 + 21)$
12	1.9341	$-\frac{45045}{262144}(x^2 - 1)(676039x^{10} - 1562351x^8 + 1271974x^6 - 429726x^4 + 52899x^2 - 1155)$
14	1.9590	$\frac{765765}{1048576}(x^2 - 1)(884925x^{12} - 2495270x^{10} + 2653027x^8 - 1315028x^6 + 301587x^4 - 26598x^2 + 429)$

$\nu = 3$		
k	δ_0	K_{opt}
5	1.4086	$\frac{945}{16}x(x^2 - 1)(7x^2 - 3)$
7	1.6725	$-\frac{10395}{64}x(x^2 - 1)(39x^4 - 38x^2 + 7)$
9	1.7958	$\frac{135135}{2048}x(x^2 - 1)(935x^6 - 1405x^4 + 597x^2 - 63)$
11	1.8641	$-\frac{135135}{8192}x(x^2 - 1)(29393x^8 - 59432x^6 + 40018x^4 - 10032x^2 + 693)$
13	1.9060	$\frac{2297295}{262144}x(x^2 - 1)(382375x^{10} - 969703x^8 + 895622x^6 - 364078x^4 + 61347x^2 - 3003)$
15	1.9334	$-\frac{43648605}{1048576}x(x^2 - 1)(510255x^{12} - 1554570x^{10} + 1825625x^8 - 1034540x^6 + 288145x^4 - 35178x^2 + 1287)$

Vidíme, že pro parametry $\nu = 0$ a $k = 2$ dostáváme známé Epanečnikovo jádro.

Nyní můžeme pomocí standardního postupu minimalizovat funkci ve vztahu (12) vzhledem k šířce okna h^* . Optimální hodnotu získáme jako stacionární bod, výpočtem tedy dostaneme

$$(14) \quad h_{opt,\nu,k}^*{}^{2k+1} = \frac{(2\nu + 1)\bar{v}(k!)^2}{2n(k - \nu)(\bar{m}^{(k)})^2}$$

a odtud

$$(15) \quad \frac{(\bar{m}^{(k)})^2}{(k!)^2} = \frac{(2\nu + 1)\bar{v}}{2n(k - \nu)h_{opt,\nu,k}^{*2k+1}}$$

Dosazením do rovnice (12) vyjde

$$(16) \quad \overline{AMSE}(\hat{m}^{(\nu)}, h_{opt,\nu,k}^*) = T(K) \frac{\bar{v}(2k + 1)}{2n(k - \nu)h_{opt,\nu,k}^{*2\nu+1}}$$

a ze vztahu (15) navíc plyne

$$(17) \quad h_{opt,\nu,k}^* = \left(\frac{(2\nu + 1)k}{k - \nu} \right)^{\frac{1}{2k+1}} \cdot h_{opt,0,k}^*,$$

pokud k a ν je sudé, respektive

$$(18) \quad h_{opt,\nu,k}^* = \left(\frac{(2\nu + 1)(k - 1)}{3(k - \nu)} \right)^{\frac{1}{2k+1}} \cdot h_{opt,1,k}^*,$$

pokud k a ν je liché.

Optimální šířku okna $h_{opt,\nu,k}^*$ můžeme odhadnout například pomocí metody křížového ověřování (anglicky cross-validation method, viz [1], [2]), přičemž z (17) a (18) vidíme, že nemusíme určovat hodnoty $h_{opt,\nu,k}^*$ pro všechna ν , což v obecném případě je výpočetně složité, ale stačí zjistit tyto veličiny pro $\nu = 0$ nebo $\nu = 1$ podle toho, zda počítáme odhad sudé nebo liché derivace regresní funkce m .

Základní myšlenku metody křížového ověřování lze formulovat takto:

Odhadneme hodnotu \hat{m} postupně v každém bodě x_i , $i = 1, \dots, n$ bez použití vlastního bodu x_i , tedy pouze pomocí zbývajících $n - 1$ bodů. Pak vybereme takovou hodnotu h , pro kterou jsou hodnoty v chybějících bodech nejlépe odhadnuty pomocí zbývajících bodů. To znamená, že minimalizujeme funkci křížového ověřování $CV(h)$, kterou lze pro mnoho typů odhadů vyjádřit ve tvaru součtu reziduí, tj.

$$CV(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{m}_{-i}(x_i))^2,$$

kde $\hat{m}_{-i}(x_i)$ je výše zmíněný odhad funkce m v bodě x_i při vynechání i -tého pozorování.

Pro Gasser-Müllerův tvar odhadu je možné tuto funkci zapsat též jako

$$(19) \quad CV(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - \hat{m}(x_i)}{1 - s_{ii}} \right)^2$$

pro

$$s_{ii} = \frac{1}{h} \int_{s_{i-1}}^{s_i} K \left(\frac{x_i - u}{h} \right) du, \quad i = 1, \dots, n.$$

Můžeme také použít zobecněné funkce křížového ověřování (podrobněji viz [5], [6])

$$(20) \quad GCV(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_i - \hat{m}(x_i)}{1 - s/n} \right)^2, \quad s = \sum_{i=1}^n s_{ii}.$$

Funkce křížového ověřování pro odhad $h_{opt,1,k}$ má tvar (viz [5])

$$(21) \quad CV^{(1)}(h) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{Y_{i+1} - Y_i}{x_{i+1} - x_i} - \hat{m}_{(i,i+1)}^{(1)} \left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2} \right) \right)^2,$$

$-\hat{m}_{(i,i+1)}^{(1)}(x_{i+1} + x_i)/2)$ je odhad první derivace funkce m v bodě $((x_{i+1} + x_i)/2)$, při vynechání pozorování v bodech x_i a x_{i+1} .

Odhad $\hat{h}_{opt,0,k}^*$ nebo $\hat{h}_{opt,1,k}^*$ optimální šířky okna $h_{opt,0,k}^*$ nebo $h_{opt,1,k}^*$ tedy určíme jako tu hodnotu, která minimalizuje funkci $CV(h^*)$, resp. $GCV(h^*)$ nebo $CV^{(1)}(h^*)$ s jádrem K_{δ_0} . Hodnoty h^* přitom bereme z vhodné množiny H_n vyhlazovacích parametrů, což je zpravidla uzavřený interval. Na základě praktických zkušeností můžeme vzít jako dolní mez tohoto intervalu vzdálenost mezi body x_i a jako horní mez dvojnásobek délky nejmenšího intervalu obsahujícího všechny body x_i . Pro ekvidistanční body na intervalu $[0, 1]$ je pak $H_n = [1/n, 2]$. Tedy

$$\hat{h}_{opt,0,k}^* = \arg \min_{h^* \in H_n} CV(h^*), \quad \text{resp.}$$

$$\hat{h}_{opt,1,k}^* = \arg \min_{h^* \in H_n} CV^{(1)}(h^*),$$

přičemž při výpočtu funkce křížového ověřování používáme optimální jádra z třídy $\mathcal{M}_{0,k}$, resp. $\mathcal{M}_{1,k}$. Pomocí (17) či (18) pak určíme hodnotu $\hat{h}_{opt,\nu,k}^*$.

