

Prostorové modelování, prostorová statistika 1 (NSTP005)

verze 12. 1. 2012

Obsah

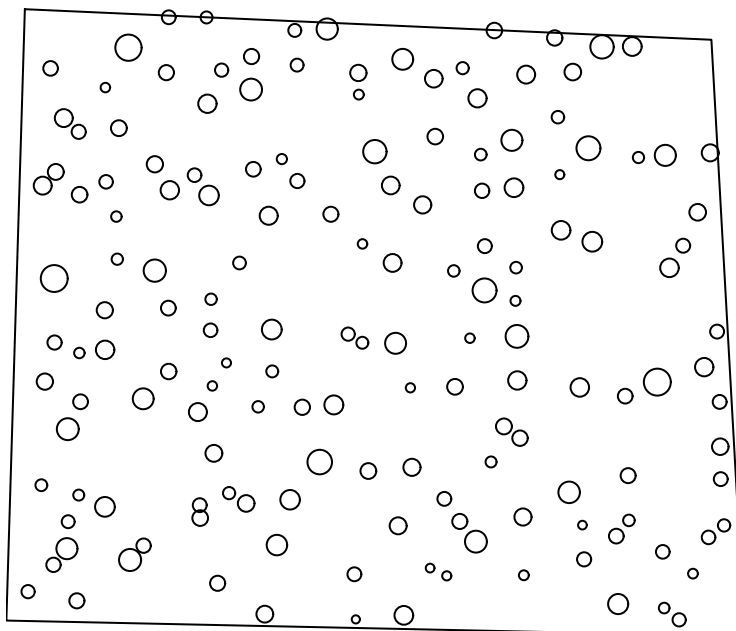
Obsah	1
1. Úvod	2
2. Bodové procesy	4
2.1 Základní definice a tvrzení	4
2.2 Poissonův bodový proces	6
2.3 Momentové míry	8
2.4 Palmovo rozdělení	9
2.5 Charakteristiky bodových procesů	12
2.6 Modely bodových procesů	15
2.7 Konečné bodové procesy s hustotou	21
2.8 Statistika bodových procesů	25
3. Geostatistika	30
3.1 Náhodná pole	30
3.2 Variogram a kovarianční funkce	31
3.3 Krigování	36
3.4 Vliv odhadů kovariančních parametrů	38
3.5 Bayesovský přístup	39
3.6 Další témata	40
4. Prostorové modely na mřížích	41
4.1 Markovská náhodná pole	41
4.2 Gaussovské modely	46
4.3 Statistická analýza	47
4.4 Rekonstrukce obrázků	50
5. Dodatky	53
5.1 Náhodné cenzorování	53
5.2 Besselovy funkce	53
Literatura	53

1. Úvod

V klasické statistice je základním pojmem náhodný výběr (posloupnost nezávislých náhodných veličin se stejným rozdělením). V praxi se ovšem často stává, že data netvoří náhodný výběr. To je příklad nehomogenních dat (nelze je považovat za realizaci stejně rozdělených náhodných veličin) nebo závislých dat. Řada modelů časových řad je založena na závislých stejně rozdělených pozorováních. Jiným možným zobecněním náhodného výběru je situace, kdy v daném čase pozorujeme více než jednu náhodnou veličinu. Dostáváme se tak do oblasti mnohorozměrné statistiky, kde pracujeme s posloupností náhodných vektorů. Oproti tomu v prostorové statistice jsou analyzována data, na která lze pohlížet jako na měření určité veličiny v různých místech prostoru. Data tohoto typu se vyskytují v celé řadě oborů, například v geologii, epidemiologii, lesnictví, ekologii, sociologii, zpracování obrazu, astronomii nebo meteorologii. Prostorová data obvykle nejsou nezávislá (podobně jako u časových řad). Je typické, že pozorování, která pocházejí z dvou blízkých poloh, jsou korelovaná. Proto je třeba, aby prostorové modely zahrnovaly prostorovou závislost. Hlavním problémem při zobecnění časových modelů je, že v prostoru není žádná analogie minulosti a budoucnosti, a rovněž prostorová data se obvykle nevyskytují pravidelně, na rozdíl od většiny časových řad, kde jsou pozorování v pravidelných časových intervalech.

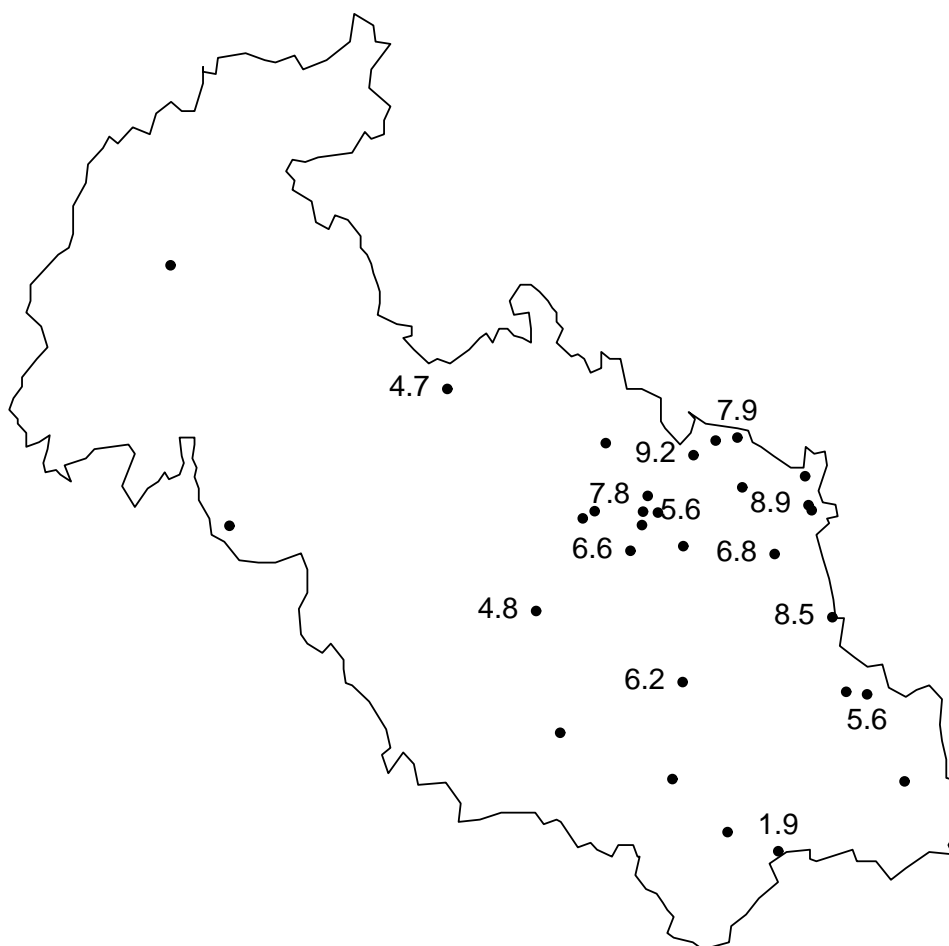
Budeme uvažovat data jako realizaci náhodného procesu $\{Z(x) : x \in D \subseteq \mathbb{R}^d\}$. Vzhledem k tomu, že parametr x je prostorový, mluvíme o náhodném poli. Pokud je $Z(x)$ náhodný vektor, jedná se o více-rozměrné náhodné pole. Rozlišujeme tři základní typy prostorových dat:

1. bodové vzorky: D je náhodná lokálně konečná množina, kterou můžeme interpretovat jako místa výskytu nějaké události. Příkladem mohou být prostorové uspořádání epicenter zemětřesení, polohy stromů v lese, rozmístění hnízd ptáků v krajině, organizace jader buněk v živočišné tkáni nebo místa výskytu nakažených klíšťat. Kromě samotného místa x mohou data obsahovat další informaci $Z(x)$ (tzv. kótu), např. síla zemětřesení nebo výška stromu. První otázkou při analýze těchto dat bývá, zda body vzorku jsou pravidelně, náhodně nebo shlukově uspořádány, případně jak prostorové rozmístění bodů ovlivňuje velikosti kót. Na obrázku 1 je kótovaný bodový vzorek, kde body představují polohy smrků a kóty jsou jejich tloušťky.



Obrázek 1. Polohy a tloušťky smrků ztepilých ve zkoumané oblasti (tzv. trvalé zkušné ploše) na Českomoravské vrchovině. Zaměřené souřadnice stromů odpovídají středům kroužků, zjištěné výčetní tloušťky (tloušťky měřené ve výšce 130 cm nad zemí) jsou úměrné průměrům zobrazených kroužků. Data poskytnuta Ústavem pro hospodářskou úpravu lesů se sídlem v Brandýse nad Labem.

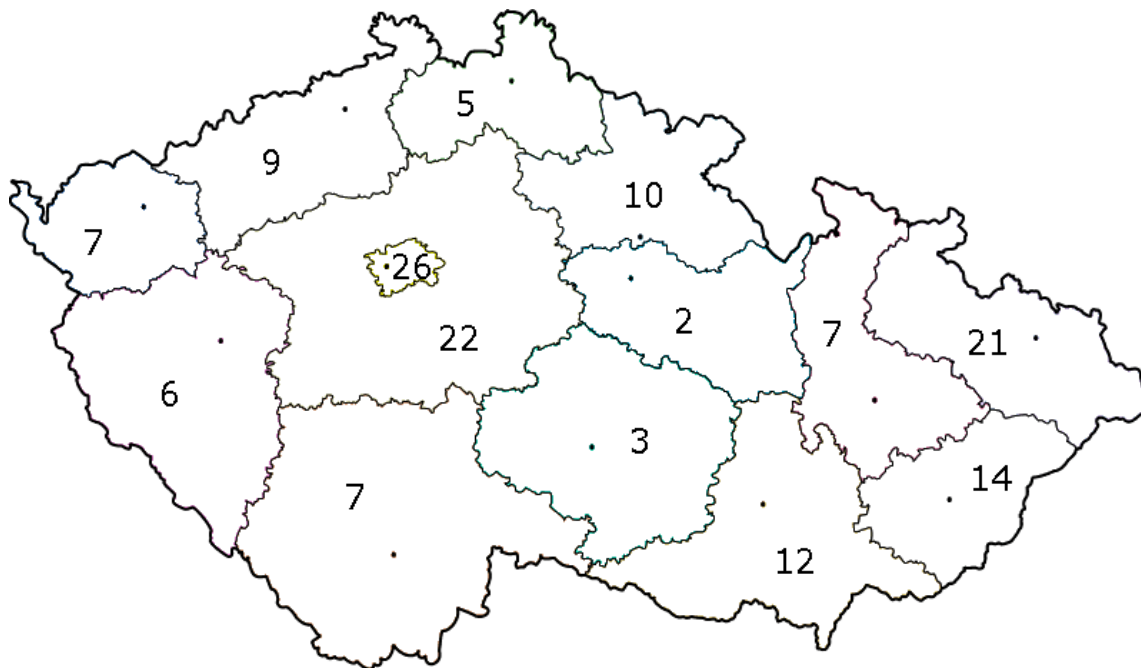
2. geostatistická data: $D \subseteq \mathbb{R}^d$ je pevná (nenáhodná) spojitá množina (obsahuje d -rozměrnou kouli). Náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ jsme schopni teoreticky pozorovat všude na D . V praxi ovšem máme k dispozici hodnoty v konečně mnoha místech. Příkladem je měření teploty, kvality vzduchu nebo koncentrace minerálů v půdě. Cílem může být rekonstrukce povrchu sledované veličiny (případně vektoru), odhad prostorové závislosti (odhad tzv. variogramu) nebo prostorová predikce (tzv. krigování). Informace o kvalitě ovzduší v ČR jsou získávány z měření znečištění ve vybraných monitorovacích stanicích. Jejich prostorové rozmístění v Moravskoslezském kraji je znázorněno na obrázku 2, kde jsou pro vybrané lokality uvedené i průměrné naměřené hodnoty koncentrace oxidu siřičitého za říjen 2009.



Obrázek 2. Lokality v Moravskoslezském kraji, kde se měří znečištění ovzduší. Polohy jsou znázorněny podle seznamu stanic Českého hydrometeorologického ústavu. U některých stanic jsou uvedené průměrné naměřené hodnoty oxidu siřičitého (v $\mu\text{g}/\text{m}^3$) za říjen 2009.

3. regionální data: $D \subseteq \mathbb{R}^d$ je pevná (nenáhodná) diskrétní množina (sjednocení konečně nebo spočetně mnoha bodů). Obvykle se o množině D mluví jako o mříži (ať už pravidelně nebo nepravidelně uspořádané). Body mříže často představují jistý region. Náhodná veličina (nebo náhodný vektor) $Z(x)$ pak udává agregovanou hodnotu přes celý region. Příkladem těchto dat jsou výnosy plodin z daného pole, vegetační index v určité oblasti, pozorování spojené s pixely (u mikroskopických i satelitních snímků), počty případů nakažených jedinců nebo míra kriminality či nezaměstnanosti v daném okrese (případně městě). Typickým cílem je vyhlazení pozorovaných hodnot (volba vhodného modelu a odhad parametrů) a vyhodnocení vazeb na dalších veličinách. Na obrázku 3 je příklad regionálních dat, jedná se o prostorové uspořádání míst narození fotbalistů reprezentujících ČR, údaje jsou agregované v rámci jednotlivých krajů. Regionální data lze také obdržet z předchozích dvou

typů dat prostorovou agregací, např. u bodového vzorku spočítáním událostí v několika disjunktních oblastech nebo u geostatistických dat vyintegrováním náhodného pole přes různé disjunktní oblasti.



Obrázek 3. Počty fotbalových reprezentantů ČR (v letech 1994–2009) podle krajů, ve kterých se narodili.

2. Bodové procesy

Bodové procesy se dají definovat obecně na úplných separabilních lokálně kompaktních metrických prostorech. Pro účely této přednášky si vystačíme s bodovými procesy na d -rozměrném euklidovském prostoru. Obecným bodovým procesům se více věnuje speciální výběrová přednáška prof. Rataje, ke které jsou k dispozici skripta [11].

2.1 Základní definice a tvrzení

Označme \mathcal{B}^d systém borelovských podmnožin \mathbb{R}^d a $\mathcal{B}_0^d \subseteq \mathcal{B}^d$ systém omezených borelovských množin. Definujme prostor lokálně konečných podmnožin \mathbb{R}^d jako $\mathcal{N} = \{\varphi \subseteq \mathbb{R}^d : \varphi(B) < \infty \forall B \in \mathcal{B}_0^d\}$, kde $\varphi(B)$ označuje počet bodů množiny $\varphi \cap B$. Na \mathcal{N} lze zavést σ -algebru následovně: $\mathfrak{N} = \sigma\{\mathcal{U}_{B,m} : m \in \mathbb{N}_0, B \in \mathcal{B}_0^d\}$, kde $\mathcal{U}_{B,m} = \{\varphi \in \mathcal{N} : \varphi(B) = m\}$. Někdy se pro prvky \mathcal{N} používá označení *bodová konfigurace* (*point configuration*). Bodový proces můžeme definovat jako náhodnou bodovou konfiguraci.

Definice 1. *Bodový proces (point process)* Φ je měřitelné zobrazení $\Phi : (\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) \rightarrow (\mathcal{N}, \mathfrak{N})$, kde $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ je pravděpodobnostní prostor. *Rozdělení (distribution)* bodového procesu je míra Π na $(\mathcal{N}, \mathfrak{N})$ definována vztahem $\Pi(\mathcal{U}) = \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : \Phi(\omega) \in \mathcal{U}\})$, $\mathcal{U} \in \mathfrak{N}$. Řekneme, že bodový proces je *konečný (finite)*, jestliže má konečně mnoho bodů s.j.

Poznámka: V této definici připouštíme pouze tzv. *jednoduché (simple)* bodové procesy, tj. Φ má navzájem různé body. Obecněji lze bodový proces definovat jako náhodnou celočíselnou lokálně konečnou (tj. konečnou na omezených množinách) míru. Potom připouštíme, že některé body se mohou započítávat s větší násobností. Realizace bodového procesu je lokálně konečná množina, a proto může mít nejvýše spočetně mnoho bodů. Množině $\varphi = \{x_1, x_2, \dots\}$ odpovídá atomická míra $\sum_i \delta_{x_i}$, kde δ_x je Diracova míra v bodě x . Někdy je výhodnější pohlížet na realizaci bodového procesu jako na lokálně konečnou množinu, jindy zase jako na lokálně konečnou míru.