Pro určení závislosti kvality odhadu $\hat{m}^{(\nu)}$ na řádu jádra k zavedeme optimalizační kritérium

$$(22) \quad L(k) = T(K_{opt}) \frac{2k + 1}{2(k - \nu)n\hat{h}_{opt,\nu,k}^{*2\nu+1}},$$

kteří dostaneme z (16) vynecháním členu \bar{v} , který je pro daná data konstantní a nemá tedy vliv na porovnání kvality odhadu.

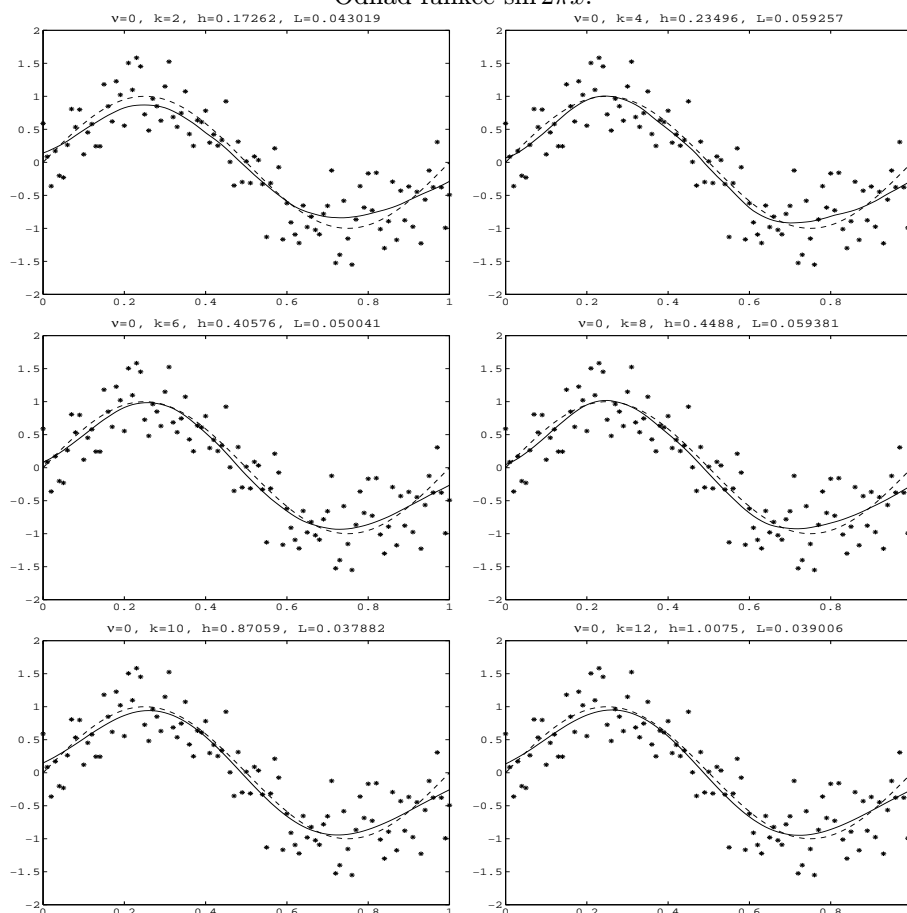
Nyní můžeme navrhnout postup pro stanovení optimálního řádu jádra k pro odhad ν -té derivace regresní funkce $m^{(\nu)}$. Nejprve určíme množinu I_ν těch hodnot k , pro něž chceme odhady konstruovat. Zpravidla klademe $I_\nu = \{\nu+2, \nu+4, \dots, k_{max}\}$. Pak pro každé $k \in I_\nu$ najdeme optimální jádro K_{opt} (např. z uvedených tabulek) a vypočítáme hodnotu funkcionálu $T(K_{opt})$. Potom pomocí metody křížového ověřování určíme $\hat{h}_{opt,0,k}^*$ nebo $\hat{h}_{opt,1,k}^*$ a odtud $\hat{h}_{opt,\nu,k}^*$. Nakonec najdeme takové \hat{k} , pro které $L(k)$ nabývá minimální hodnoty:

$$\hat{k} = \arg \min_{k \in I_\nu} L(k).$$

Dá se ukázat (viz [4]), že odhad, který získáme tímto způsobem je asymptoticky optimální ve smyslu \overline{AMSE} mezi všemi možnými volbami vyhlazovacího parametru h , tvaru a řádu jádra.

Následující obrázky ukazují aplikaci navrženého postupu pro stanovení optimálního odhadu derivace regresní funkce na simulovaná data. Jedná se o funkci $m(x) = \sin 2\pi x$, $x_i = i/100$ pro $i = 0, \dots, 100$, měli jsme tedy celkem 101 hodnot. Chyby ε_i měly normální rozdělení s nulovou střední hodnotou a rozptylem 0.16. Obrázky jsou doplněny tabulkami spočítaných hodnot $L(k)$, $\hat{h}_{opt,\nu,k} = \delta_0 \hat{h}_{opt,\nu,k}^*$ a optimálních hodnot $h_{opt,\nu,k}$ určených podle (8).

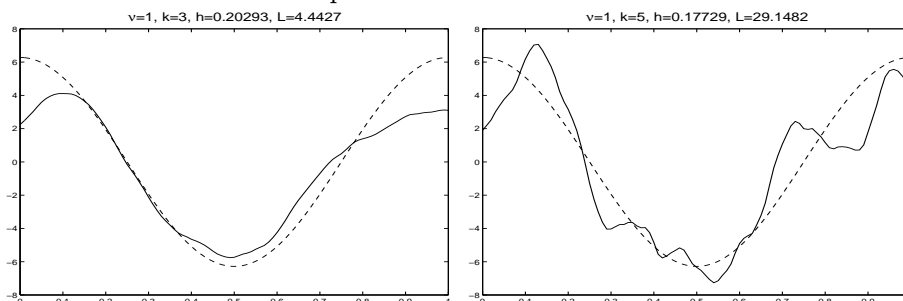
Odhad funkce $\sin 2\pi x$:

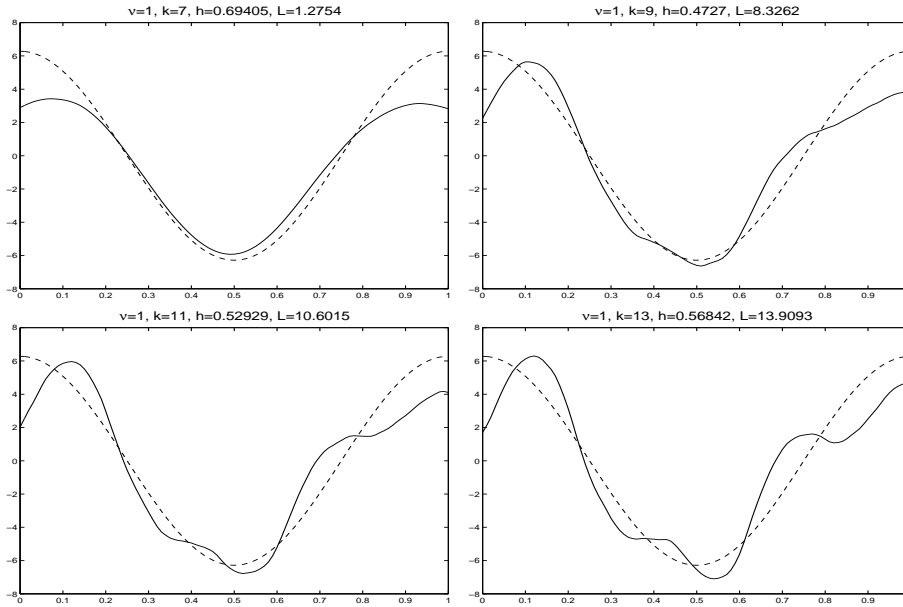


k	2	4	6	8	10	12
$L(k)$	0.0430	0.0593	0.0500	0.0594	0.0379	0.0390
$\hat{h}_{opt,\nu,k}$	0.1726	0.2350	0.4058	0.4488	0.8706	1.0075
$h_{opt,\nu,k}$	0.1252	0.3344	0.5580	0.7864	1.0170	1.2486

Optimální hodnota: $\hat{k} = 10$

Odhad první derivace funkce $\sin 2\pi x$:

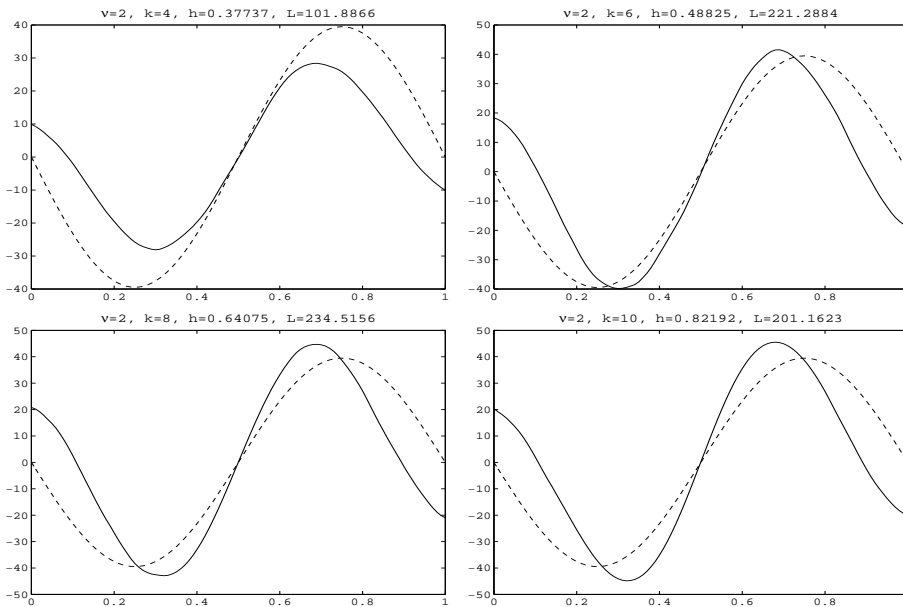


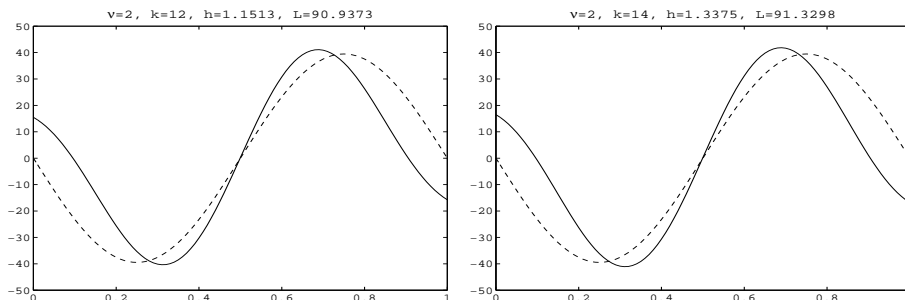


k	3	5	7	9	11	13
$L(k)$	4.4427	29.1482	1.2754	8.3262	10.6015	13.9093
$\hat{h}_{opt,\nu,k}$	0.2029	0.1773	0.6940	0.4727	0.5293	0.5684
$h_{opt,\nu,k}$	0.2066	0.4295	0.6589	0.8905	1.1231	1.3563

Optimální hodnota: $\hat{k} = 7$

Odhad druhé derivace funkce $\sin 2\pi x$:





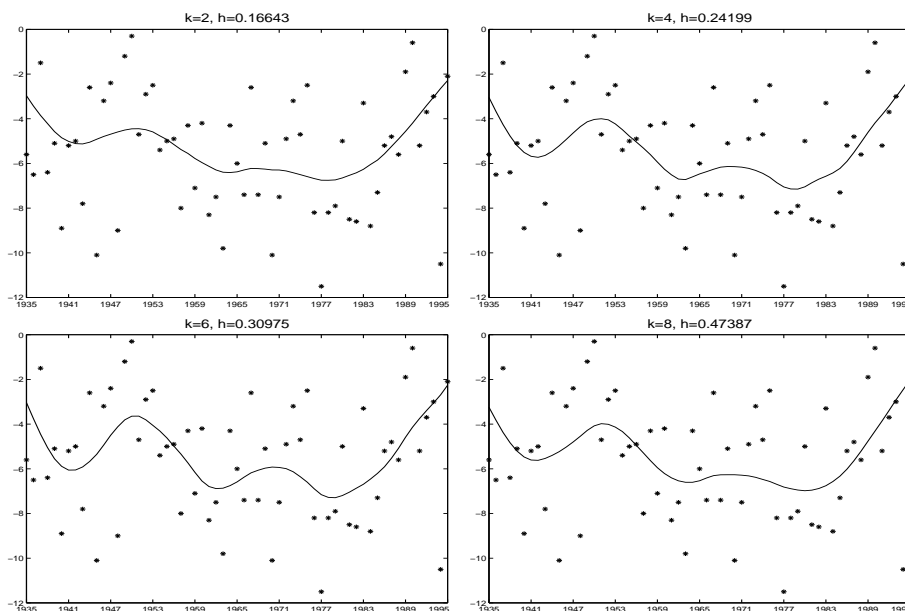
k	4	6	8	10	12	14
$L(k)$	101.8866	221.2884	234.5156	201.1623	90.9373	91.3298
$\hat{h}_{opt,\nu,k}$	0.3774	0.4883	0.6407	0.8219	1.1513	1.3375
$h_{opt,\nu,k}$	0.2983	0.5305	0.7642	0.9982	1.2325	1.4668

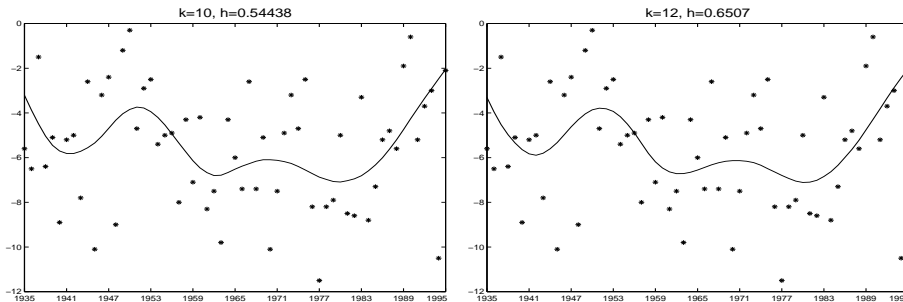
Optimální hodnota: $\hat{k} = 12$

Z obrázků je vidět, že odhad první derivace dopadl hůř než odhad regresní funkce nebo její druhé derivace. Je to pravděpodobně způsobeno tím, že optimalizace šířky okna pomocí metody křížového ověřování dává pro první derivaci regresní funkce horší výsledky než pro regresní funkci samotnou.