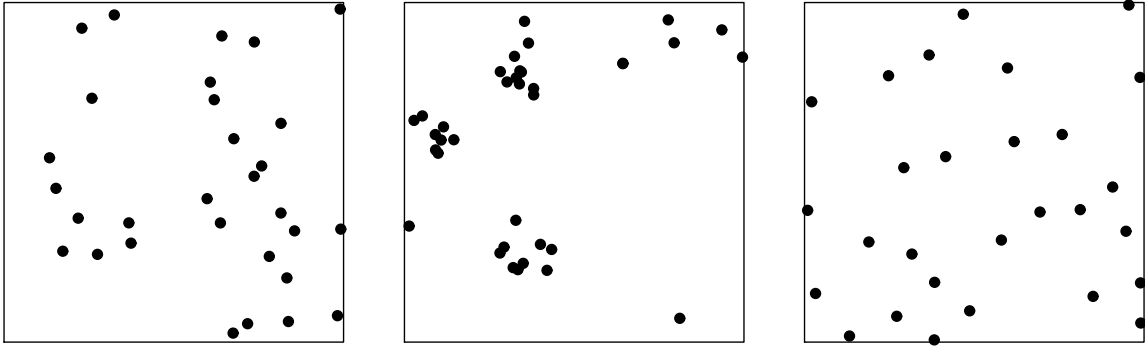
Poznámka: Historicky se vžil pojem „bodový proces“, vhodnější by možná byl název „bodové pole“. V případě $d > 1$ nemá totiž označení „proces“ nic společného s dynamickým vývojem v čase. U bodových procesů nás zajímá rozmístění bodů v d -rozměrném euklidovském prostoru v pevném časovém okamžiku.

Obecnější třídu tvoří *časoprostorové bodové procesy*, kde každý bod představuje časový okamžik události a její umístění v prostoru. V časoprostorových procesech se tedy vyskytuje jak evoluce v čase, tak prostorové rozmístění bodů. Toto téma již ale přesahuje rámec přednášky.

Poznámka: Bodový proces Φ je zobrazení z $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ do $(\mathcal{N}, \mathfrak{N})$, tedy pro $\omega \in \Omega$ je $\Phi(\omega)$ lokálně konečná množina. Počet bodů množiny $\Phi(\omega)$ v dané množině $B \in \mathcal{B}^d$ označujeme symbolem $\Phi(\omega)(B)$, často proměnnou ω vynecháváme a píšeme pouze $\Phi(B)$.

Poznámka: Někdy budeme ztotožňovat bodový proces Φ a jeho rozdělení Π a obojí budeme nazývat bodový proces.

Na obrázku 4 jsou znázorněny tři příklady bodových procesů ve čtvercovém okně pozorování. V prvním z nich jsou body rozmístěny nezávisle na sobě, ve druhém mají tendenci se přitahovat a vytvářejí tak shluky a ve třetím se zase spíše odpuzují a vytvářejí regulární bodový vzorek.



Obrázek 4. Tři různé realizace rovinných bodových procesů ukazující tři základní rysy: úplná prostorová náhodnost (vlevo), shlukování (uprostřed) a regularita (vpravo).

Věta 1. Φ je bodový proces právě tehdy, když $\Phi(B)$ je náhodná veličina pro každé $B \in \mathcal{B}_0^d$.

Důkaz: Nechť Φ je bodový proces, potom $\Phi(B)$ je měřitelné, protože se jedná o složení Φ a měřitelného zobrazení $f_B : (\mathcal{N}, \mathfrak{N}) \rightarrow \mathbb{N}_0$ daného předpisem $f_B(\varphi) = \varphi(B)$. Naopak když $\Phi(B)$ je náhodná veličina pro každé $B \in \mathcal{B}_0^d$, potom musíme ověřit, že vzor množiny $\mathcal{U}_{B,m}$ při zobrazení Φ je měřitelný pro libovolné $m \in \mathbb{N}_0$, $B \in \mathcal{B}_0^d$. Ovšem $\Phi^{-1}(\mathcal{U}_{B,m}) = \{\omega \in \Omega : (\Phi(\omega))(B) = m\} \in \mathcal{A}$.

□

Poznámka: Protože \mathbb{R}^d se dá vyjádřit jako spočetné sjednocení omezených borelovských množin, dostáváme, že $\Phi(B)$ je náhodná veličina (s hodnotami v $\mathbb{N}_0 \cup \{\infty\}$) pro libovolné $B \in \mathcal{B}^d$.

Definice 2. Nechť Φ je bodový proces. *Prázdnými pravděpodobnostmi (void probabilities)* rozumíme pravděpodobnosti $\mathbb{P}(\Phi(B) = 0)$, $B \in \mathcal{B}_0^d$.

Věta 2. Rozdělení bodového procesu Φ je jednoznačně určeno prázdnými pravděpodobnostmi.

Důkaz: Pro $B \in \mathcal{B}_0^d$ a $m \in \mathbb{N}_0$ označme $\mathcal{U}_{B,m} = \{\varphi \in \mathcal{N} : \varphi(B) = m\}$. Připomeňme, že tyto množiny generují σ -algebru \mathfrak{N} , tj. $\mathfrak{N} = \sigma\{\mathcal{U}_{B,m} : B \in \mathcal{B}_0^d, m \in \mathbb{N}_0\}$. Ve skutečnosti si vystačíme s menší množinou generátorů, platí totiž také $\mathfrak{N} = \sigma\{\mathcal{U}_{B,0} : B \in \mathcal{B}_0^d\}$. Jedna inkluze je zřejmá, a tak stačí ukázat, že $\mathfrak{N} \subseteq \sigma\{\mathcal{U}_{B,0} : B \in \mathcal{B}_0^d\}$. Prostor \mathbb{R}^d můžeme rozdělit na navzájem disjunkt ní krychličky o hraně délky 2^{-n} . Položíme $\mathcal{D}_n = \{D_{z,n} : z \in \mathbb{Z}^d\}$, kde $D_{z,n} = [z/2^n, (z+1)/2^n]$ a $[a, b] = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \dots \times [a_d, b_d]$ pro $a, b \in \mathbb{R}^d$. Máme tak posloupnost $\{\mathcal{D}_n, n \in \mathbb{N}\}$ zjemňujících se spočetných rozkladů prostoru \mathbb{R}^d . Nyní si uvědomíme, že $\varphi \in \mathcal{U}_{B,m}$ právě tehdy, když existuje $n_0 \in \mathbb{N}$ takové, že pro každé $n \geq n_0$ existují $z_1, \dots, z_m \in \mathbb{Z}^d$ tak, že $\varphi(B \cap D_{z_i,n}) > 0$, $i = 1, \dots, m$ a $\varphi(B \setminus \cup_{i=1}^m D_{z_i,n}) = 0$. Neboli

$$\mathcal{U}_{B,m} = \bigcup_{n_0 \in \mathbb{N}} \bigcap_{n \geq n_0} \bigcup_{z_1, \dots, z_m \in \mathbb{Z}^d} \left(\bigcap_{i=1}^m (\mathcal{U}_{B \cap D_{z_i,n},0})^c \cap \mathcal{U}_{B \setminus \cup_{i=1}^m D_{z_i,n},0} \right) \in \sigma\{\mathcal{U}_{B,0} : B \in \mathcal{B}_0^d\}$$

pro každé $B \in \mathcal{B}_0^d$ a $m \in \mathbb{N}_0$, a tudíž $\mathfrak{N} \subseteq \sigma\{\mathcal{U}_{B,0} : B \in \mathcal{B}_0^d\}$.

Pokud Π je rozdělení bodového procesu Φ , tak jeho prázdné pravděpodobnosti jsou $\mathbb{P}(\Phi(B) = 0) = \Pi(\mathcal{U}_{B,0})$. Systém množin $\{\mathcal{U}_{B,0}, B \in \mathcal{B}_0^d\}$ je uzavřený na konečné průniky (neboť $\mathcal{U}_{B_1,0} \cap \mathcal{U}_{B_2,0} = \mathcal{U}_{B_1 \cup B_2,0}$)

a generuje σ -algebru \mathfrak{N} . Z věty o jednoznačnosti míry tak plyne, že pokud se dvě rozdělení shodují na $\{\mathcal{U}_{B,0}, B \in \mathcal{B}_0^d\}$ (což znamená, že mají stejné prázdné pravděpodobnosti), shodují se také na \mathfrak{N} . \square

Definice 3. Bodový proces Φ je *stacionární (stationary)*, jestliže jeho rozdělení je invariantní vůči posunutím, tj. rozdělení $\Phi + y = \{X + y : X \in \Phi\}$ je stejné jako rozdělení Φ pro libovolné $y \in \mathbb{R}^d$. Bodový proces Φ je *izotropní (isotropic)*, jestliže jeho rozdělení je invariantní vůči rotacím kolem počátku v \mathbb{R}^d , tj. $\mathcal{O}\Phi = \{\mathcal{O}X : X \in \Phi\}$ a Φ mají stejné rozdělení pro libovolnou rotaci \mathcal{O} kolem počátku.

Definice 4. Pro bodový proces Φ definujeme *míru intenzity (intensity measure)* předpisem

$$\Lambda(B) = \mathbb{E}\Phi(B), \quad B \in \mathcal{B}^d,$$

neboli $\Lambda(B)$ je střední počet bodů procesu Φ v množině B . Existuje-li hustota λ míry Λ vzhledem k Lebesgueově míře (tj. $\Lambda(B) = \int_B \lambda(x) dx$, $B \in \mathcal{B}^d$), potom λ se nazývá *funkce intenzity (intensity function)*.

Poznámka: Míra intenzity je borelovská míra, σ -aditivita plyne z Leviho věty o monotónní konvergenci. Míra intenzity nemusí být lokálně konečná, může se tedy stát, že $\Lambda(B) = \infty$ pro nějakou $B \in \mathcal{B}_0^d$. My však budeme většinou pracovat s bodovými procesy, u kterých předpokládáme lokálně konečnou míru intenzity.

Poznámka: Význam funkce intenzity lze heuristicky chápat tak, že $\lambda(x) dx$ je pravděpodobnost, že se v infinitezimálně malé kouli se středem v x a objemem dx vyskytuje bod procesu.

Lemma 3. *Je-li Φ stacionární bodový proces s lokálně konečnou mírou intenzity Λ , pak Λ je nezáporným násobkem Lebesgueovy míry.*

Důkaz: Pro stacionární bodové procesy platí $\Lambda(B + y) = \Lambda(B)$ pro každé $y \in \mathbb{R}^d$. Tvrzení plyne z toho, že Lebesgueova míra je až na násobek jediná lokálně konečná translačně invariantní míra na $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}^d)$. \square

Definice 5. Z lemmatu 3 víme, že pro stacionární bodový proces je míra intenzity násobkem Lebesgueovy míry: $\Lambda(B) = \lambda|B|$. Funkce intenzity je konstantní a rovna tomuto násobku $\lambda \geq 0$, kterému se říká *intenzita (intensity)* stacionárního bodového procesu. Intenzita udává střední počet bodů procesu v množině s jednotkovým objemem.

Poznámka: Příklad $\lambda = 0$ není moc zajímavý, znamená, že $\Phi = \emptyset$ skoro jistě.

2.2 Poissonův bodový proces

Ještě než se dostaneme k Poissonovu bodovému procesu, definujeme příbuzný proces.

Definice 6. Nechť ν je difúzní (neatomická) míra (tedy $\nu(\{x\}) = 0$ pro každé $x \in \mathbb{R}^d$). Mějme $B \in \mathcal{B}^d$ takovou, že $0 < \nu(B) < \infty$. Nechť $n \in \mathbb{N}$ a X_1, \dots, X_n jsou nezávislé stejně rozdělené (ν -rovnoměrně) náhodné vektory, tj.

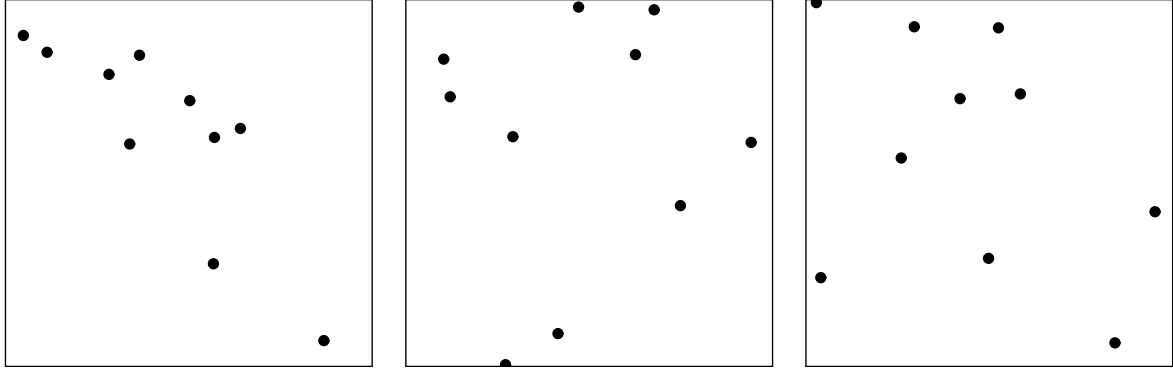
$$\mathbb{P}(X_i \in A) = \frac{\nu(A)}{\nu(B)}, \quad A \subseteq B, A \in \mathcal{B}^d.$$

Potom $\Phi^{(n)} = \{X_1, \dots, X_n\}$ je *binomický (binomial) bodový proces* o n bodech v B .

Poznámka: Měřitelnost $\Phi^{(n)}$ plyne z věty 1, protože $\Phi^{(n)}(A) = \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{[X_i \in A]}$ je náhodná veličina. Můžeme si povšimnout, že $\Phi^{(n)}(A)$ má binomické rozdělení s parametry n a $\nu(A \cap B)/\nu(B)$.

Poznámka: Často předpokládáme, že ν má hustotu vzhledem k Lebesgueově míře, označme ji f . Potom body X_i jsou náhodné vektory s pravděpodobnostní hustotou $f/\nu(B)$.

Poznámka: Knihovna spatstat [2] v R [12] umožňuje generování realizací binomického bodového procesu pomocí funkcí runifpoint, runifdisc a rpoint. Příklady tří realizací binomického procesu s 10 rovnoměrně rozdělenými body jsou znázorněny na obrázku 5.



Obrázek 5. Tři různé realizace binomického bodového procesu s 10 rovnoměrně rozdělenými body v rovinném okně jednotkového obsahu.

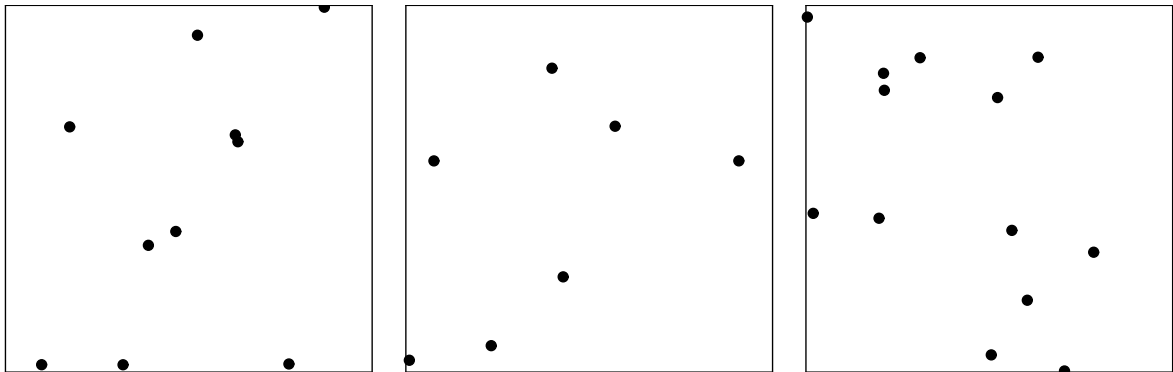
Poissonův proces představuje základní model bodových procesů. Slouží jako referenční proces při studiu popisných charakteristik a používá se jako základ pro konstrukci složitějších modelů. Jde o model úplné nezávislosti bodů, ve kterém neexistují žádné interakce mezi body.