Obrázky také ukazují typický efekt pro jádrové vyhlazování: horší kvalitu odhadu na krajích intervalu – tzv. hraniční nebo okrajový efekt. Ten je způsoben tím, že blízko krajních bodů daného intervalu nosič jádrové funkce zasahuje do oblasti, kde nejsou žádná data, což zhoršuje odhad. Tento problém je možno řešit např. použitím hraničních jader (viz [3]).

Následující obrázky se týkají reálných dat. Jedná se o průměrné lednové teploty v Delhi v Kanadě v letech 1935–1995. Připojená tabulka opět ukazuje hodnoty $L(k)$ a $\hat{h}_{opt,0,k}$.





k	2	4	6	8	10	12
$L(k)$	0.0739	0.0953	0.1085	0.0931	0.1003	0.1000
$\hat{h}_{opt,0,k}$	0.1664	0.2420	0.3097	0.4739	0.5444	0.6507

Optimální hodnota: $\hat{k} = 2$

Gasser-Müllerův odhad použitý v tomto příspěvku je vhodný jen pro model s pevným plánem, a proto může být pro značnou část reálných dat nepoužitelný. To však není omezení v případě, že potřebujeme jenom odhad regresní funkce m a nikoliv některé její derivace. V takovém případě totiž lze v podstatě stejným způsobem použít tvar odhadu vhodnější pro data s náhodným plánem, např. Nadaraya-Watsonův nebo lokálně lineární odhad.

Poděkování: Autoři děkují recenzentovi za podnětné připomínky, které přispěly ke zlepšení kvality příspěvku. Dále děkují panu Mgr. J. Koláčkovu a panu Mgr. M. Řezáčovi za pečlivé přečtení rukopisu.

LITERATURA

- [1] Hastie T.S., Tibshirani, R.J.: Generalized Additive Models, Chapman & Hall, London, 1990
- [2] Härdle, W.: Applied Nonparametric Regression. Cambridge University Press, 1990
- [3] Horová I., Optimization Problems Connected with Kernel Smoothing, Signal Processing, Communications and Computer Science, World Scientific and Engineering Society Press, 2000
- [4] Horová I., Vieu P., Zelinka J.: Optimal Choice of Nonparametric Estimates of a Density and of its Derivatives. Preprint
- [5] Müller, H.-G.: Nonparametric Regression Analysis of Longitudinal data. Lecture Notes in Statistics 46. Springer-Verlag, 1988
- [6] Wand, M.P., Jones, M.C.: Kernel Smoothing. Chapman & Hall, London, 1995

MU PŘF, KAM, JANÁČKOVO NÁM. 2A, 662 95 BRNO
 E-MAIL: zelinka@math.muni.cz; horova@math.muni.cz

SOME NOTES CONCERNING PREDICTION IN AR PROCESSES

PETR ZVÁRA

ABSTRACT. The prediction of the $(n+s)$ -th observation of the p -th order autoregressive process is studied. The mean squared error of the predictor (MSEP) when the autoregressive parameters are estimated by least squares is obtained to terms of order n^{-1} for some low order processes. It is shown that model overfitting increases MSEP. The naive prediction interval for X_{n+s} obtained by employing the estimated autoregressive model for prediction is considered. The overall coverage probability is evaluated to order n^{-1} in a special case. It is lower than the nominal one, because such prediction procedure ignores the uncertainty in the model parameters.

В работе изучается прогнозирование значения X_{n+s} в процессе авторегрессии порядка p с неизвестными коэффициентами. Приведено явное выражение для члена порядка n^{-1} среднеквадратической ошибки прогноза в некоторых моделях. Далее рассмотрен наивный интервальный прогноз для X_{n+s} , построенный с помощью оценок неизвестных параметров. В частном случае вычислена его надежность.

1. INTRODUCTION

Let the autoregressive time series $\{X_t\}$ satisfy

$$(1) \quad X_t = a_0 + \sum_{j=1}^p a_j X_{t-j} + e_t, \quad t = 1, 2, \dots, n,$$

where $\{e_t\}$ is a sequence of independent $N(0, \sigma^2)$ random variables and $X_0, X_{-1}, \dots, X_{1-p}$ are given random variables. The characteristic equation associated with model (1) is

$$(2) \quad z^p - \sum_{j=1}^p a_j z^{p-j} = 0.$$

We assume that the process is a strictly stationary normal process, hence the roots of (2) are less than one in absolute value and X_0, \dots, X_{1-p} are normal random variables with the same covariance structure as X_{t+p-1}, \dots, X_t for all $t > 1 - p$.

We adopt a standard multivariate representation for the process (1). Let $\mathbf{X}_t = (X_t, X_{t-1}, \dots, X_{t-p+1}, 1)'$ and $\mathbf{e}_t = (e_t, 0, \dots, 0)'$. Then we have

$$(3) \quad \mathbf{X}_t = \mathbf{A}\mathbf{X}_{t-1} + \mathbf{e}_t,$$

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 60G25; Secondary 62M10.

Key words and phrases. Stationary process, prediction, coverage probability.

Acknowledgement. The research was supported by grants GACR 201/00/0770 and MSM 113200008.

where

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_{p-1} & a_p & a_0 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

The least squares predictor of X_{n+s} given a past history $\{X_{1-p}, \dots, X_n\}$ is $\bar{X}_{n+s} = a_0 + \sum_{j=1}^p a_j \bar{X}_{n+s-j}$, where $\bar{X}_t = X_t$ if $t \leq n$. If the parameters $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_p, a_0)'$ and σ^2 must be estimated, the predictor

$$(4) \quad \hat{X}_{n+s} = \hat{a}_0 + \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \hat{X}_{n+s-j}, \quad \hat{X}_t = X_t \text{ if } t \leq n$$

is obtained by replacing the unknown \mathbf{a} by an estimator $\hat{\mathbf{a}} = (\hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p, \hat{a}_0)'$.

There are a number of commonly used estimation procedures for stationary X_t . In this text we consider the maximum likelihood estimators conditioned on X_0, \dots, X_{1-p} (least squares estimators)

$$(5) \quad \hat{\mathbf{a}} = \left(\sum_{t=1}^n \mathbf{X}_{t-1} \mathbf{X}'_{t-1} \right)^{-1} \left(\sum_{t=1}^n \mathbf{X}_{t-1} X_t \right), \quad \hat{\sigma}^2 = n^{-1} \sum_{t=1}^n (X_t - \mathbf{X}'_{t-1} \hat{\mathbf{a}})^2.$$

We employ slightly different notation when the expectation $\mu = \mathbf{E} X_t$ is assumed to be known. Then a_0 is not to be estimated and the model (1) can be written as

$$(6) \quad Y_t = \sum_{j=1}^p a_j Y_{t-j} + e_t, \quad t = 1, 2, \dots, n,$$

where $Y_t = X_t - \mu$. The multivariate representation for (6) is $\mathbf{Y}_t = \mathbf{B} \mathbf{Y}_{t-1} + \mathbf{e}_t$, where $\mathbf{Y}_t = (Y_t, \dots, Y_{t-p+1})'$ and

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_{p-1} & a_p \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

We define the least squares estimators \mathbf{a}^* and σ^{2*} as

$$(7) \quad \mathbf{a}^* = \left(\sum_{t=1}^n \mathbf{Y}_{t-1} \mathbf{Y}'_{t-1} \right)^{-1} \left(\sum_{t=1}^n \mathbf{Y}_{t-1} Y_t \right), \quad \sigma^{2*} = n^{-1} \sum_{t=1}^n (Y_t - \mathbf{Y}'_{t-1} \mathbf{a}^*)^2.$$

The predictor of X_{n+s} associated with \mathbf{a}^* is

$$(8) \quad X_{n+s}^* = Y_{n+s}^* + \mu, \quad Y_{n+s}^* = \sum_{j=1}^p a_j^* Y_{n+s-1}^*, \quad Y_t^* = X_t - \mu \text{ if } t \leq n.$$

Fuller and Hasza (1980, Th. 1) investigated an AR(1) model and showed that the predictor (4) is unbiased for symmetric error distributions. Cryer, Nankervis and Savin (1990, Th. 6) extended their results to predictors based on fitted ARMA(p, q) models with exogenous nonrandom regressors.