V případě $d = 1$ bývá Poissonův proces často definován pomocí nezávislých přírůstků, které mají exponenciální rozdělení. Ve větší dimenzi budeme místo časových přírůstků uvažovat počty událostí (bodů) v disjunktních oblastech.

Definice 7. Necht Λ je lokálně konečná difúzní míra na $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}^d)$. Bodový proces Φ takový, že
 (i) $\Phi(B)$ má Poissonovo rozdělení s parametrem $\Lambda(B)$ pro každé $B \in \mathcal{B}_0^d$,
 (ii) $\Phi(B_1), \dots, \Phi(B_n)$ jsou nezávislé pro každé $n \in \mathbb{N}$ a $B_1, \dots, B_n \in \mathcal{B}_0^d$ po dvou disjunktní,
 nazveme *Poissonův bodový proces (Poisson point process)* s mírou intenzity Λ . Pokud existuje funkce intenzity λ a je konstantní, pak Φ je *homogenní (homogeneous) Poissonův proces* s intenzitou λ . Jestliže navíc je tato intenzita rovna jedné, mluvíme o *standardním (standard)* nebo také *jednotkovém (unit rate)* Poissonově procesu.

Poznámka: Homogenní Poissonův proces je stacionární a izotropní (viz cvičení). Intenzita homogenního Poissonova procesu splývá s intenzitou z definice 5.

V knihovně `spatstat` se k simulování Poissonova bodového procesu dá využít funkce `rpoispp`. Příklady tří realizací homogenního Poissonova procesu s intenzitou 10 v jednotkovém okně jsou znázorněny na obrázku 6.



Obrázek 6. Tři různé realizace homogenního Poissonova bodového procesu s intenzitou 10 v rovinném okně jednotkového obsahu. Počty bodů v okně jsou postupně 10, 7 a 13.

Věta 4. Necht Λ lokálně konečná difúzní míra na \mathbb{R}^d . Potom existuje Poissonův bodový proces s mírou intenzity Λ a je jednoznačně určen.

Důkaz: Z definice Poissonova bodového procesu plyne, že prázdné pravděpodobnosti jsou $e^{-\Lambda(B)}$. Jednoznačnost tak plyne z věty 2. Na cvičení jsme si ukázali konstrukční důkaz existence. □

Věta 5. Necht' Φ je Poissonův bodový proces s mírou intenzity Λ . Zvolme pevně $B \in \mathcal{B}^d$ takovou, že $\Lambda(B) < \infty$. Potom podmíněně při $\Phi(B) = n$ je restrikce Φ na B binomický bodový proces na B s mírou Λ a n body.

Důkaz: Označme $\Phi_B = \Phi \cap B$ restrikci Φ na množinu B . Pro libovolnou borelovskou $A \subseteq B$ je

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\Phi_B(A) = 0 \mid \Phi(B) = n) &= \frac{\mathbb{P}(\Phi(A) = 0, \Phi(B \setminus A) = n)}{\mathbb{P}(\Phi(B) = n)} = \frac{\mathbb{P}(\Phi(A) = 0)\mathbb{P}(\Phi(B \setminus A) = n)}{\mathbb{P}(\Phi(B) = n)} \\ &= \frac{e^{-\Lambda(A)} \frac{\Lambda(B \setminus A)^n}{n!} e^{-\Lambda(B \setminus A)}}{\frac{\Lambda(B)^n}{n!} e^{-\Lambda(B)}} = \left(\frac{\Lambda(B \setminus A)}{\Lambda(B)} \right)^n, \end{aligned}$$

což jsou přesně prázdné pravděpodobnosti binomického procesu. Stačí tak využít větu 2. □

Věta 5 říká, že z jedné realizace nepoznáme rozdíl mezi binomickým a Poissonovým procesem. Zatímco u binomického procesu je počet bodů v okně pevný, tak u Poissonova procesu má Poissonovo rozdělení, viz obrázek 5 a obrázek 6.

2.3 Momentové míry

Definice 8. Pro bodový proces Φ je *momentová míra n -tého řádu* (*n -th order moment measure*) dána vztahem

$$M^{(n)}(A) = \mathbb{E} \sum_{X_1, \dots, X_n \in \Phi} \mathbf{1}_{[(X_1, \dots, X_n) \in A]}, \quad A \in (\mathcal{B}^d)^n$$

a *faktoriální momentová míra n -tého řádu* (*n -th order factorial moment measure*) vztahem

$$\alpha^{(n)}(A) = \mathbb{E} \sum_{X_1, \dots, X_n \in \Phi}^{\neq} \mathbf{1}_{[(X_1, \dots, X_n) \in A]}, \quad A \in (\mathcal{B}^d)^n,$$

kde $\sum_{X_1, \dots, X_n \in \Phi}^{\neq}$ znamená, že se sčítá pouze přes n -tice navzájem různých bodů X_1, \dots, X_n .

Poznámka: Momentové míry prvního řádu splývají s mírou intenzity $M^{(1)} = \alpha^{(1)} = \Lambda$. Vztah mezi momentovou mírou n -tého řádu a momenty počtů bodů je následující:

$$M^{(n)}(B_1 \times \dots \times B_n) = \mathbb{E}[\Phi(B_1) \cdots \Phi(B_n)], \quad B_1, \dots, B_n \in \mathcal{B}^d,$$

speciálně $M^{(n)}(B \times \dots \times B) = \mathbb{E}\Phi(B)^n$ pro $B \in \mathcal{B}^d$. Podobně faktoriální momentová míra souvisí s faktoriálním momentem počtu bodů v dané oblasti: $\alpha^{(n)}(B \times \dots \times B) = \mathbb{E}[\Phi(B)(\Phi(B) - 1) \cdots (\Phi(B) - n + 1)]$.

Definice 9. Necht' existuje hustota $\lambda^{(n)}$ faktoriální momentové míry $\alpha^{(n)}$ vzhledem k (nd) -rozměrné Lebesgueově míře. Hustota $\lambda^{(n)}$ se nazývá *součinnová hustota n -tého řádu* (*n -th order product density*).

Poznámka: Součinnová hustota prvního řádu splývá s funkcí intenzity. Budeme psát $\lambda^{(1)} = \lambda$.

Poznámka: Podobně jako u funkce intenzity můžeme součinnovou hustotu n -tého řádu zavést heuristicky. Uvažujme n infinitezimálně malých disjunktních koulí se středy v x_1, \dots, x_n a objemy dx_1, \dots, dx_n . Potom $\lambda^{(n)}(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n$ je pravděpodobnost, že v každé z těchto koulí je bod procesu.

Pro Poissonův bodový proces má faktoriální momentová míra jednoduchý tvar.

Věta 6. Necht' Φ je Poissonův bodový proces s difúzní mírou intenzity Λ . Jeho faktoriální momentová míra je $\alpha^{(n)} = \Lambda^n$, kde Λ^n značí n -tou mocninu míry Λ ve smyslu součinu měř. Pokud existuje funkce intenzity λ procesu Φ , tak pro součinnovou hustotu n -tého řádu platí $\lambda^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n \lambda(x_i)$.

Důkaz: Pro $B_1, \dots, B_n \in \mathcal{B}^d$ po dvou disjunktní je

$$\alpha^{(n)}(B_1 \times \dots \times B_n) = \mathbb{E}\Phi(B_1) \cdots \Phi(B_n).$$

Z vlastnosti (ii) Poissonova procesu (definice 7) pak plyne

$$\alpha^{(n)}(B_1 \times \dots \times B_n) = \Lambda(B_1) \cdots \Lambda(B_n).$$

Označme $(\mathbb{R}^d)^{(n)} = \{(x_1, \dots, x_n) : x_i \in \mathbb{R}^d \text{ a } x_i \neq x_j \text{ pro } i \neq j\}$ množinu všech n -tic bodů navzájem různých bodů z \mathbb{R}^d . Jedná se o otevřenou podmnožinu $(\mathbb{R}^d)^n$. Systém množin $\{B_1 \times \dots \times B_n : B_i \in \mathcal{B}^d \text{ a } B_i \cap B_j = \emptyset \text{ pro } i \neq j\}$ je uzavřený na konečné průniky a generuje borelovskou σ -algebru $(\mathcal{B}^d)^{(n)}$ na prostoru $(\mathbb{R}^d)^{(n)}$. Protože míry $\alpha^{(n)}$ a Λ^n splývají na tomto systému množin, jsou si podle věty o jednoznačnosti míry rovny na $(\mathcal{B}^d)^{(n)}$. Jelikož $\alpha^{(n)}$ má nulovou míru na $(\mathbb{R}^d)^n \setminus (\mathbb{R}^d)^{(n)}$, jsme s důkazem rovnosti měr hotovi. Přejdeme-li k hustotám měr $\alpha^{(n)}$ a Λ^n , dostaneme vztah pro součinnou hustotu n -tého řádu. □

Následující věta se nám bude často hodit.

Věta 7. (Campbellova věta) Pro bodový proces Φ a libovolnou nezápornou měřitelnou funkci h platí:

$$\mathbb{E} \sum_{X_1, \dots, X_n \in \Phi} h(X_1, \dots, X_n) = \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} h(x_1, \dots, x_n) M^{(n)}(dx_1, \dots, dx_n)$$

a

$$\mathbb{E} \sum_{X_1, \dots, X_n \in \Phi}^{\neq} h(X_1, \dots, X_n) = \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} h(x_1, \dots, x_n) \alpha^{(n)}(dx_1, \dots, dx_n).$$

Důkaz: Pro indikátory plynou vztahy z definice 8. Pomocí standardních argumentů teorie míry (standard measure theory argument) se oba vztahy ukážou nejprve pro jednoduché funkce a pak limitním přechodem pro nezáporné měřitelné funkce. □

Poznámka: Věta 7 je formulována pro nezáporné funkce, úplně stejně však platí pro integrovatelné funkce.

2.4 Palmovo rozdělení

Definice 10. Nechť Φ je bodový proces s mírou intenzity Λ . Definujeme *Campbellovu míru* (Campbell measure) jako

$$C(A) = \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} \mathbf{1}_{[(X, \Phi) \in A]}, \quad A \in \mathcal{B}^d \times \mathfrak{N}.$$

Redukovaná Campbellova míra (reduced Campbell measure) je potom dána vztahem

$$C^1(A) = \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} \mathbf{1}_{[(X, \Phi \setminus \{X\}) \in A]}, \quad A \in \mathcal{B}^d \times \mathfrak{N}.$$

Poznámka: Campbellova míra je též určena vztahem

$$C(B \times \mathcal{U}) = \mathbb{E} \mathbf{1}_{[\Phi \in \mathcal{U}]} \Phi(B), \quad B \in \mathcal{B}^d, \mathcal{U} \in \mathfrak{N}.$$

Povšimněme si, že $\Lambda(\cdot) = C(\cdot \times \mathfrak{N})$. Pro každé $B \in \mathcal{B}^d$ a $\mathcal{U} \in \mathfrak{N}$ platí, že pokud $\Lambda(B) = 0$, pak $C(B \times \mathcal{U}) = 0$. To znamená, že míra $C(\cdot \times \mathcal{U})$ je absolutně spojitá vzhledem k míře Λ . Budeme předpokládat, že míra intenzity Λ je σ -konečná (to platí například, když je lokálně konečná). Potom existuje (Λ -s.j. jednoznačná) Radonova-Nikodymova hustota $P_x(\mathcal{U})$, neboli platí

$$C(B \times \mathcal{U}) = \int_B P_x(\mathcal{U}) \Lambda(dx). \tag{1}$$

Na zobrazení $P : \mathfrak{N} \times \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$ dané předpisem $P(\mathcal{U}, x) = P_x(\mathcal{U})$ lze pohlížet jako na $(\mathfrak{N}, \mathcal{B}^d)$ -náhodnou pravděpodobnostní míru ve smyslu definice 8.1 v [8]. Dá se ukázat, že existuje regulární verze. Často se také používá pojem markovské jádro.

Definice 11. Mějme dva měřitelné prostory (S, \mathcal{S}) a (T, \mathcal{T}) . Zobrazení $K : S \times T \rightarrow [0, 1]$ se nazývá *markovské jádro* (Markov kernel) nebo také *pravděpodobnostní jádro* (probability kernel) z (S, \mathcal{S}) do (T, \mathcal{T}) , jestliže

- (i) pro každé $B \in \mathcal{T}$ je $s \mapsto K(s, B)$ nezáporná měřitelná funkce na S ,
- (ii) pro každé $s \in S$ je $K(s, \cdot)$ pravděpodobnostní míra na (T, \mathcal{T}) .

Systém $\{P_x(\mathcal{U}) : \mathcal{U} \in \mathfrak{N}\}$ hustot z (1) lze volit tak, že tvoří markovské jádro.

Tvrzení 8. *Nechť Φ je bodový proces se σ -konečnou mírou intenzity Λ . Potom existuje markovské jádro P z $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}^d)$ do $(\mathcal{N}, \mathfrak{N})$ takové, že*

$$C(B \times \mathcal{U}) = \int_B P(x, \mathcal{U}) \Lambda(dx), \quad B \in \mathcal{B}^d, \mathcal{U} \in \mathfrak{N}.$$

Je-li P' jiné markovské jádro splňující vztah (1), tak pro každé $\mathcal{U} \in \mathfrak{N}$ je $P(x, \mathcal{U}) = P'(x, \mathcal{U})$ pro Λ -s.v. $x \in \mathbb{R}^d$.

Důkaz: Jelikož \mathcal{N} tvoří úplný separabilní metrický prostor ([11], věta 2.2), můžeme využít větu o existenci regulární verze náhodné pravděpodobnostní míry ([8], věta 8.9). Celý důkaz lze také nalézt v [5], kap. 12 nebo [11], kap. 7. □

Definice 12. Je-li P markovské jádro z tvrzení 8, tak rozdělení $P_x(\cdot) = P(x, \cdot)$ se nazývá *Palmovo rozdělení (Palm distribution)* bodového procesu Φ v bodě x . Analogicky lze definovat rozdělení $P_x^!$, kterému se říká *redukované Palmovo rozdělení (reduced Palm distribution)*. To splňuje vztah

$$C^!(B \times \mathcal{U}) = \int_B P_x^!(\mathcal{U}) \Lambda(dx), \quad B \in \mathcal{B}^d, \mathcal{U} \in \mathfrak{N}.$$

Poznámka: Ve skutečnosti nemá smysl mluvit o Palmově rozdělení v jednom konkrétním bodě, protože to může být definováno libovolně. Nicméně tvrzení 8 zaručuje, že systém Palmových rozdělení $\{P_x : x \in \mathbb{R}^d\}$ je jednoznačně určen pro Λ -s.v. x .

Poznámka: Palmovo rozdělení P_x lze interpretovat jako podmíněné rozdělení bodového procesu za podmínky, že x je bod procesu. Pro $\varepsilon > 0$ malé totiž máme:

$$\mathbb{P}(\Phi \in \mathcal{U} \mid \Phi(b(x, \varepsilon)) > 0) = \frac{\mathbb{P}(\Phi \in \mathcal{U}, \Phi(b(x, \varepsilon)) > 0)}{\mathbb{P}(\Phi(b(x, \varepsilon)) > 0)} \approx \frac{\mathbb{E} \mathbf{1}_{[\Phi \in \mathcal{U}] \Phi(b(x, \varepsilon))}}{\mathbb{E} \Phi(b(x, \varepsilon))} = \frac{C(b(x, \varepsilon) \times \mathcal{U})}{\Lambda(b(x, \varepsilon))} \approx P_x(\mathcal{U}),$$

kde $b(x, \varepsilon)$ značí kouli o středu x a poloměru ε . Lemma 7.2 v [11] nabízí matematicky přesné odvození. Podobně $P_x^!$ lze interpretovat jako podmíněné rozdělení bodového procesu za podmínky, že x je bod procesu a ten nezapočítáváme.

Poznámka: V teorii bodových procesů se často používá označení *typický bod (typical point)*. Jeho význam se interpretuje pomocí Palmova rozdělení. Pokud za Palmova rozdělení P_x má bod x nějakou danou vlastnost, řekneme, že typický bod má tuto vlastnost.

Věta 9. (Campbellova-Meckeho věta) *Pro bodový proces Φ a libovolnou nezápornou měřitelnou funkci h platí:*

$$\mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} h(X, \Phi) = \int_{\mathcal{N}} \int_{\mathbb{R}^d} h(x, \varphi) C(dx, d\varphi) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi) P_x(d\varphi) \Lambda(dx)$$

a

$$\mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} h(X, \Phi \setminus \{X\}) = \int_{\mathcal{N}} \int_{\mathbb{R}^d} h(x, \varphi) C^!(dx, d\varphi) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi) P_x^!(d\varphi) \Lambda(dx).$$

Důkaz: Probíhá standardním postupem teorie míry. □

Věta 10. *Nechť Φ je stacionární bodový proces s intenzitou $\lambda > 0$. Zvolme libovolnou omezenou borelovskou množinu $A \in \mathcal{B}_0^d$ s kladnou Lebesgueovou mírou ($|A| > 0$). Pro $\mathcal{U} \in \mathfrak{N}$ a $x \in \mathbb{R}^d$ označme $\mathcal{U} - x = \{\varphi - x : \varphi \in \mathcal{U}\}$, kde $\varphi - x = \{y - x : y \in \varphi\}$. Potom*

$$P_o(\mathcal{U}) = \frac{1}{\lambda |A|} \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi \cap A} \mathbf{1}_{[\Phi - X \in \mathcal{U}]}, \quad \mathcal{U} \in \mathfrak{N},$$

$$P_x(\mathcal{U}) = P_o(\mathcal{U} - x), \quad \mathcal{U} \in \mathfrak{N},$$

jsou Palmova rozdělení procesu Φ .

Důkaz: Je třeba ověřit, že takto definovaný systém rozdělení splňuje (1), a tudíž vyhovuje definici Palmových rozdělení. Ze stacionarity víme, že míra intenzity Λ je násobkem Lebesgueovy míry (lemma 3), proto

$$\begin{aligned} \int_B P_x(\mathcal{U}) \Lambda(dx) &= \lambda \int_B P_o(\mathcal{U} - x) dx = \lambda \int_B \frac{1}{\lambda|A|} \mathbb{E} \sum_{Y \in \Phi \cap A} \mathbf{1}_{[\Phi - Y \in \mathcal{U} - x]} dx \\ &= \frac{1}{|A|} \int_B \mathbb{E} \sum_{Y \in \Phi \cap A} \mathbf{1}_{[\Phi - Y + x \in \mathcal{U}]} dx. \end{aligned}$$

Nyní bude výhodnější pohlížet na bodový proces Φ jako na náhodnou lokálně konečnou čítací míru. Poslední vztah pak lze přepsat ve tvaru

$$\int_B P_x(\mathcal{U}) \Lambda(dx) = \frac{1}{|A|} \int_B \mathbb{E} \int_A \mathbf{1}_{[\Phi - y + x \in \mathcal{U}]} \Phi(dy) dx = \frac{1}{|A|} \mathbb{E} \int_B \int_A \mathbf{1}_{[\Phi - y + x \in \mathcal{U}]} \Phi(dy) dx,$$

kde jsme pro záměnu integrálu a střední hodnoty použili Fubiniho větu. Protože $(\Phi + x)(B) = \Phi(B - x)$, vede substituce $z = x - y$ na $\Phi(dy) = (\Phi + z)(dx)$. Odtud s využitím stacionarity Φ dostaneme

$$\begin{aligned} \int_B P_x(\mathcal{U}) \Lambda(dx) &= \frac{1}{|A|} \mathbb{E} \int \int \mathbf{1}_{[x \in B]} \mathbf{1}_{[x - z \in A]} \mathbf{1}_{[\Phi + z \in \mathcal{U}]} (\Phi + z)(dx) dz \\ &= \frac{1}{|A|} \mathbb{E} \int \int \mathbf{1}_{[x \in B]} \mathbf{1}_{[z \in x - A]} \mathbf{1}_{[\Phi \in \mathcal{U}]} \Phi(dx) dz \\ &= \mathbb{E} \int_B \mathbf{1}_{[\Phi \in \mathcal{U}]} \Phi(dx) = C(B \times \mathcal{U}). \end{aligned}$$

□

Poznámka: Stejný postup jako v předchozím důkazu lze najít v [11], věta 9.1, kde se obecněji pracuje s Palmovým rozdělením stacionární náhodné míry na \mathbb{R}^d .

Pokud budeme mluvit o Palmově rozdělení stacionárního bodového procesu, máme na mysli soubor rozdělení $(P_x, x \in \mathbb{R}^d)$ z věty 10, který je určen Palmovým rozdělením P_o v počátku a vztahem $P_x(\cdot) = P_o(\cdot - x)$. Podobně redukované Palmovo rozdělení stacionárního bodového procesu budeme uvažovat tvaru

$$\begin{aligned} P_o^!(\mathcal{U}) &= \frac{1}{\lambda|A|} \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi \cap A} \mathbf{1}_{[(\Phi \setminus \{X\}) - X \in \mathcal{U}]}, \quad \mathcal{U} \in \mathfrak{N}, \\ P_x^!(\mathcal{U}) &= P_o^!(\mathcal{U} - x), \quad \mathcal{U} \in \mathfrak{N}. \end{aligned}$$

Campbellova-Meckeova věta má pak následující tvar.

Věta 11. *Pro stacionární bodový proces Φ s intenzitou λ a libovolnou nezápornou měřitelnou funkcí h platí:*

$$\mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} h(X, \Phi) = \lambda \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi) P_x(d\varphi) dx = \lambda \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi + x) P_o(d\varphi) dx$$

a

$$\mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} h(X, \Phi \setminus \{X\}) = \lambda \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi) P_x^!(d\varphi) dx = \lambda \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi + x) P_o^!(d\varphi) dx.$$

Poznámka: Symbolem \mathbb{E}_o (resp. $\mathbb{E}_o^!$) budeme značit střední hodnotu vzhledem k P_o (resp. $P_o^!$), tj.

$$\mathbb{E}_o h(\Phi) = \int h(\varphi) P_o(d\varphi), \quad \mathbb{E}_o^! h(\Phi) = \int h(\varphi) P_o^!(d\varphi).$$

Tvrzení 12. *(Slivnyakova věta) Pro Poissonův proces s rozdělením Π a lokálně konečnou mírou intenzity Λ platí $P_x^! = \Pi$ pro Λ -s.v. $x \in \mathbb{R}^d$.*

Důkaz: [11], věta 7.3.

□

2.5 Charakteristiky bodových procesů

V této podkapitole se budeme věnovat popisným charakteristikám bodových procesů. Rozlišujeme číselné a funkcionální charakteristiky. Číselné charakteristiky popisují vlastnosti bodového procesu jednou číselnou hodnotou. U stacionárních bodových procesů je nejjednodušší a nejdůležitější číselnou charakteristikou intenzita (definice 5). Moderní prostorová statistika používá spíše funkcionální charakteristiky. Příkladem funkcionální charakteristiky je funkce intenzity (definice 4). Intenzita a funkce intenzity jsou charakteristiky prvního řádu (jsou odvozeny od momentové míry prvního řádu). Funkce intenzity je definována i pro nestacionární bodové procesy. My se v této podkapitole zaměříme na stacionární bodové procesy, i když některé definice lze rozšířit pro speciální případy nestacionárních procesů. Nejprve si uveďme příklady dvou číselných charakteristik, které jsou založeny na vzájemných vzdálenostech mezi body procesu.

Definice 13. Uvažujme stacionární bodový proces Φ s intenzitou λ a jako D označme vzdálenost od počátku o k nejbližšímu bodu procesu Φ , tj. $D = \inf_{X \in \Phi} \|X\|$. Definujeme *Pielouvé index náhodnosti* (*Pielou's index of randomness*) jako

$$\text{PI} = \lambda \omega_d \mathbb{E} D^d$$

a *index agregace* (*aggregation index*) nebo také *Clarkův-Evansův index* (*Clark-Evans index*) předpisem

$$\text{CE} = \frac{d(\lambda \omega_d)^{1/d}}{\Gamma(1/d)} \mathbb{E}_o^! D,$$

kde $\omega_d = |b(o, 1)| = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1+d/2)}$ je objem d -rozměrné jednotkové koule.

Tyto indexy úzce souvisí s následujícími funkcionálními charakteristikami.

Definice 14. Nechť Φ je stacionární bodový proces a D je vzdálenost od počátku k nejbližšímu bodu procesu. *Kontaktní distribuční funkce* (*spherical contact distribution function*, *empty space function*, *point-to-nearest-event distribution function*) je dána předpisem

$$F(r) = \mathbb{P}(\Phi(b(o, r)) > 0) = \mathbb{P}(D \leq r), \quad r > 0.$$

Oproti tomu *distribuční funkci vzdálenosti nejbližšího souseda* (*nearest neighbour distance distribution function*, *event-to-event distribution function*) definujeme jako

$$G(r) = P_o^! (\{\varphi \in \mathcal{N} : \varphi(b(o, r)) > 0\}), \quad r > 0.$$

Dále ještě zavedeme *J-funkci* (*J-function*):

$$J(r) = \frac{1 - G(r)}{1 - F(r)}, \quad r > 0 : F(r) < 1.$$

Poznámka: Místo koulí $b(o, r)$ v definici F a G lze uvažovat obecnější množiny.

U funkce G podobně jako u indexu agregace nás zajímá vzdálenost od typického bodu procesu k nejbližšímu bodu procesu (tzv. sousedu), zatímco u funkce F i Pielouvé indexu náhodnosti se díváme na vzdálenost od daného bodu v prostoru k nejbližšímu bodu procesu.

Věta 13. V případě homogenního Poissonova procesu platí $\text{PI} = \text{CE} = 1$, $G(r) = F(r) = 1 - e^{-\lambda \omega_d r^d}$ a $J(r) = 1$.

Důkaz: Viz cvičení. □

Poznámka: Odchylky charakteristik od teoretických hodnot pro Poissonův proces indikují buď shlukování bodů nebo tendence k regularitě. Pro shlukování svědčí hodnoty Pielouvé indexu náhodnosti větší než 1, hodnoty indexu agregace menší než 1 a hodnoty funkce J menší než 1, zatímco pro regularitu je tomu naopak.

Doposud zavedené charakteristiky byly definovány pomocí vzdáleností k nejbližšímu bodu procesu, a tudíž jsou poněkud „krátkozraké“, neboť vzdálenosti mezi více vzdálenými body se již neberou v úvahu.

Na druhou stranu často se podstatné prostorové korelace v datech objevují především mezi body, které jsou blízko u sebe. Jiná třída charakteristik je založena na momentové míře druhého řádu.

Definice 15. Nechť Φ je stacionární bodový proces s intenzitou λ . *Redukovaná momentová míra druhého řádu* (*second order reduced moment measure*) \mathcal{K} je definována pomocí vztahu

$$\lambda\mathcal{K}(B) = \int_{\mathcal{N}} \varphi(B \setminus \{o\}) P_o(d\varphi) = \int_{\mathcal{N}} \varphi(B) P_o^!(d\varphi) = \mathbb{E}_o^! \Phi(B), \quad B \in \mathcal{B}^d.$$

Dále definujeme *redukovanou momentovou funkci druhého řádu* (*second order reduced moment function*) nebo zkráceně *K-funkci* (*K-function*) jako

$$K(r) = \mathcal{K}(b(o, r)), \quad r \geq 0.$$

Poznámka: Můžeme tedy $\lambda K(r)$ interpretovat jako střední počet bodů různých od počátku v kruhu o poloměru r se středem v počátku za podmínky, že v počátku je bod procesu. Alternativně lze K -funkci definovat předpisem

$$\lambda K(r) = \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi \cap A} \frac{\Phi(b(X, r) \setminus \{X\})}{\lambda|A|} = \mathbb{E} \sum_{X, Y \in \Phi}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[X \in A, \|X-Y\| \leq r]}}{\lambda|A|}, \quad (2)$$

kde $A \in \mathcal{B}_0^d$ je libovolná s kladnou Lebesgueovou mírou ($|A| > 0$). První rovnost v (2) plyne z věty 10 nebo z věty 11 (viz cvičení). Druhá rovnost rovnost je rozepsání $\Phi(b(X, r) \setminus \{X\})$ jako $\sum_{Y \in \Phi, Y \neq X} \mathbf{1}_{[\|X-Y\| \leq r]}$. Obecněji platí

$$\lambda\mathcal{K}(B) = \mathbb{E} \sum_{X, Y \in \Phi}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[X \in A, Y-X \in B]}}{\lambda|A|}, \quad B \in \mathcal{B}^d,$$

pro libovolnou $A \in \mathcal{B}_0^d$ s $|A| > 0$.

Definice 16. Uvažujme bodový proces Φ , který nemusí být nutně stacionární. Za předpokladu, že existuje funkce intenzity λ a existuje součinná hustota druhého řádu $\lambda^{(2)}$, definujeme *párovou korelační funkci* (*pair correlation function*) předpisem

$$g(x, y) = \frac{\lambda^{(2)}(x, y)}{\lambda(x)\lambda(y)}, \quad x, y \in \mathbb{R}^d : \lambda(x) > 0, \lambda(y) > 0.$$

Je-li Φ stacionární, jsou $\lambda^{(2)}(x, y) = \lambda^{(2)}(x-y, o) = \lambda^{(2)}(x-y)$ a $g(x, y) = \frac{\lambda^{(2)}(x-y)}{\lambda^2} = g(x-y)$ funkcemi rozdílu $x-y$. Je-li Φ navíc izotropní, jsou $\lambda^{(2)}(x, y) = \lambda^{(2)}(\|x-y\|)$ a $g(x, y) = g(\|x-y\|)$ funkcemi vzdálenosti x a y . Poznamenejme, že na tomto místě i jinde poněkud zneužíváme značení a používáme pro funkce rozdílu $x-y$ nebo velikosti rozdílu $\|x-y\|$ stejné označení jako pro funkci dvojice (x, y) .

Poznámka: Párová korelační funkce může nabývat hodnot v intervalu $[0, \infty)$. Označení „korelační funkce“ je proto poněkud zavádějící.

Věta 14. Pro Poissonův bodový proces je $g(x, y) = 1$ a $K(r) = \omega_d r^d$.

Důkaz: Z věty 6 víme, že $\lambda^{(2)}(x, y) = \lambda(x)\lambda(y)$, a proto platí $g(x, y) = 1$. Z definice redukované momentové míry druhého řádu a tvrzení 12 dostaneme $\lambda\mathcal{K}(B) = \mathbb{E}\Phi(B) = \lambda|B|$. Odtud již plyne, že $K(r) = \omega_d r^d$. \square

Poznámka: Párová korelační funkce představuje užitečný nástroj pro grafické znázornění odchylek od Poissonova procesu. Pokud $g(x, y) > 1$, tak současný výskyt bodů x a y je pravděpodobnější než u Poissonova procesu se stejnou funkcí intenzity. Pro stacionární a izotropní procesy hodnoty párové korelační funkce $g(r)$ větší než 1 odpovídají tomu, že vzdálenosti r mezi body jsou typičtější než u modelu s úplnou prostorovou nezávislostí mezi body. Tedy $g(r) > 1$ indikuje shlukování ve vzdálenostech r , zatímco $g(r) < 1$ znamená regularitu v příslušných vzdálenostech r .

Poznámka: Někdy se místo K -funkce používá její transformace

$$L(r) = \left(\frac{K(r)}{\omega_d} \right)^{1/d}, \quad r \geq 0,$$

kteřou nazveme *L-funkce* (*L-function*). Jedním z důvodů oblíbenosti *L-funkce* je, že pro Poissonův proces je (podle věty 14) rovna identitě ($L(r) = r$). Situace, kdy pro malá r je $L(r) > r$, odpovídá shlukování v příslušných vzdálenostech. U shlukových procesů je totiž typický bod procesu obvykle částí shluku a v jeho blízkosti se nachází více bodů, než jak by tomu bylo pro Poissonův proces se stejnou intenzitou. Naopak pro regulární procesy je $L(r) < r$ pro malá r , protože typický bod procesu je spíše izolovaný a počet bodů ve vzdálenosti r je menší než pro Poissonův proces se stejnou intenzitou.

Věta 15. *Pro stacionární a izotropní proces, pro který existuje párová korelační funkce, platí*

$$g(r) = \frac{K'(r)}{\sigma_d r^{d-1}},$$

kde $K'(r)$ je derivace *K-funkce* a $\sigma_d = d\omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ je povrch jednotkové sféry \mathbb{S}^{d-1} v \mathbb{R}^d .