Fuller and Hasza (1981, Cor. 2.1.) obtained an approximation for the variance of the predictor error $X_{n+s} - \hat{X}_{n+s}$ through terms of $O(n^{-1})$. They have shown that $E\{(X_{n+s} - \hat{X}_{n+s})^2\}$ is the upper left element of the matrix

$$(9) \quad \sigma^2 \sum_{j=0}^{s-1} \mathbf{A}^j \mathbf{M} \mathbf{A}'^j + n^{-1} \sigma^2 \sum_{j=0}^{s-1} \sum_{k=0}^{s-1} \mathbf{A}^j \mathbf{M} \mathbf{A}'^k \\ \times \text{Tr}\{(\mathbf{A}^{s-j-1} \mathbf{\Gamma})' (\mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{A}^{s-k-1})\} + O(n^{-3/2}),$$

where $\mathbf{\Gamma} = E\{\mathbf{X}_t \mathbf{X}_t'\}$ and \mathbf{M} is a matrix with one as the upper left element and zeros elsewhere. For $s = 1$ we have $E\{(X_{n+1} - \hat{X}_{n+1})^2\} = \sigma^2[1 + n^{-1}(p + 1)] + O(n^{-3/2})$. In section 2 we evaluate (9) for general prediction period s in some low order autoregressive models.

Since X_{n+s} is a random variable, a predictive region is relevant. Let $V(s) = \sigma^2 \sum_{j=0}^{s-1} w_j^2$, where the $\{w_j\}$ satisfy difference equations

$$w_j - \sum_{i=1}^p a_i w_{j-i} = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

subject to the initial conditions $w_0 = 1$ and $w_j = 0$ for $j < 0$. Then for a given $\alpha \in (0, 1)$, a natural one-sided $100\alpha\%$ predictive interval for X_{n+s} is

$$(10) \quad \text{PI}_s(\alpha) = [-\infty, \bar{X}_{n+s} + z_\alpha \sqrt{V(s)}],$$

since the conditional distribution of X_{n+s} given $\{X_{1-p}, \dots, X_n\}$ is normal with mean \bar{X}_{n+s} and variance $V(s)$ (Montgomery et al, 1990).

A naive prediction region for X_{n+s} commonly used in textbooks on applied time series analysis as for example Montgomery et. all (1990) is a random set

$$(11) \quad \widehat{\text{PI}}_s(\alpha) = [-\infty, \hat{X}_{n+s} + z_\alpha \sqrt{\hat{V}(s)}]$$

obtained by substituting the estimated parameters into (10). More precisely, \hat{X}_{n+s} is defined in (4) and $\hat{V}(s) = \hat{\sigma}^2 \sum_{j=0}^{s-1} \hat{w}_j^2$, where \hat{w}_j satisfy

$$\hat{w}_j - \sum_{i=1}^p \hat{a}_i \hat{w}_{j-i} = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

subject to $\hat{w}_0 = 1$ and $\hat{w}_j = 0$ for $j < 0$. When μ is known, we define similarly $\text{PI}_s^*(\alpha)$ as a prediction region for X_{n+s} based on \mathbf{a}^* .

The overall coverage probability of $\widehat{\text{PI}}_s(\alpha)$, $P[X_{n+s} \in \widehat{\text{PI}}_s(\alpha)]$ is less than α due to the ignored increase in the mean squared error of prediction when employing the estimated autoregressive model for prediction. In section 3 we evaluate the overall coverage probability of the naive one step ahead prediction interval $\text{PI}_1^*(\alpha)$ through terms of $O(n^{-1})$ assuming the variance of e_t is known.

2. MEAN SQUARED ERROR OF PREDICTION IN SOME LOW ORDER AUTOREGRESSIVE PROCESSES

Using similar arguments as in Fuller and Hasza (1981), one can show that when the expectation μ is known, the variance of $X_{n+s} - X_{n+s}^*$ is the upper left element

of the matrix

$$(12) \quad \sigma^2 \sum_{j=0}^{s-1} \mathbf{B}^j \mathbf{M} \mathbf{B}'^j + n^{-1} \sigma^2 \sum_{j=0}^{s-1} \sum_{k=0}^{s-1} \mathbf{B}^j \mathbf{M} \mathbf{B}'^k \\ \times \text{Tr}\{(\mathbf{B}^{s-j-1} \boldsymbol{\Gamma}_Y)' (\boldsymbol{\Gamma}_Y^{-1} \mathbf{B}^{s-k-1})\} + O(n^{-3/2}),$$

where $\boldsymbol{\Gamma}_Y = \mathbf{E}\{\mathbf{Y}_t \mathbf{Y}_t'\}$ and \mathbf{M} is a matrix with one as the upper left element and zeros elsewhere.

2.1. AR(1) process. Consider first the AR(1) model with unknown expectation

$$(13) \quad X_t = a_0 + a_1 X_{t-1} + e_t, \quad t = 1, \dots, n,$$

where $e_t \sim N(0, \sigma^2)$, $|a_1| < 1$ and $X_0 \sim N(a_0(1-a_1)^{-1}, \sigma^2(1-a_1^2)^{-1})$. The predictor is $\hat{X}_{n+s} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \hat{X}_{n+s-1}$, where $\hat{X}_{n+s} = X_{n+s}$ for $s \leq 0$ and

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^n X_{t-1}^2 & \sum_{t=1}^n X_{t-1} \\ \sum_{t=1}^n X_{t-1} & n \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^n X_{t-1} X_t \\ \sum_{t=1}^n X_t \end{pmatrix}.$$

In this case we have

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & a_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matrix multiplication yields

$$\mathbf{A}^j = \begin{pmatrix} a_1^j & a_0 \sum_{i=0}^{j-1} a_1^i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

and

$$(14) \quad \mathbf{A}^j \mathbf{M} \mathbf{A}'^k = \begin{pmatrix} a_1^{j+k} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Evaluating moments of X_t up to second order, we find

$$\boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{E}\{\mathbf{X}_t \mathbf{X}_t'\} = \begin{pmatrix} \frac{\sigma^2}{1-a_1^2} + \frac{a_0^2}{(1-a_1)^2} & \frac{a_0}{1-a_1} \\ \frac{a_0}{1-a_1} & 1 \end{pmatrix}.$$