Důkaz: Rozepíšeme-li vztah (2) podle věty 7 a definice 9, dostaneme

$$\begin{aligned} K(r) &= \int \int \frac{\mathbf{1}_{[x \in A, \|x-y\| \leq r]}}{\lambda^2 |A|} \alpha^{(2)}(d(x, y)) = \int \int \frac{\mathbf{1}_{[x \in A, \|x-y\| \leq r]}}{\lambda^2 |A|} \lambda^{(2)}(x, y) dx dy \\ &= \int \int g(x, y) \frac{\mathbf{1}_{[x \in A, \|x-y\| \leq r]}}{|A|} dx dy = \int \int g(x-y) \frac{\mathbf{1}_{[x \in A, \|x-y\| \leq r]}}{|A|} dx dy. \end{aligned}$$

Dále použijeme substituci $u = x - y$:

$$K(r) = \frac{1}{|A|} \int_A \int \mathbf{1}_{[\|u\| \leq r]} g(u) du dx = \int_{b(o,r)} g(u) du.$$

S využitím izotropie tak pomocí polární dekompozice Lebesgueovy míry (sférické souřadnice) máme

$$K(r) = \int_{b(o,r)} g(\|u\|) du = \int_0^r \sigma_d s^{d-1} g(s) ds.$$

□

Podobně jako jsme ukázali, že

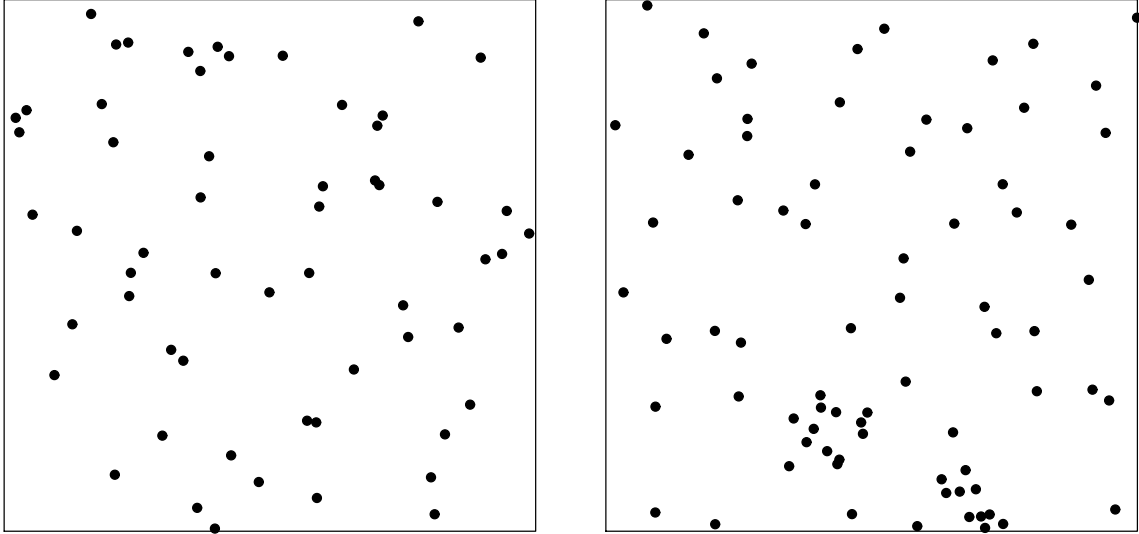
$$K(r) = \int_{b(o,r)} g(u) du,$$

lze odvodit vztah

$$\mathcal{K}(B) = \int_B g(u) du.$$

Jestliže existuje součinnová hustota druhého řádu stacionárního bodového procesu, pak redukovaná momentová míra druhého řádu \mathcal{K} je absolutně spojitá vzhledem k Lebesgueově míře a její hustota je rovna párové korelační funkci g .

Párová korelační funkce a *K-funkce* patří mezi charakteristiky druhého řádu. Popisují jistý druh závislosti mezi body procesu. Existují však procesy, které mají stejné charakteristiky prvního a druhého řádu, ale mají vizuálně velmi rozdílné realizace. Příkladem (viz obrázek 7) je homogenní Poissonův proces a proces z článku [1], jehož realizace v balíčku `spatstat` generuje funkce `rcell`.



Obrázek 7. Realizace dvou různých procesů se shodnými charakteristikami druhého řádu: homogenní Poissonův bodový proces (vlevo) a Baddeleyho-Silvermanův proces (vpravo) v rovinném okně jednotkového obsahu (v obou případech je intenzita rovna 64).

2.6 Modely bodových procesů

Coxovy procesy

Definice 17. Necht' Λ je náhodná lokálně konečná difúzní míra na $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}^d)$. Bodový proces Φ takový, že podmíněně při $\Lambda = \mu$ je Φ Poissonův bodový proces s mírou intenzity μ , se nazývá *Coxův bodový proces* (*Cox point process*) s *řídící mírou* (*driving measure*) Λ . Někdy se také používá označení *dvojně stochastický* (*doubly stochastic*) *Poissonův proces*. Pokud existuje náhodné pole $Y = \{Y(x) : x \in \mathbb{R}^d\}$, které je hustotou míry Λ vzhledem k Lebesgueově míře, tedy takové, že $\Lambda(B) = \int_B Y(x) dx$, $B \in \mathcal{B}^d$, pak řekneme, že Y je *řídící funkce* (*driving function*) Coxova procesu Φ . Podmíněné rozdělení Φ při daném Y je rozdělení Poissonova procesu s funkcí intenzity Y .

Symbolem Λ nyní značíme náhodnou řídící míru, míra intenzity Coxova procesu je $M^{(1)}(B) = \mathbb{E}\Phi(B) = \mathbb{E}[\mathbb{E}(\Phi(B) \mid \Lambda)] = \mathbb{E}\Lambda(B)$. Podobně se s využitím věty 6 ukáže, že pro faktoriální momentovou míru n -tého řádu platí $\alpha^{(n)}(B_1 \times \dots \times B_n) = \mathbb{E}\Lambda(B_1) \dots \Lambda(B_n)$. Pokud existuje řídící funkce Y , tak součinnová hustota Coxova procesu má tvar $\lambda^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \mathbb{E}Y(x_1) \dots Y(x_n)$, jak plyne z Fubiniho věty pro nezáporné funkce. Prázdné pravděpodobnosti Coxova procesu jsou

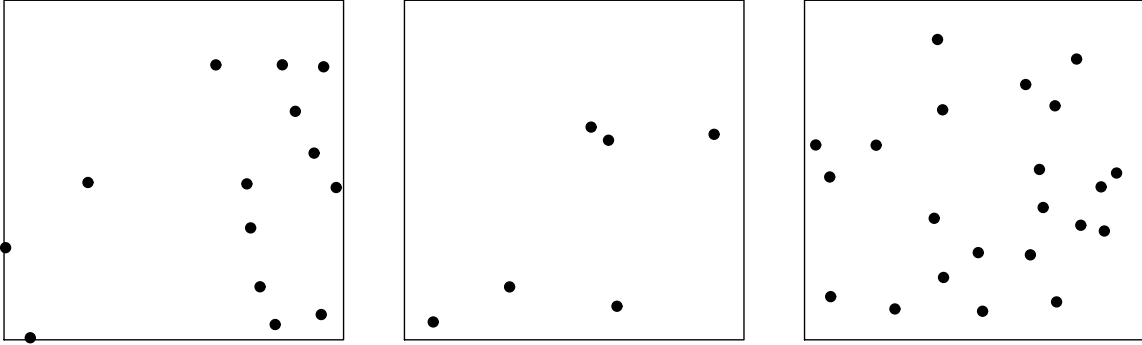
$$\mathbb{P}(\Phi(B) = 0) = \mathbb{E}\mathbf{1}_{[\Phi(B)=0]} = \mathbb{E}[\mathbb{E}(\mathbf{1}_{[\Phi(B)=0]} \mid \Lambda)] = \mathbb{E}[\mathbb{P}(\Phi(B) = 0 \mid \Lambda)] = \mathbb{E}e^{-\Lambda(B)}, \quad B \in \mathcal{B}_0^d.$$

Coxův proces je přirozeným zobecněním Poissonova procesu, kdy míra intenzity není deterministická, ale je náhodná. Poissonův proces je speciálním případem Coxova procesu (Λ je deterministická míra). Nejjednodušší netriviální příklad Coxova procesu obdržíme, když Λ bude (náhodným) násobkem Lebesgueovy míry.

Definice 18. Coxův proces s řídící mírou tvaru $\Lambda(B) = |B| \cdot Y$, kde Y je náhodná veličina, se nazývá *smíšený* (*mixed*) *Poissonův proces*.

Poznámka: Smíšený Poissonův proces je stacionární bodový proces s intenzitou $\mathbb{E}Y$. Platí totiž $\mathbb{E}\Phi(B) = \mathbb{E}\Lambda(B) = |B|\mathbb{E}Y$. Řídící funkce smíšeného Poissonova procesu je konstantní a rovna Y .

Z jedné realizace Coxova procesu nelze poznat rozdíl od Poissonova procesu. Na obrázku 8 jsou tři různé realizace smíšeného Poissonova procesu v rovinném čtvercovém okně jednotkového obsahu. Počet bodů v okně má Poissonovo rozdělení s náhodnou intenzitou Y , která má exponenciální rozdělení, což znamená, že počet bodů má geometrické rozdělení (viz cvičení). Oproti realizacím Poissonova procesu (obrázek 6) je v tomto případě větší variabilita v počtu bodů v okně.



Obrázek 8. Tři realizace smíšeného Poissonova procesu s řídicí náhodnou veličinou Y , která má exponenciální rozdělení se střední hodnotou 10. Okno pozorování je jednotkový čtverec. Počty bodů v jednotlivých oknech jsou postupně 14, 6 a 22.

Shlukové procesy

Definice 19. Mějme bodový proces Φ_p (tzv. *rodičovský proces (parent process)*) a kolekci konečných bodových procesů $\{\Psi_x, x \in \mathbb{R}^d\}$. Potom

$$\Phi = \bigcup_{X \in \Phi_p} \Psi_X$$

se nazývá *shlukový bodový proces (cluster point process)*. Pro $X \in \Phi_p$ se Ψ_X označuje jako *dceřinný proces (daughter process)* příslušný bodu X .

Definice 20. Shlukový proces Φ takový, že

- Φ_p je Poissonův bodový proces,
- $\Psi_x, x \in \mathbb{R}^d$, jsou navzájem nezávislé a nezávislé na Φ_p ,

nazýváme *Poissonovým shlukovým bodovým procesem*.

Následující věta ukazuje, že některé Poissonovy shlukové procesy jsou zároveň Coxovými procesy.

Věta 16. Nechť Φ je Poissonův shlukový proces takový, že Ψ_x jsou konečné Poissonovy bodové procesy s mírou intenzity Λ_x . Předpokládejme, že $\Lambda(B) = \sum_{X \in \Phi_p} \Lambda_X(B) < \infty$ s.j. pro každé $B \in \mathcal{B}_0^d$. Potom Φ je Coxův proces s řídicí mírou Λ .

Důkaz: Pro $B \in \mathcal{B}_0^d$ je

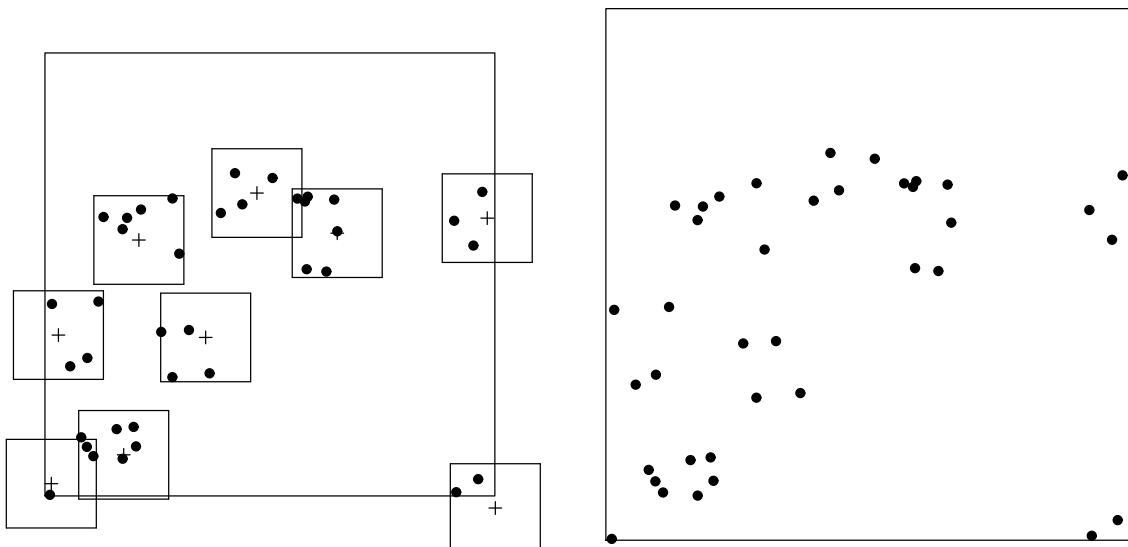
$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\Phi(B) = 0) &= \mathbb{E}[\mathbb{P}(\Phi(B) = 0 \mid \Phi_p)] = \mathbb{E}[\mathbb{P}(\bigcap_{X \in \Phi_p} [\Psi_X(B) = 0] \mid \Phi_p)] \\ &= \mathbb{E}[\prod_{X \in \Phi_p} \mathbb{P}(\Psi_X(B) = 0 \mid \Phi_p)] = \mathbb{E}[\prod_{X \in \Phi_p} e^{-\Lambda_X(B)}] \\ &= \mathbb{E} \exp\left\{-\sum_{X \in \Phi_p} \Lambda_X(B)\right\} = \mathbb{E} e^{-\Lambda(B)}, \end{aligned}$$

což jsou prázdne pravděpodobnosti Coxova procesu. Věta tak plyne z věty 2. □

Definice 21. Mějme pevně danu pravděpodobnostní hustotu p na \mathbb{R}^d . Nechť Φ je Poissonův shlukový proces takový, že

- $\Psi_x(\mathbb{R}^d), x \in \mathbb{R}^d$, jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny,
- $\Psi_x = \bigcup_{i=1}^{\Psi_x(\mathbb{R}^d)} Y_i$, kde Y_i jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné vektory s hustotou $p(\cdot - x)$, tj. body centrovaných procesů $\Psi_x - x$ jsou nezávislé stejně rozdělené s hustotou p .

Pak Φ se nazývá *Neymanův-Scottův proces (Neyman-Scott process)*. Pokud navíc $\Psi_x(\mathbb{R}^d)$ mají Poissonovo rozdělení s intenzitou λ_c , jde o *Neymanův-Scottův Poissonův proces*. V tom případě je Ψ_x Poissonův proces s funkcí intenzity $\lambda_c p(\cdot - x)$.



Obrázek 9. Realizace Neymanova-Scottové bodového procesu ve čtvercovém okně jednotkového obsahu. Intenzita rodičovského bodového procesu je 10 (body znázorněny na levém obrázku křížky), počty bodů dceřinných procesů mají binomické rozdělení s parametry 10 a 1/2 a body dceřinných procesů (znázorněny puntíky) jsou rovnoměrně rozděleny ve čtverci o straně délky 0,2 (vyznačen na levém obrázku). Na pravém obrázku je samotná realizace procesu (pouze body dceřinných procesů).

Na obrázku 9 je vlevo vysvětlen vznik Neymanova-Scottové bodového procesu. Rodičovský proces Φ_p je Poissonův bodový proces (body jsou znázorněny křížky), počty bodů dceřinných procesů jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny s binomickým rozdělením se střední hodnotou $\mathbb{E}\Psi_X(\mathbb{R}^d) = 5$ a body každého dceřinného procesu jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné vektory s rovnoměrným rozdělením ve čtverci se středem v bodě rodičovského procesu a délkou strany 0,2, tj. hustota p má tvar $p(x) = 1/0,2^2$ pro $x \in [-0,1; 0,1]^2$. Vzhledem k tomu, že se nosiče hustot pro jednotlivé shluky (dceřinné procesy) protínají, nelze z výsledné realizace shlukového procesu rozlišit, který bod náleží kterému dceřinnému procesu. Rovněž si můžeme povšimnout, že dceřinné body v okně pozorování mohou pocházet od rodičovských bodů, které leží mimo okno. Výsledná realizace Neymanova-Scottové procesu je vykreslena na obrázku 9 vpravo. V té už nevystupují body rodičovského procesu. V knihovně `spatstat` se dá generovat Neymanův-Scottové bodový proces pomocí funkce `rNeymanScott`. Dva příklady Neymanova-Scottové Poissonova procesu jsou na obrázku 10.

Věta 17. *Mějme Neymanův-Scottové Poissonův proces Φ takový, že Φ_p je stacionární Poissonův bodový proces s intenzitou λ_p , pak Φ je stacionární proces s intenzitou $\lambda = \lambda_p \lambda_c$ a párovou korelační funkcí $g(x) = 1 + \frac{h(x)}{\lambda_p}$, kde $h(x) = \int p(y)p(y-x) dy$ je hustota $X_1 - X_2$, kde X_1 a X_2 jsou dva dceřinné body. Pokud je rozdělení dcer radiálně symetrické (tj. $p(x) = p(\|x\|) = p(r)$), tak Φ je izotropní a $g(x) = g(\|x\|) = g(r)$. Důkaz: Podle věty 16 je Φ Coxův proces s řídicí mírou $\Lambda(B) = \sum_{X \in \Phi_p} \Lambda_X(B)$, kde Λ_X má hustotu $\lambda_c p(\cdot - X)$ vzhledem k Lebesgueově míře. Míra intenzity procesu Φ je podle věty 7*

$$\mathbb{E}\Lambda(B) = \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi_p} \Lambda_X(B) = \lambda_p \int_{\mathbb{R}^d} \Lambda_x(B) dx = \lambda_p \int_{\mathbb{R}^d} \int_B \lambda_c p(y-x) dy dx = \lambda_p \lambda_c |B| = \lambda |B|.$$

Podobně užitím věty 7 a vlastností Poissonova procesu dostaneme pro faktoriální momentovou míru druhého řádu procesu Φ

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\Lambda(B_1)\Lambda(B_2) &= \mathbb{E} \sum_{X, Y \in \Phi_p} \Lambda_X(B_1)\Lambda_Y(B_2) = \mathbb{E} \sum_{X, Y \in \Phi_p}^{\neq} \Lambda_X(B_1)\Lambda_Y(B_2) + \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi_p} \Lambda_X(B_1)\Lambda_X(B_2) \\ &= \lambda_p^2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \Lambda_x(B_1)\Lambda_y(B_2) dy dx + \lambda_p \int_{\mathbb{R}^d} \Lambda_x(B_1)\Lambda_x(B_2) dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda_p^2 \lambda_c^2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{B_1} \int_{B_2} p(u-x)p(v-y) dv du dy dx \\
&\quad + \lambda_p \lambda_c^2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{B_1} \int_{B_2} p(u-x)p(v-x) dv du dx \\
&= \lambda^2 \cdot |B_1| \cdot |B_2| + \lambda \lambda_c \int_{B_1} \int_{B_2} \int_{\mathbb{R}^d} p(u-x)p(v-x) dx dv du.
\end{aligned}$$

Odtud vidíme, že součinnová hustota druhého řádu je

$$\lambda^{(2)}(u, v) = \lambda^2 + \lambda \lambda_c \int_{\mathbb{R}^d} p(u-x)p(v-x) dx,$$

a proto párová korelační funkce má tvar

$$g(u, v) = 1 + \frac{1}{\lambda_p} \int_{\mathbb{R}^d} p(u-x)p(v-x) dx.$$

Provedeme-li substituci $y = u - x$, zjistíme, že

$$g(u, v) = 1 + \frac{1}{\lambda_p} \int_{\mathbb{R}^d} p(y)p(v-u+y) dy$$

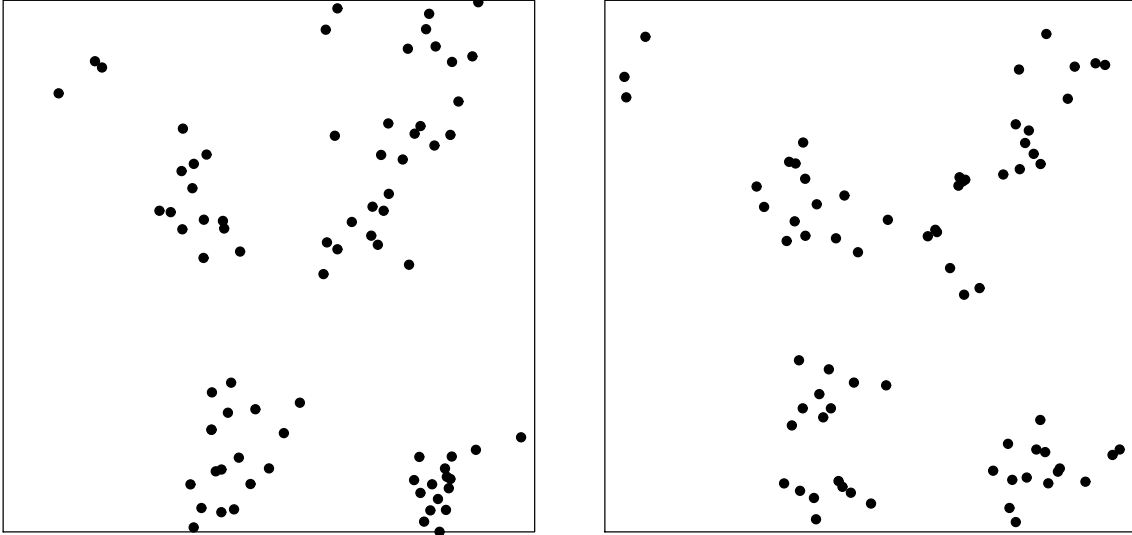
je funkcí $u - v$: $g(u, v) = g(u - v, 0) = g(u - v)$.

□

Všimněme si, že pro Neymanovy-Scottovy Poissonovy procesy je párová korelační funkce vždy ale-
spoň 1. Nejznámějšími příklady těchto procesů s radiálně symetrickým rozdělením bodů shluků jsou:

- Thomasův proces*: p je hustota d -rozměrného normálního rozdělení $N(0, \sigma^2 I)$ s nulovou střední hodnotou a varianční maticí, která je násobkem jednotkové matice,
- Matérnův shlukový proces*: p je hustota rovnoměrného rozdělení na kouli $b(o, R)$.

Knihovna `spatstat` umožňuje generování těchto modelů pomocí funkcí `rThomas` a `rMatClust`. Příklady konkrétních realizací naleznete na obrázku 10.



Obrázek 10. Realizace Thomasova procesu (vlevo) a Matérnova shlukového procesu (vpravo) ve čtvercovém okně jednotkového obsahu. Rodičovský bodový proces je v obou případech stejný a jeho intenzita je 10. Počty bodů ve shluku mají Poissonovo rozdělení se střední hodnotou 5 a jsou v obou případech pro každý bod rodičovského procesu stejné. Liší se pouze rozdělení bodů v jednotlivých dceřinných procesech. U Thomasova procesu jde o normální rozdělení se směrodatnou odchylkou $\sigma = 0,05$, zatímco u Matérnova shlukového procesu jsou body shluku rovnoměrně rozděleny na kouli o poloměru $R = 0,1$.

Procesy s pevným jádrem

Celá řada modelů vzniká tak, že z daného bodového procesu vypustíme některé jeho body. Takovéto operaci se říká *ztenčení* (*thinning*). Nejprve uvažujme případ tzv. *nezávislého ztenčení* (*independent thinning*), kdy odebrání daného bodu nezávisí na ostatních bodech.

Definice 22. Nechť Φ je bodový proces, $p : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$ je měřitelná funkce a $\{U(x) : x \in \mathbb{R}^d\}$ jsou nezávislé náhodné veličiny s rovnoměrným rozdělením na $(0, 1)$ a nezávislé na Φ . Bodový proces $\Phi_{\text{th}} = \{X \in \Phi : U(X) < p(X)\}$ se nazývá *ztenčený bodový proces* (*thinned point process*).

Z Poissonova bodového procesu dostaneme nezávislým ztenčením opět Poissonův bodový proces.

Věta 18. Pro Poissonův bodový proces Φ s mírou intenzity Λ je příslušný ztenčený proces Φ_{th} Poissonův bodový proces s mírou intenzity

$$\Lambda_{\text{th}}(B) = \int_B p(y) \Lambda(dy), \quad B \in \mathcal{B}^d.$$

Důkaz: Spočteme prázdné pravděpodobnosti ztenčeného procesu Φ_{th} a ukážeme, že se rovnají prázdným pravděpodobnostem Poissonova bodového procesu s mírou intenzity Λ_{th} . Důkaz tím bude hotov díky větě 2. Pro $B \in \mathcal{B}_0^d$ je

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\Phi_{\text{th}}(B) = 0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}(\Phi(B) = n) \mathbb{P}(\Phi_{\text{th}}(B) = 0 \mid \Phi(B) = n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Lambda(B)^n}{n!} e^{-\Lambda(B)} \prod_{X \in \Phi \cap B} \mathbb{P}(U(X) \geq p(X) \mid \Phi(B) = n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Lambda(B)^n}{n!} e^{-\Lambda(B)} \left[\int_0^1 \int_B \mathbf{1}_{[u \geq p(x)]} \frac{\Lambda(dx)}{\Lambda(B)} du \right]^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\Lambda(B)}}{n!} \left[\int_B (1 - p(x)) \Lambda(dx) \right]^n \\ &= e^{-\Lambda(B)} \exp \left\{ \int_B (1 - p(x)) \Lambda(dx) \right\} = e^{-\int_B p(x) \Lambda(dx)}. \end{aligned}$$

K vyjádření podmíněné pravděpodobnosti ve prvním řádku jsme použili větu 5, která říká, že podmíněně při $\Phi(B) = n$ jsou body procesu nezávislé. □

U procesů s pevným jádrem nejsou žádné dva body procesu od sebe blíže než o danou vzdálenost $r > 0$. Jedna z možností, jak takový proces zkonstruovat, je pomocí ztenčení. V definici následujících dvou procesů s pevným jádrem se využívá tzv. *závislé ztenčení* (*dependent thinning*).

Definice 23. Mějme dáno $r > 0$ a buď Φ homogenní Poissonův bodový proces. Bodový proces

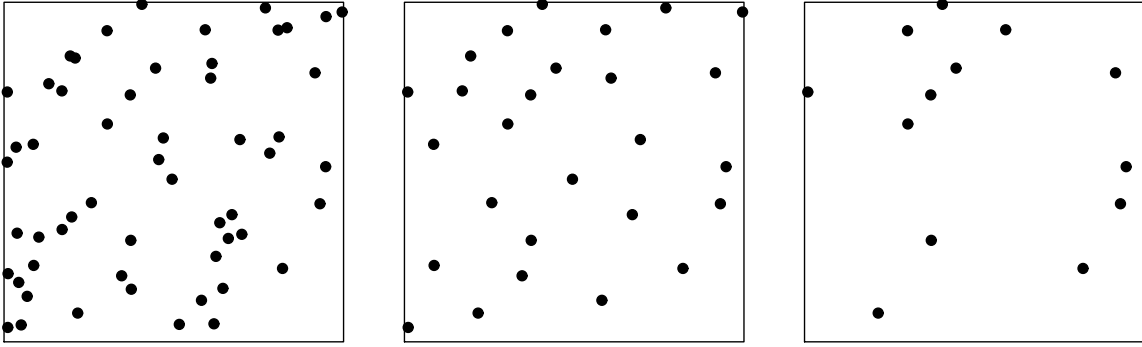
$$\Phi_I = \{X \in \Phi : \|X - Y\| > r \forall Y \in \Phi, Y \neq X\}$$

se nazývá *Matérnovův proces s pevným jádrem typu I* (*Matérn hard-core process I*). Bodový proces

$$\Phi_{II} = \{X \in \Phi : U(X) < U(Y) \forall Y \in \Phi \cap b(X, r) \setminus \{X\}\},$$

kde $\{U(x) : x \in \mathbb{R}^d\}$ jsou navzájem nezávislé náhodné veličiny, nezávislé na Φ a rovnoměrně rozdělené na intervalu $(0, 1)$, se nazývá *Matérnovův proces s pevným jádrem typu II* (*Matérn hard-core process II*).

Pro generování Matérnových bodových procesů s pevným jádrem lze v balíčku `spatstat` použít funkce `rMaternI` a `rMaternII`. Na obrázku 11 je zobrazen homogenní Poissonův bodový proces, jehož ztenčením se dostanou Matérnovy procesy s pevným jádrem typu I a II. V případě procesu typu I se díky přísnější podmínce na ztenčování získá menší počet bodů než u typu II.



Obrázek 11. Vlevo je znázorněna realizace homogenního Poissonova bodového procesu s intenzitou 50 v rovinném okně jednotkového obsahu. Z této konfigurace bodů je odvozena realizace Matérnova procesu s pevným jádrem typu II (uprostřed) a typu I (vpravo), pevné jádro je zvoleno jako $r = 0,1$.

Věta 19. *Nechť Φ je homogenní Poissonův bodový proces s intenzitou λ . Bodové procesy Φ_I a Φ_{II} z definice 23 jsou stacionární a jejich intenzity jsou*

$$\lambda_I = \lambda e^{-\lambda \omega_d r^d} \quad \text{a} \quad \lambda_{II} = \frac{1 - e^{-\lambda \omega_d r^d}}{\omega_d r^d}.$$

Důkaz: Stacionarita plyne z konstrukce procesů a intenzita je dána součinem λ a pravděpodobnosti zachování bodu v daném procesu s pevným jádrem. Pro typ I je pravděpodobnost zachování bodu zřejmě rovna

$$\mathbb{P}(\Phi(b(o, r)) = 0) = e^{-\lambda |b(o, r)|} = e^{-\lambda \omega_d r^d}.$$

Pro typ II je výpočet pravděpodobnosti zachování bodu o něco složitější. Jev, že bod X bude zachován ve Φ_{II} , podmíníme hodnotou náhodného čísla $U(X)$ přiřazeného bodu X . Potom hledaná pravděpodobnost je

$$\int_0^1 \mathbb{P}(X \in \Phi_{II} \mid U(X) = u) du = \int_0^1 \mathbb{P}(\Phi_{\text{th}}^{(u)}(b(X, r)) = 0) du,$$

kde $\Phi_{\text{th}}^{(u)} = \{Y \in \Phi : U(Y) < u\}$ je nezávisle ztenčený Poissonův bodový proces. Podle věty 18 tak dostaneme

$$\int_0^1 \mathbb{P}(\Phi_{\text{th}}^{(u)}(b(X, r)) = 0) du = \int_0^1 e^{-\lambda u |b(o, r)|} du = \frac{1 - e^{-\lambda \omega_d r^d}}{\lambda \omega_d r^d}.$$

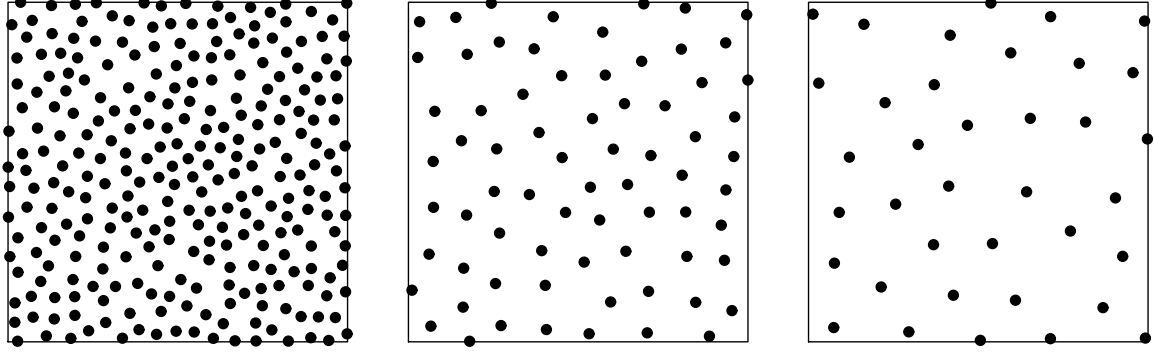
□

Jiná možnost, jak konstruovat procesy s pevným jádrem, je založena na sekvenčním postupu.