Calculating the trace of $(\mathbf{A}^{s-j-1} \boldsymbol{\Gamma})' (\boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{A}^{s-k-1})$, many terms vanish and we have

$$(15) \quad \text{Tr}\{(\mathbf{A}^{s-j-1} \boldsymbol{\Gamma})' (\boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{A}^{s-k-1})\} = 1 + a_1^{2s-j-k-2}.$$

Combining (14) and (15) yields

$$\sum_{j=0}^{s-1} \sum_{k=0}^{s-1} \mathbf{A}^j \mathbf{M} \mathbf{A}'^k \text{Tr}\{(\mathbf{A}^{s-j-1} \boldsymbol{\Gamma})' (\boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{A}^{s-k-1})\} = \begin{pmatrix} s^2 a_1^{2s-2} + \left(\frac{1-a_1^s}{1-a_1}\right)^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Inserting into (9) we have

$$\mathbf{E}\{(X_{n+s} - \hat{X}_{n+s})^2\} = \sigma^2 \sum_{j=0}^{s-1} a_1^{2j} + n^{-1} \sigma^2 s^2 a_1^{2s-2} + n^{-1} \sigma^2 \left(\frac{1-a_1^s}{1-a_1}\right)^2 + O(n^{-3/2}),$$

which is Theorem 2 of Fuller and Hasza (1980).

When the expectation of X_t is known, $\text{Tr}\{(\mathbf{B}^{s-j-1} \boldsymbol{\Gamma}_Y)' (\boldsymbol{\Gamma}_Y^{-1} \mathbf{B}^{s-k-1})\}$ simplifies to $a_1^{2s-j-k-2}$ and we find

$$(16) \quad \mathbf{E}\{(X_{n+s} - X_{n+s}^*)^2\} = \sigma^2 \sum_{j=0}^{s-1} a_1^{2j} + n^{-1} \sigma^2 s^2 a_1^{2s-2} + O(n^{-3/2}).$$

2.2. AR(2) process. Consider now the strictly stationary AR(2) model with zero expectation

$$(17) \quad X_t = a_1 X_{t-1} + a_2 X_{t-2} + e_t, \quad t = 1, \dots, n,$$

where $e_t \sim N(0, \sigma^2)$. The predictor is $X_{n+s}^* = a_1^* X_{n+s-1}^* + a_2^* X_{n+s-2}^*$, where $X_{n+s}^* = X_{n+s}$ if $s \leq 0$ and

$$\begin{pmatrix} a_1^* \\ a_2^* \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc} \sum_{t=1}^n X_{t-1}^2 & \sum_{t=1}^n X_{t-1} X_{t-2} \\ \sum_{t=1}^n X_{t-1} X_{t-2} & \sum_{t=1}^n X_{t-2}^2 \end{array} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^n X_{t-1} X_t \\ \sum_{t=1}^n X_{t-2} X_t \end{pmatrix}.$$

The parametr matrix of multivariate representation for (17) is

$$B = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Denote the roots of characteristic equation $z^2 - a_1 z - a_2 = 0$ by z_1 and z_2 , then $a_1 = z_1 + z_2$ and $a_2 = -z_1 z_2$. Stationarity condition implies that $|z_i| < 1$, $i = 1, 2$. The zero mean AR(1) process is a special case of (17) when $z_2 = 0$.

Denote the rows of B by $r_0 = (1, 0)'$ and $r_1 = (a_1, a_2)'$. Then the rows of B^j are r_j and r_{j-1} . They satisfy the relation $r_j = a_1 r_{j-1} + a_2 r_{j-2}$. Solving these difference equations subject to initial conditions above, we obtain

$$B^j = \frac{1}{z_1 - z_2} \begin{pmatrix} z_1^{j+1} - z_2^{j+1} & z_1 z_2^{j+1} - z_1^{j+1} z_2 \\ z_1^j - z_2^j & z_1 z_2^j - z_1^j z_2 \end{pmatrix}.$$

Matrix multiplication yields

$$B^j M B'^k = \frac{1}{(z_1 - z_2)^2} \begin{pmatrix} (z_1^{j+1} - z_2^{j+1})(z_1^{k+1} - z_2^{k+1}) & (z_1^{j+1} - z_2^{j+1})(z_1^k - z_2^k) \\ (z_1^j - z_2^j)(z_1^{k+1} - z_2^{k+1}) & (z_1^j - z_2^j)(z_1^k - z_2^k) \end{pmatrix}.$$

Using the relation $\sum_{j=0}^{s-1} z^j = (1 - z^s)(1 - z)^{-1}$ if $|z| < 1$, we find that the upper left element of $\sum_0^{s-1} B^j M B'^j$ is

$$(18) \quad \frac{1}{(z_1 - z_2)^2} \left\{ z_1^2 \frac{1 - z_1^{2s}}{1 - z_1^2} - 2z_1 z_2 \frac{1 - (z_1 z_2)^s}{1 - z_1 z_2} + z_2^2 \frac{1 - z_2^{2s}}{1 - z_2^2} \right\}.$$

The matrix of second moments of X_t is

$$\Gamma = \Gamma_Y = E \{ (X_t, X_{t-1})' (X_t, X_{t-1}) \} = \gamma_0 \begin{pmatrix} 1 & \frac{z_1 + z_2}{1 + z_1 z_2} \\ \frac{z_1 + z_2}{1 + z_1 z_2} & 1 \end{pmatrix},$$

where $\gamma_0 = E X_t^2$ is the variance of the process. The inverse is

$$\Gamma^{-1} = \gamma_0^{-1} \frac{1 + z_1 z_2}{(1 - z_1^2)(1 - z_2^2)} \begin{pmatrix} 1 + z_1 z_2 & -z_1 - z_2 \\ -z_1 - z_2 & 1 + z_1 z_2 \end{pmatrix}.$$

Multiplicating

$$\begin{aligned} \Gamma^{-1} B^{s-k-1} &= \gamma_0^{-1} \frac{1 + z_1 z_2}{(1 - z_1^2)(1 - z_2^2)(z_1 - z_2)} \\ &\times \begin{pmatrix} z_1 z_2^{s-k-1}(1 - z_2^2) - z_1^{s-k-1} z_2(1 - z_1^2) & z_1^{s-k-1} z_2^2(1 - z_1^2) - z_1^2 z_2^{s-k-1}(1 - z_2^2) \\ z_1^{s-k-1}(1 - z_2^2) - z_2^{s-k-1}(1 - z_1^2) & z_1 z_2^{s-k-1}(1 - z_2^2) - z_1^{s-k-1} z_2(1 - z_1^2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \Gamma' B^{s-j-1'} &= \frac{\gamma_0}{(1 + z_1 z_2)(z_1 - z_2)} \\ &\times \begin{pmatrix} z_1^{s-j}(1 - z_2^2) - z_2^{s-j}(1 - z_1^2) & z_1^{s-j-1}(1 - z_2^2) - z_2^{s-j-1}(1 - z_1^2) \\ z_1^{s-j+1}(1 - z_2^2) - z_2^{s-j+1}(1 - z_1^2) & z_1^{s-j}(1 - z_2^2) - z_2^{s-j}(1 - z_1^2) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

we obtain

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{(\mathbf{B}^{s-j-1}\mathbf{\Gamma})'(\mathbf{\Gamma}^{-1}\mathbf{B}^{s-k-1})\} &= \frac{1}{(z_1 - z_2)^2} \{(1 - z_1 z_2)^2 (z_1^{2s-j-k-2} + z_2^{2s-j-k-2}) \\ &- (1 - z_1^2)(1 - z_2^2)(z_1^{s-j-1} z_2^{s-k-1} + z_1^{s-k-1} z_2^{s-j-1})\}. \end{aligned}$$