Definice 24. Je dáno $r > 0$ a $B \in \mathcal{B}_0^d$. Proces s jednoduchou sekvenční překážkou (*simple sequential inhibition (SSI) process*) v množině B se konstruuje následovně:

- (i) zvolme $X_1 \in B$ rovnoměrně náhodně,
- (ii) je-li $k - 1$ bodů zvoleno, zvolme X_k rovnoměrně náhodně v $B \setminus \cup_{i=1}^{k-1} b(X_i, r)$,
- (iii) konstrukce končí v n krocích, jestliže $B \subseteq \cup_{i=1}^n b(X_i, r)$.

Poznámka: Množiny $B \setminus \cup_{i=1}^{k-1} b(X_i, r)$ mohou mít komplikovaný geometrický tvar, proto se v praxi často používá zamítací metoda. Bod X_k se generuje rovnoměrně náhodně v množině B a pokud je blíž než některý z již zvolených bodů, zamítne se a generuje se nové X_k . Tato procedura se opakuje, dokud X_k nepadne do $B \setminus \cup_{i=1}^{k-1} b(X_i, r)$. Algoritmus se zastaví, pokud došlo k předem stanovenému počtu zamítnutých iterací. Toto je i způsob, jak spatstat generuje realizaci procesu s jednoduchou sekvenční překážkou pomocí funkce rSSI. Také se dá algoritmus zastavit, pokud je již v okně umístěn předem daný počet bodů. Tři nasimulované realizace procesu s jednoduchou sekvenční překážkou pro různé volby r jsou na obrázku 12.



Obrázek 12. Tři realizace procesu s jednoduchou sekvenční překážkou v jednotkovém čtverci pro $r = 0,05$ (vlevo), $r = 0,1$ (uprostřed) a $r = 0,15$ (vpravo).

Proces s jednoduchou sekvenční překážkou je příkladem konečného bodového procesu. V další podkapitole se budeme zabývat konečnými bodovými procesy s hustotou vzhledem k rozdělení Poissonova procesu.

2.7 Konečné bodové procesy s hustotou

V této podkapitole budeme pracovat s konečnými bodovými procesy. Systém konečných bodových konfigurací označme

$$\mathcal{N}_f = \{\varphi \in \mathcal{N} : \varphi(\mathbb{R}^d) < \infty\}.$$

Mějme Poissonův bodový proces Φ_P s konečnou difúzní mírou intenzity Λ . Rozdělení konečného Poissonova bodového procesu lze vyjádřit následovně ($\mathcal{U} \in \mathfrak{N}$):

$$\begin{aligned} \Pi(\mathcal{U}) &= \mathbb{P}(\Phi_P \in \mathcal{U}) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}(\Phi_P(\mathbb{R}^d) = n) \mathbb{P}(\Phi_P \in \mathcal{U} \mid \Phi_P(\mathbb{R}^d) = n) \\ &= e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \left[\mathbf{1}_{\{\emptyset \in \mathcal{U}\}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Lambda(\mathbb{R}^d)^n}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_{\{x_1, \dots, x_n\} \in \mathcal{U}} \frac{\Lambda(dx_1)}{\Lambda(\mathbb{R}^d)} \cdots \frac{\Lambda(dx_n)}{\Lambda(\mathbb{R}^d)} \right] \\ &= e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \left[\mathbf{1}_{\{\emptyset \in \mathcal{U}\}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_{\{x_1, \dots, x_n\} \in \mathcal{U}} \Lambda(dx_1) \cdots \Lambda(dx_n) \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

Budeme vyšetřovat bodové procesy, jejichž rozdělení je absolutně spojitě vzhledem k Π . Pokud $p : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ je měřitelná funkce taková, že $\int_{\mathcal{N}_f} p(\varphi) \Pi(d\varphi) = 1$, můžeme uvažovat bodový proces Φ s hustotou p vzhledem k rozdělení Π , tj. platí

$$\mathbb{P}(\Phi \in \mathcal{U}) = \int_{\mathcal{U}} p(\varphi) \Pi(d\varphi) = \mathbb{E} p(\Phi_P) \mathbf{1}_{\{\Phi_P \in \mathcal{U}\}}, \quad \mathcal{U} \in \mathfrak{N}.$$

Díky (3) lze rozdělení bodového procesu Φ také přepsat jako

$$\mathbb{P}(\Phi \in \mathcal{U}) = e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \left[\mathbf{1}_{\{\emptyset \in \mathcal{U}\}} p(\emptyset) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_{\{x_1, \dots, x_n\} \in \mathcal{U}} p(\{x_1, \dots, x_n\}) \Lambda(dx_1) \cdots \Lambda(dx_n) \right].$$

Bodový proces Φ s hustotou p je konečný (díky podmínce $\Lambda(\mathbb{R}^d) < \infty$) a jednoduchý (díky tomu, že Λ je neatomická). Často se uvažuje případ, kdy Λ je restrikce Lebesgueovy míry na omezené množině $B \subseteq \mathbb{R}^d$, hustota p je potom vzhledem k rozdělení standardního Poissonova procesu na B (homogenní Poissonův proces s jednotkovou intenzitou na B). Povšimněme si, že pro libovolnou Π -integrovatelnou funkci h na \mathcal{N}_f platí $\mathbb{E} h(\Phi) = \mathbb{E} h(\Phi_P) p(\Phi_P)$.

Definice 25. Nechť Λ je konečná difúzní míra na \mathbb{R}^d . Řekneme, že měřitelná funkce $h : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ je *lokálně stabilní* (*locally stable*), jestliže existuje nezáporná měřitelná funkce $k : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^+$ taková, že $\int_{\mathbb{R}^d} k(x) \Lambda(dx) < \infty$ a pro každé $\varphi \in \mathcal{N}_f$ a každé $x \in \mathbb{R}^d$ platí $h(\varphi \cup \{x\}) \leq k(x) h(\varphi)$. Funkce h

je stabilní ve smyslu Ruelleho (Ruelle stable), jestliže existuje konstanta $c > 0$ a nezáporná funkce k splňující $\int_{\mathbb{R}^d} k(x) \Lambda(dx) < \infty$ tak, že $h(\varphi) \leq c \prod_{x \in \varphi} k(x)$ pro každé $\varphi \in \mathcal{N}_f$.

Definice 26. Nezáporná měřitelná funkce h na \mathcal{N}_f se nazývá *dědičná (hereditary)*, když pro každé $\varphi \in \mathcal{N}_f$ platí

$$h(\varphi) > 0 \Rightarrow h(\psi) > 0 \quad \forall \psi \subseteq \varphi.$$

Věta 20. Necht' $h : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ je měřitelná funkce a Π je rozdělení konečného Poissonova bodového procesu s mírou intenzity Λ .

- a) Je-li h lokálně stabilní, potom je stabilní ve smyslu Ruelleho.
- b) Je-li h stabilní ve smyslu Ruelleho, potom je Π -integrovatelná.
- c) Je-li h lokálně stabilní, potom je dědičná.

Důkaz: a) Položme $c = h(\emptyset)$. Tvrzení se lehce dokáže indukci podle $n = \varphi(\mathbb{R}^d)$. Pro $n = 0$ je zřejmé $h(\varphi) = c$. Pokud tvrzení platí pro n , pak $h(\varphi \cup \{x\}) \leq k(x)h(\varphi) \leq k(x)c \prod_{y \in \varphi} k(y) = c \prod_{y \in \varphi \cup \{x\}} k(y)$.

b) Označíme-li $K = \int_{\mathbb{R}^d} k(x) \Lambda(dx)$, pak

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{N}_f} h(\varphi) \Pi(d\varphi) &= e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \left[h(\emptyset) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} h(\{x_1, \dots, x_n\}) \Lambda(dx_1) \cdots \Lambda(dx_n) \right] \\ &\leq e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \left[c + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} ck(x_1) \cdots k(x_n) \Lambda(dx_1) \cdots \Lambda(dx_n) \right] \\ &= ce^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} K^n = ce^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} e^K < \infty. \end{aligned}$$

První rovnost plyne z (3) standardním postupem teorie míry.

c) Z definice lokální stability plyne, že $h(\varphi \cup \{x\}) > 0 \Rightarrow h(\varphi) > 0$. □

Definice 27. Pro bodový proces Φ s hustotou p je *Papangelouova podmíněná intenzita (Papangelou conditional intensity)* definována jako

$$\lambda^*(x, \varphi) = \frac{p(\varphi \cup \{x\})}{p(\varphi)}, \quad x \in \mathbb{R}^d, \varphi \in \mathcal{N}_f : p(\varphi) > 0.$$

Poznámka: Pro dědičné hustoty p lze lokální stabilitu ekvivalentně definovat jako $\lambda^*(x, \varphi) \leq k(x)$ pro každé $x \in \mathbb{R}^d$ a $\varphi \in \mathcal{N}_f$ s $p(\varphi) > 0$.

Definice 28. V mnoha aplikacích se vyskytují *bodové procesy s párovými interakcemi (pairwise interaction point processes)*, které mají hustotu vzhledem k rozdělení Poissonova procesu tvaru

$$p(\varphi) = \alpha \prod_{x \in \varphi} g(\{x\}) \prod_{\{x, y\} \subseteq \varphi} g(\{x, y\}), \quad (4)$$

kde g je tzv. *interakční funkce (interaction function)*, tedy nezáporná funkce taková, že pravá strana v (4) je Π -integrovatelná. Pokud $g(\{x\}) = \beta$ je konstanta a $g(\{x, y\}) = \theta(\|x - y\|)$ je invariantní vůči posunutím a rotacím, mluvíme o *homogenním* procesu s párovými interakcemi.

Papangelouova podmíněná intenzita bodových procesů s párovými interakcemi má tvar

$$\lambda^*(x, \varphi) = g(\{x\}) \prod_{y \in \varphi} g(\{x, y\}).$$

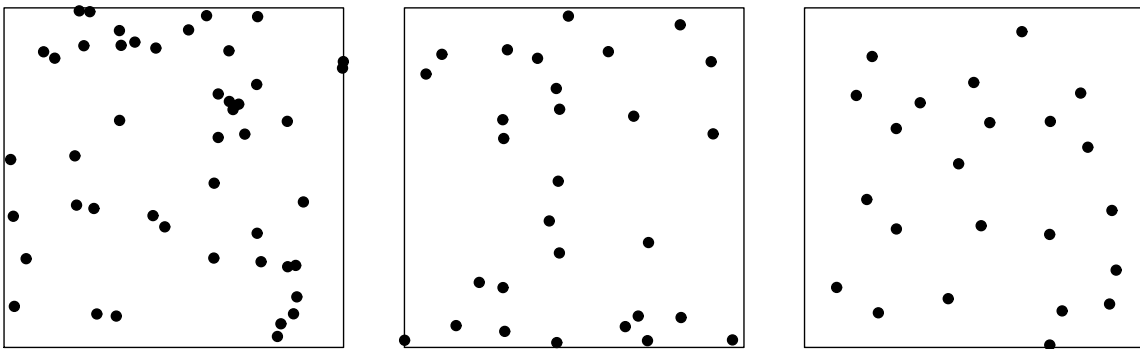
Funkce (4) je zřejmě dědičná a pokud $\int_{\mathbb{R}^d} g(\{x\}) \Lambda(dx) < \infty$ a $g(\{x, y\}) \leq 1$, tak je i lokálně stabilní (neboť $\lambda^*(x, \varphi) \leq g(\{x\})$).

Pokud Λ je restrikce Lebesgueovy míry na omezené množině, $g(\{x\}) = \lambda(x)$ a $g(\{x, y\}) = 1$, dostaneme Poissonův proces s funkcí intenzity λ (viz cvičení).

Nejznámějším netriviálním příkladem konečného homogenního bodového procesu s párovými interakcemi je Straussův proces: $\theta(r) = \gamma \mathbf{1}_{[r \leq R]}$.

Definice 29. Mějme reálné parametry $\beta > 0$, $0 \leq \gamma \leq 1$ a $R > 0$. *Straussův proces (Strauss process)* je bodový proces Φ s hustotou $p(\varphi) = \alpha \beta^{\varphi(\mathbb{R}^d)} \gamma^{S_R(\varphi)}$, kde $S_R(\varphi) = \sum_{\{x,y\} \subseteq \varphi} \mathbf{1}_{[\|x-y\| \leq R]}$ je počet dvojic různých bodů konfigurace φ , jejichž vzdálenost je nejvýše R .

Normující konstanta $\alpha = \left(\int_{\mathcal{N}_f} \beta^{\varphi(\mathbb{R}^d)} \gamma^{S_R(\varphi)} \Pi(d\varphi) \right)^{-1}$ je většinou neznámá. Lze ji spočítat například pro limitní případ $\gamma = 1$, který odpovídá Poissonovu procesu s mírou intenzity $\beta\Lambda$ (viz cvičení). Příklad $\gamma = 0$ znamená, že pokud má být $p(\varphi) > 0$, musí být $S_R(\varphi) = 0$ (pokládáme $0^0 = 1$) a výsledkem je bodový proces s pevným jádrem, tj. žádné dva body procesu nemůžou být blíže než R . Na obrázku 13 jsou nasimulované realizace Straussova procesu pro limitní hodnoty $\gamma = 1$ (vlevo) a $\gamma = 0$ (vpravo) a také pro $\gamma = 0,5$ (uprostřed), kde existují dvojice bodů ve vzdálenosti menší než R , ale je tomu tak méně často než u Poissonova procesu (případ $\gamma = 1$). V knihovně `spatstat` lze pro generování Straussova procesu použít funkci `rStrauss`.



Obrázek 13. Tři realizace Straussova procesu ve čtvercovém okně jednotkového obsahu. Volba parametru je $\beta = 50$, $R = 0,1$ a $\gamma = 1$ (vlevo), $\gamma = 0,5$ (uprostřed) a $\gamma = 0$ (vpravo).

Strauss nazval tento proces modelem shlukování [14], to by odpovídalo případu $\gamma > 1$, pro který však $p(\varphi)$ není Π -integrovatelná (viz cvičení). Pro $0 \leq \gamma \leq 1$ plyne Π -integrovatelnost z lokální stability. Straussův proces je tak modelem pro odpudivé interakce mezi body.

Pokud bychom však uvažovali podmíněný Straussův proces (podmíněně při daném počtu $\varphi(\mathbb{R}^d)$ bodů procesu), hustota $p(\varphi)$ už nezávisí na parametru β a je Π -integrovatelná pro všechna $\gamma \geq 0$. Tedy pro $\gamma > 1$ můžeme dostat model pro shlukování bodů, který ovšem není moc vhodný, v praxi se používají lepší modely, např. saturační Geyerův proces (viz cvičení).

Procesy s párovou interakcí jsou speciálním případem obecnější třídy procesů, tzv. markovských bodových procesů.

Markovské bodové procesy

Definice 30. Buď \sim reflexivní a symetrická relace na $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$. Pokud $x \sim y$, říkáme, že $x, y \in \mathbb{R}^d$ jsou *sousedé (neighbours)*. Pro $B \in \mathcal{B}_0^d$ definujeme *sousedství (neighbourhood)* B jako $\partial B = \{x \in \mathbb{R}^d : \exists y \in B, x \sim y\}$.

Nejpoužívanějším příkladem relace sousedství je $x \sim y \Leftrightarrow \|x - y\| \leq R$ pro dané $R > 0$ (tzv. *R-sousedství*).

Definice 31. Měřitelná funkce $h : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ splňuje *lokální markovskou vlastnost (local Markov property)* vzhledem k \sim , pokud pro každé $\varphi \in \mathcal{N}_f$ takové, že $h(\varphi) > 0$ a pro každé $x \notin \varphi$ závisí $h(\varphi \cup \{x\})/h(\varphi)$ pouze na x a $\varphi \cap \partial\{x\}$. Řekneme, že h je *markovská funkce (Markov function)* vzhledem k relaci \sim , jestliže je dědičná a splňuje lokální markovskou vlastnost.

Definice 32. Nechť Φ je konečný bodový proces s hustotou p vzhledem k rozdělení Poissonova procesu s konečnou mírou intenzity Λ . Bodový proces Φ je *markovský (Markov)*, jestliže p je markovská.

Poznámka: Papangelouova podmíněná intenzita $\lambda^*(x, \varphi)$ závisí pouze na x a $\varphi \cap \partial\{x\}$.

Definice 33. Množina $A \subseteq \mathbb{R}^d$ je *klika (clique)* vzhledem k \sim , jestliže $x \sim y$ pro každé $x, y \in A$. Řekneme, že nezáporná měřitelná funkce g je *interakční funkce (interaction function)* vzhledem k \sim , jestliže $g(\varphi) = 1$ pro každé $\varphi \in \mathcal{N}_f$, které není klika.