Using relation $\sum_{k=0}^{s-1} z_1^k z_2^{s-1-k} = (z_1^s - z_2^s)(z_1 - z_2)^{-1} = K$ say, we find that the upper left element of the matrix

$$\sum_{j=0}^{s-1} \sum_{k=0}^{s-1} \mathbf{B}^j \mathbf{M} \mathbf{B}'^k \text{Tr}\{(\mathbf{B}^{s-j-1}\mathbf{\Gamma})'(\mathbf{\Gamma}^{-1}\mathbf{B}^{s-k-1})\}$$

is

$$\begin{aligned} (19) \quad & \frac{(1 - z_1 z_2)^2}{(z_1 - z_2)^4} \{K^2(z_1^2 + z_2^2) - 2Ks(z_1^s z_2 + z_1 z_2^s) + s^2(z_1^{2s} + z_2^{2s})\} \\ & + \frac{(1 - z_1^2)(1 - z_2^2)}{(z_1 - z_2)^4} \{2K^2 z_1 z_2 - 2Ks(z_1^{s+1} + z_2^{s+1}) + 2s^2 z_1^s z_2^s\}. \end{aligned}$$

Inserting (18) and (19) into (9) we obtain

$$\begin{aligned} (20) \quad \text{E}\{(X_{n+s} - X_{n+s}^*)^2\} &= \frac{\sigma^2}{(z_1 - z_2)^2} \left\{ z_1^2 \frac{1 - z_1^{2s}}{1 - z_1^2} - 2z_1 z_2 \frac{1 - (z_1 z_2)^s}{1 - z_1 z_2} + z_2^2 \frac{1 - z_2^{2s}}{1 - z_2^2} \right\} \\ & + n^{-1} \sigma^2 \frac{(1 - z_1 z_2)^2}{(z_1 - z_2)^4} \{K^2(z_1^2 + z_2^2) - 2Ks(z_1^s z_2 + z_1 z_2^s) + s^2(z_1^{2s} + z_2^{2s})\} \\ & + n^{-1} \sigma^2 \frac{(1 - z_1^2)(1 - z_2^2)}{(z_1 - z_2)^4} \{2K^2 z_1 z_2 - 2Ks(z_1^{s+1} + z_2^{s+1}) + 2s^2 z_1^s z_2^s\}. \end{aligned}$$

When $s = 1$ we have $K = 1$ and find $\text{E}\{(X_{n+1} - X_{n+1}^*)^2\} = \sigma^2(1 + 2n^{-1})$, which is the same expression as that obtained by other authors.

2.3. Application. As an application of the result (20) we can evaluate the effect of overfitting on the mean squared prediction error. Let $z_2 = a_2 = 0$ in (17) which implies $a_1 = z_1$. Thus we fit the AR(2) model when the true model is AR(1). Then (20) reduces to

$$(21) \quad \text{E}\{(X_{n+s} - \hat{X}_{n+s})^2\} = \sigma^2 \frac{1 - a_1^{2s}}{1 - a_1^2} + n^{-1} \sigma^2 (s-1)^2 a_1^{2s-4} + n^{-1} \sigma^2 2s a_1^{2s-2} + O(n^{-3/2}).$$

Since $(s-1)^2 + 2sa_1^2 - s^2 a_1^2 = (1 - a_1^2)(s-1)^2 + a_1^2$ is always positive, we infer from (16) and (21) that overfitting the zero mean AR(1) model by one additional autoregressive parameter results in increase of the mean squared prediction error. The amount of increase can be analytically expressed as $n^{-1} \sigma^2 a_1^{2s-4} \{(1 - a_1^2)(s-1)^2 + a_1^2\} + O(n^{-3/2})$ and tends to zero as the sample size approaches infinity. The one-step ahead mean squared prediction error is $\sigma^2 + 2n^{-1} \sigma^2$ when fitting overfitted AR(2) model while only $\sigma^2 + n^{-1} \sigma^2$ when fitting correct AR(1) model.

3. COVERAGE PROBABILITY OF NAIVE PREDICTION INTERVALS

Consider the naive s -step ahead prediction interval $\widehat{\text{PI}}_s(\alpha)$ for X_{n+s} defined in (11). There are two kinds of coverage probabilities:

1. For fixed sample information $\mathbf{X} = (X_{1-p}, \dots, X_n)'$ (and thus fixed $\mathbf{X}_n, \hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}^2$ and $\widehat{\text{PI}}_s(\alpha)$) is the conditional probability

$$\begin{aligned} \text{CP}[\widehat{\text{PI}}_s(\alpha)|\hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}^2, \mathbf{X}_n] &= P[X_{n+s} \in \widehat{\text{PI}}_s(\alpha)|\hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}^2, \mathbf{X}_n] \\ &= \Phi\left(z_\alpha \sqrt{V(s)^{-1}\hat{V}(s)} + V(s)^{-1}(\hat{X}_{n+s} - \bar{X}_{n+s})\right), \end{aligned}$$

because the conditional distribution of X_{n+s} is normal with mean \bar{X}_{n+s} and variance $V(s)$. Here $\Phi(t)$ denotes the distribution function of standard normal distribution and $z_\alpha = \Phi(\alpha)^{-1}$ its α -quantile.

2. From sample to sample, the conditional coverage probability is random because $\widehat{\text{PI}}_s(\alpha)$ depends on $\hat{\mathbf{a}}$ and \mathbf{X}_n . The unconditional (overall) coverage probability for the prediction interval procedure is

$$\text{UCP}[\widehat{\text{PI}}_s(\alpha)] = P[X_{n+s} \leq \hat{X}_{n+s} + z_\alpha \sqrt{\hat{V}(s)}] = \mathbf{E} \{ \text{CP}[\widehat{\text{PI}}_s(\alpha)|\hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}^2, \mathbf{X}_n] \},$$

where the expectation is w.r.t. the random $\hat{\mathbf{a}}, \hat{\sigma}^2$ and \mathbf{X}_n .

Beran (1990) has shown in his Example 1 that $\text{UCP}[\text{PI}_1^*(\alpha)] = \alpha - (2n)^{-1}z_\alpha\phi(z_\alpha) + o(n^{-1})$ for the AR(1) process with known mean and $\sigma^2 = 1$ also known. We extend this result to general order and give the order of error. We have

Theorem 1. *Assume that $\{X_t\}_{t=1-p}^n$ is strictly stationary AR(p) process defined in (1), where $\text{var } e_t = \sigma^2$, the order p and expectation μ are known. Let the parameters $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_p)'$ be estimated by \mathbf{a}^* defined in (7). Let X_{n+1}^* be defined as $\mu + \sum_{j=1}^p a_j^*(X_{n+j-1} - \mu)$. Then the overall coverage probability of the naive one-step ahead prediction interval $\text{PI}_1^*(\alpha) = [-\infty, X_{n+1}^* + z_\alpha\sigma]$ is*

$$\text{UCP}[\text{PI}_1^*(\alpha)] = \alpha - (2n)^{-1}pz_\alpha\phi(z_\alpha) + O(n^{-3/2}),$$

where $\phi(t) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-t^2/2)$ is the density of $N(0, 1)$.

Proof. Without loss of generality assume $\mu = 0$. Since σ^2 is known, $V(1)^* = V(1) = \sigma^2$ and $\text{PI}_1^*(\alpha) = (-\infty, X_{n+1}^* + z_\alpha\sigma)$.

The conditional coverage probability is $\text{CP}(\text{PI}_1^*(\alpha)|\mathbf{a}^*, \mathbf{X}_n) = \Phi(z_\alpha + \delta_n)$, where $\delta_n = \sigma^{-1}(X_{n+1}^* - \bar{X}_{n+1})$.

The distribution function of Gaussian distribution has continuous derivatives of all orders, thus the Taylor expansion yields

$$(22) \quad \text{CP}(\text{PI}_1^*(\alpha)|\mathbf{a}^*, \mathbf{X}_n) = \alpha + \delta_n\phi(z_\alpha) + \frac{\delta_n^2}{2}\phi'(z_\alpha) + \frac{\delta_n^3}{6}\phi''(z_n),$$

where z_n is random variable between z_α and $z_\alpha + \delta_n$.

Since both X_{n+1}^* and \bar{X}_{n+1} are unbiased predictors for X_{n+1} (Fuller and Hasza, 1980, Cryer et al, 1990), we have

$$(23) \quad \mathbf{E} \delta_n = 0.$$

Rewrite

$$\sigma^2\delta_n^2 = (X_{n+1}^* - \bar{X}_{n+1})^2 = \left[\sum_{j=1}^p (a_j^* - a_j)X_{n-j+1} \right]^2 = \mathbf{X}'_n (\mathbf{a}^* - \mathbf{a})(\mathbf{a}^* - \mathbf{a})' \mathbf{X}_n.$$

Following Fuller and Hasza (1981), the conditional expectation is

$$\sigma^2\mathbf{E} \{ \delta_n^2 | \mathbf{X}_n \} = n^{-1}\sigma^2 \mathbf{X}'_n \Gamma^{-1} \mathbf{X}_n + O(n^{-3/2}),$$

where $\Gamma = \mathbf{E} \{ \mathbf{X}_t \mathbf{X}'_t \}$ as in section 2. Using formula for the expectation of quadratic form we find

$$\begin{aligned}
\mathbf{E} \delta_n^2 &= n^{-1} \mathbf{E} \{ \mathbf{X}'_n \Gamma^{-1} \mathbf{X}_n \} + O(n^{-3/2}) \\
(24) \quad &= n^{-1} [\mathbf{E} \{ \text{Tr}(\Gamma^{-1} \text{var} \mathbf{X}_n) \} + \mathbf{E} \mathbf{X}'_n \Gamma^{-1} \mathbf{E} \mathbf{X}_n] + O(n^{-3/2}) \\
&= n^{-1} p + O(n^{-3/2}).
\end{aligned}$$

Since $\phi(t)''$ is product of a polynomial and $\exp(-t^2/2)$, it is bounded, thus $|\phi(z_n)''| \leq M_1$ for some $M_1 > 0$. Rewrite

$$\sigma^3 \delta_n^3 = \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p \sum_{l=1}^p (a_j^* - a_j)(a_k^* - a_k)(a_l^* - a_l) X_{n-j+1} X_{n-k+1} X_{n-l+1}.$$

We have

$$\sigma^3 \mathbf{E} |\delta_n^3| \leq \sum_{j,k,l} \mathbf{E} \{ |a_j^* - a_j| \dots |X_{n-j+1}| \dots \} \leq \sum_{j,k,l} \sqrt[6]{\mathbf{E} \{ |a_j^* - a_j|^6 \} \dots \mathbf{E} \{ |X_{n-j+1}|^6 \} \dots}$$

from Holder inequality. Now $M_2 = \mathbf{E} \{ |X_t|^6 \}$ is finite because X_t is Gaussian, thus

$$\mathbf{E} |\delta_n^3| \leq \sigma^{-3} \sqrt{M_2} \sum_{j,k,l} \sqrt[6]{\mathbf{E} \{ |a_j^* - a_j|^6 \} \mathbf{E} \{ |a_k^* - a_k|^6 \} \mathbf{E} \{ |a_l^* - a_l|^6 \}}.$$

Following Bhansali and Papangelou (1991), $\mathbf{E} \{ |a_j^* - a_j|^6 \} = O(n^{-3})$ and we find $\mathbf{E} |\delta_n^3| = O(n^{-3/2})$. Finally

$$(25) \quad \mathbf{E} \{ |\delta_n^3 \phi(z_n)''| \} \leq M_1 \mathbf{E} |\delta_n^3| = O(n^{-3/2}).$$

Combining (23), (24), (25) and $\phi(t)' = -t\phi(t)$ and inserting into (22) we obtain

$$\mathbf{E} \{ \text{CP}(\text{PI}_1^*(\alpha) | \mathbf{a}^*, \mathbf{X}_n) \} = \alpha - (2n)^{-1} p z_\alpha \phi(z_\alpha) + O(n^{-3/2}),$$

which was to be shown. Q.E.D.

We could extend our theorem to the model with unknown mean provided the result of Bhansali and Papangelou (1991),

$$\mathbf{E} \{ |\hat{a}_j - a_j|^k \} = O(n^{-k/2}), \quad 0, \dots, p$$

is valid for such model. Unfortunately as far as we know, there is no such generalization in the literature. The formula for the more general case, not proven yet would be

$$\text{UCP}[\widehat{\text{PI}}_1(\alpha)] = \alpha - (2n)^{-1} (p+1) z_\alpha \phi(z_\alpha).$$

REFERENCES

- [1] Beran, R. (1990). Calibrating prediction regions. *Journal of the American Statistical Association* **85**, 715–723.
- [2] Bhansali, R.J. and Papangelou, F. (1991). Convergence of moments of least squares estimators for the coefficients of an autoregressive process of unknown order. *The Annals of Statistics*, **19**, 1155–1162.
- [3] Cryer, J.D., Nankervis, J.C. and Savin, N.E. (1990). Forecast error symmetry in ARIMA models. *Journal of the American Statistical Association*, **85**, 724–728.
- [4] Fuller, W.A. and Hasza, D.P. (1980). Predictors for the first-order autoregressive process. *Journal of Econometrics*, **13**, 139–157.
- [5] Fuller, W.A. and Hasza, D.P. (1981). Properties of predictors for autoregressive time series. *Journal of the American Statistical Association*, **76**, 155–161.
- [6] Montgomery, D.C., Johnson, L.A. and Gardiner, J.S. (1990). *Forecasting & Time Series Analysis*. New York: McGraw-Hill.

UK MFF, KPMS, SOKOLOVSK 83, 186 75 PRAHA
E-mail address: zvarap@karlin.mff.cuni.cz

ROBUST'2000
SBORNÍK PRACÍ JEDENÁCTÉ LETNÍ ŠKOLY JČMF
USPOŘÁDALI: JAROMÍR ANTOCH & GEJZA DOHNAL
VYDALA: JEDNOTA ČESKÝCH MATEMATIKŮ A FYZIKŮ V PRAZE
SAZBA PROGRAMEM T_EX
© JČMF 2001
ISBN 80-7015-792-5
57-551-01

ISBN 80-7015-792-5



9 788070 157923