Věta 21. (*Hammersleyho-Cliffordova-Ripleyho-Kellyho věta*) Měřitelná funkce $h : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ je markovská právě tehdy, když existuje interakční funkce $g : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ taková, že

$$h(\varphi) = \prod_{\psi \subseteq \varphi} g(\psi), \quad \varphi \in \mathcal{N}_f. \quad (5)$$

Důkaz: Jedna implikace je zřejmá. Funkce h dána vztahem (5) je dědičná a splňuje lokální markovskou vlastnost.

Předpokládejme, že h je markovská a definujme g indukci: $g(\emptyset) = h(\emptyset)$; $g(\varphi) = 1$, když φ není klika; a

$$g(\varphi) = \frac{h(\varphi)}{\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi)},$$

když $\varphi \neq \emptyset$ je klika. Je-li $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) = 0$, potom existuje $\psi \subseteq \varphi$ tak, že $g(\psi) = 0$, a proto $h(\psi) = 0$, což z dědičnosti implikuje $h(\varphi) = 0$. V tom případě definujeme $g(\varphi) = 1$ (neboli pokládáme $0/0 = 1$). Funkce g je korektně definována a je to interakční funkce. Abychom ukázali, že platí (5) rozlišíme tři případy.

1. φ je klika: $h(\emptyset) = g(\emptyset)$ a $h(\varphi) = \prod_{\psi \subseteq \varphi} g(\psi)$ pro $\varphi \neq \emptyset$.
2. $h(\varphi) = 0$ a φ není klika: existují $x, y \in \varphi$ tak, že $x \not\sim y$. Je-li $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) = 0$, pak $\prod_{\psi \subseteq \varphi} g(\psi) = 0 = h(\varphi)$. Sporem ukážeme, že nemůže být $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) > 0$. Předpokládejme proto, že $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) > 0$. Speciálně to znamená, že $g(\{z\}) > 0$ pro každé $z \in \varphi$, a tudíž také $h(\{z\}) > 0$ pro každé $z \in \varphi$. Můžeme tak najít $\psi \subseteq \varphi$ tak, že $x, y \in \psi$, $h(\psi \setminus \{x\}) > 0$ a $h(\psi) = 0$. Z lokální markovské vlastnosti víme, že $\frac{h(\psi)}{h(\psi \setminus \{x\})}$ nezávisí na y , a tak

$$0 = \frac{h(\psi)}{h(\psi \setminus \{x\})} = \frac{h(\psi \setminus \{y\})}{h(\psi \setminus \{x, y\})},$$

neboli $h(\psi \setminus \{y\}) = 0$. Je-li $\psi \setminus \{y\}$ klika, je $g(\psi \setminus \{y\}) = 0$, což je spor. Pokud $\psi \setminus \{y\}$ není klika, najdeme $\tilde{x}, \tilde{y} \in \psi \setminus \{y\}$ takové, že $\tilde{x} \not\sim \tilde{y}$ a celou úvahu můžeme opakovat. Takto postupujeme, dokud nedojdeme ke klice. Tím dostaneme spor s $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) > 0$.

3. $h(\varphi) > 0$ a φ není klika: existují $x, y \in \varphi$ tak, že $x \not\sim y$. Označme $\psi = \varphi \setminus \{x, y\}$. Z dědičnosti plyne, že $h(\psi) > 0$. Už víme, že vztah (5) platí pro kliky. Nyní ho ukážeme obecně indukci podle $n = \varphi(\mathbb{R}^d)$: Pro $n = 0$ je $h(\emptyset) = g(\emptyset)$ z definice, pro $n = 1$ je $h(\{z\}) = g(\emptyset)g(\{z\})$ z definice (pro tyto dva případy je φ klika). Předpokládejme, že vztah platí pro $n - 1$ a ukážeme ho pro n . Z lokální markovské vlastnosti dostaneme

$$h(\varphi) = \frac{h(\psi \cup \{x, y\})}{h(\psi \cup \{x\})} h(\psi \cup \{x\}) = \frac{h(\psi \cup \{y\})}{h(\psi)} h(\psi \cup \{x\}).$$

Nyní využijeme indukčního předpokladu a toho, že $g(\chi) = 1$, pokud $\{x, y\} \subseteq \chi$ (neboť $x \not\sim y$):

$$h(\varphi) = \frac{\prod_{\chi \subseteq \psi \cup \{y\}} g(\chi) \prod_{\chi \subseteq \psi \cup \{x\}} g(\chi)}{\prod_{\chi \subseteq \psi} g(\chi)} = \prod_{\chi \subseteq \psi \cup \{x, y\}} g(\chi).$$

□

Příkladem markovského bodového procesu vzhledem k R -sousedství je Straussův proces z definice 29. Papangelouova podmíněná intenzita $\lambda^*(x, \varphi) = \beta \gamma^{\varphi(\partial\{x\})}$ závisí pouze na x a $\varphi \cap \partial\{x\}$. Interakční funkce z věty 21 je $g(\emptyset) = \alpha$; $g(\{x\}) = \beta$; $g(\{x, y\}) = \gamma$, když $\|x - y\| \leq R$; $g(\psi) = 1$ jinak.

Podle věty 21 má každý markovský bodový proces hustotu

$$p(\varphi) = \prod_{\psi \subseteq \varphi} g(\psi) = g(\emptyset) \exp \left\{ \sum_{\psi \subseteq \varphi, \psi \neq \emptyset} \log g(\psi) \right\} = \frac{\exp\{-U(\varphi)\}}{Z}.$$

Ve statistické fyzice se používá označení *Gibbsův bodový proces* (*Gibbs point process*) s *energií* (*energy*)

$$U(\varphi) = - \sum_{\psi \subseteq \varphi, \psi \neq \emptyset} \log g(\psi)$$

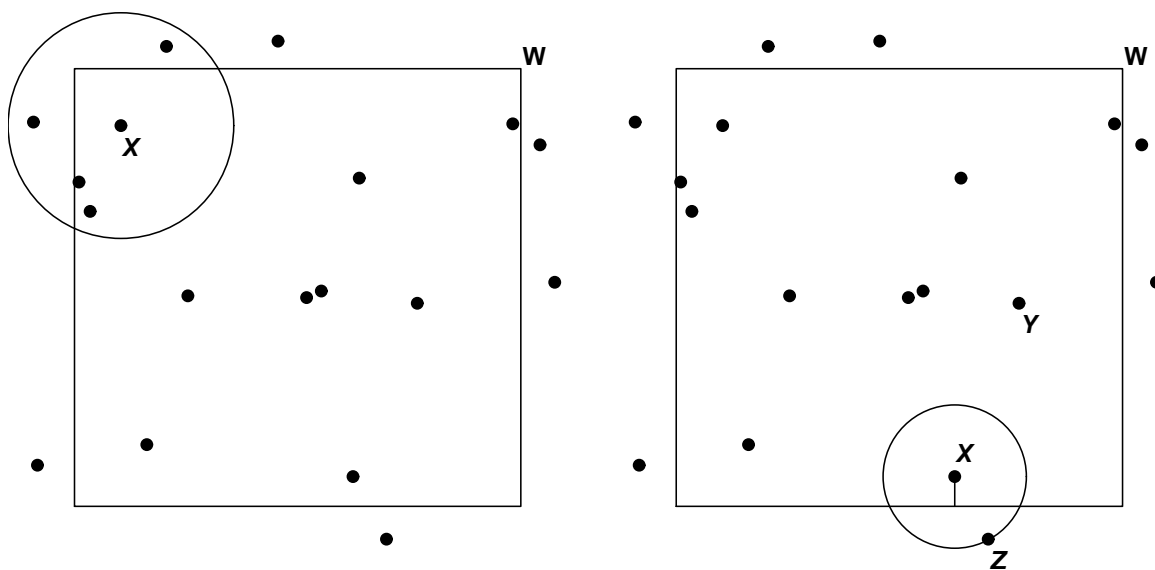
a *partiční funkci* (*partition function*) $Z = 1/g(\emptyset)$.

2.8 Statistika bodových procesů

Předpokládejme, že máme realizaci bodového procesu Φ na množině $W \in \mathcal{B}_0^d$, tzv. *okno pozorování* (*observation window, sampling window*). V podkapitole jsme viděli různé modely nekonečných bodových procesů, okno W v tom případě představuje omezenou oblast, ve které je realizace procesu pozorována. Cílem je odhadnout charakteristiky (definované v podkapitole 2.5) procesu Φ na základě dané realizace. Uvedeme přehled základních odhadů, které jsou vesměs implementovány v balíčku `spatstat`. V literatuře je možno najít i jiné složitější metody. Více podrobností a pokročilejší statistické postupy (maximální věrohodnost, parametrické fitování modelu, diagnostika a testování hypotéz) budou na přednášce *Prostorové modelování, prostorová statistika 2*.

Okrajové efekty

Největší problém při odhadování číselných a funkcionálních popisných charakteristik hrají tzv. *okrajové efekty* (*edge effects*), které jsou způsobeny tím, že bodový proces pozorujeme v omezeném okně. Například odhad K -funkce bychom mohli založit na počtech bodů v koulích se středem v bodě procesu a poloměru r . Pokud je ovšem vzdálenost bodu procesu od hranice okna menší než r , tak tento počet z dat nezjistíme. Situace je znázorněna na obrázku 14 vlevo – skutečný počet v kouli $b(X, r)$ je 5, ale z pozorování v okně W vidíme pouze tři body. Jako jiný příklad uvedme situaci při odhadu G -funkce, kdy hledáme nejbližšího souseda bodu X procesu. Z informace, kterou máme z okna W , bychom na obrázku 14 vpravo za nejbližšího souseda bodu X označili bod Y . Ve skutečnosti je však nejbližším sousedem bodu X bod Z , který leží mimo okno W . Je tedy vidět, že zanedbáním okrajových efektů můžeme dostat zkreslené závěry o charakteristikách procesu.



Obrázek 14. Ilustrace okrajových efektů v případě odhadování K -funkce (vlevo) a G -funkce (vpravo).

Odhad funkce intenzity

Nechť Φ je stacionární bodový proces s intenzitou λ . Přímo z definice plyne, že

$$\hat{\lambda} = \frac{\Phi(W)}{|W|}$$

je nestranný odhad λ . Pokud Φ je homogenní Poissonův proces, tak $\hat{\lambda}$ je dokonce maximálně věrohodný odhad. Věrohodnostní funkce má totiž tvar (viz cvičení)

$$L(\lambda, \varphi) = \lambda^{\varphi(W)} e^{(1-\lambda)|W|}$$

a lehce se zjistí, že nabývá maxima pro $\lambda = \varphi(W)/|W|$.

Pro nestacionární bodové procesy se používá *jádrový (kernel) neparametrický odhad funkce intenzity (density.ppp)*

$$\hat{\lambda}(x) = c_{W,b}(x) \sum_{Y \in \Phi \cap W} k_b(x - Y), \quad x \in W,$$

kde k_b je jádrová funkce se *šířkou pásma (bandwidth)* $b > 0$, tj. $k_b(x) = \frac{k(x/b)}{b^d}$, kde k je nějaká pravděpodobnostní hustota, a $c_{W,b}(x)$ je *korekce na okrajové efekty (edge correction factor)*. Odhad $\hat{\lambda}(x)$ je obvykle citlivý na volbu šířky pásma, zatímco volba jádrové funkce není tak důležitá. Pro malé hodnoty b je odhad příliš koncentrován kolem bodů procesu, pro velké hodnoty b dochází k velkému vychlazení. Mezi nejobvyklejší volby funkce k patří hustota rovnoměrného rozdělení na jednotkové kouli nebo hustota d -rozměrného normálního rozdělení. Často se také volí k jako součin jednorozměrných hustot: $k(x) = k_1(x_1) \cdots k_d(x_d)$ pro $x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$. Oblíbeným příkladem jednorozměrné jádrové funkce je *Epanečnikovovo jádro*:

$$e(u) = \frac{3}{4}(1 - u^2), \quad u \in [-1, 1].$$

Pro nestacionární Poissonův proces je možné opět explicitně vyjádřit věrohodnostní funkci (viz cvičení). Existuje několik postupů, jak řešit úlohu nalezení maximálně věrohodného odhadu.

Ve zbytku podkapitoly budeme předpokládat, že Φ je stacionární.

Odhad K -funkce

Následující odhady lze v knihovně `spatstat` dostat pomocí funkce `Kest`.

0. nekorigovaný odhad (uncorrected estimate): Na základě vztahu (2) bychom teoreticky mohli uvažovat nestranný odhad $\lambda^2 K(r)$ tvaru

$$\widehat{\lambda^2 K}(r) = \sum_{X \in \Phi \cap W} \frac{\Phi(b(X, r) \setminus \{X\})}{|W|} = \sum_{X, Y \in \Phi}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[X \in W, \|X - Y\| \leq r]}}{|W|}.$$

Tento odhad je ale použitelný pouze, pokud máme dodatečnou informaci z vnějšku okna W o bodech Y , které leží ve vzdálenosti nejvýše r od bodů procesu Φ ležících v okně, tzv. *plusový výběr (plus sampling)*. Problém spočívá v okrajových efektech: nejsme schopni vyčíslit $\Phi(b(X, r) \setminus \{X\})$ jenom z informace uvnitř okna W , viz obrázek 14 (vlevo). Pokud bychom ignorovali okrajové efekty a uvažovali pouze body uvnitř okna, dostaneme záporně vychýlený odhad:

$$\sum_{X, Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[\|X - Y\| \leq r]}}{|W|}.$$

Knihovna `spatstat` umožňuje spočítat tento odhad volbou `correction="none"`. Je to však jen z instruktažních důvodů. V praxi je tento odhad nepoužitelný.

1. minusový odhad (border-corrected estimate, reduced sample estimate), correction="border": Nejjednodušším postupem, jak se vyhnout okrajovým efektům, je uvažovat Φ v menším okně

$$W_{\ominus r} = W \ominus b(o, r) = \{y \in W : b(y, r) \subseteq W\} = \{y \in W : d(y, \partial W) \geq r\},$$

tzv. *minusový výběr (minus sampling)*. Zde ∂W značí hranici množiny W . Pak

$$\widehat{\lambda^2 K_b}(r) = \sum_{X \in \Phi \cap W_{\ominus r}} \frac{\Phi(b(X, r) \setminus \{X\})}{|W_{\ominus r}|} = \sum_{X, Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[X \in W_{\ominus r}, \|X - Y\| \leq r]}}{|W_{\ominus r}|}$$

je nestranný odhad $\lambda^2 K(r)$, jak se dá ukázat z Campbellové věty (věta 7).

2. translačně korigovaný odhad (translation-corrected estimate), correction="translate": Jiná možnost je využít korekčních faktorů, což jsou jakési váhy přiřazené tomu, že pozorujeme dva body v určité vzdálenosti. Můžeme použít tzv. translační korekční faktor:

$$\widehat{\lambda^2 K_t}(r) = \sum_{X, Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[\|X - Y\| \leq r]}}{|W \cap (W + X - Y)|}.$$

Tento odhad je nestranný, pokud $|W \cap (W+x)| > 0$ pro všechna $\|x\| \leq r$. Důkaz je založen na Campbellově větě (věta 7). Podobně můžeme definovat odhad redukované momentové míry druhého řádu

$$\widehat{\lambda^2 \mathcal{K}(B)} = \sum_{X,Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[X-Y \in B]}}{|W \cap (W + X - Y)|}.$$

Odhad jádrově vyhlazené hustoty této míry se dá spočítat příkazem `Kmeasure`.

3. *Ripleyho izotropicky korigovaný odhad (Ripley isotropic correction estimate)*, `correction="isotropic"` nebo `correction="Ripley"`: Jiný korekční faktor navrhl B. Ripley:

$$\widehat{\lambda^2 K_R(r)} = \sum_{X,Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[\|X-Y\| \leq r]}}{|W|} \cdot \frac{|\partial b(X, \|X-Y\|)|}{|\partial b(X, \|X-Y\|) \cap W|}.$$

Pokud je proces navíc izotropní lze ukázat, že se jedná o nestranný odhad pro $r < r_0 = \inf\{t > 0 : |W^{(t)}| < |W|\}$, kde $W^{(t)} = \{x \in W : \partial b(x, t) \cap W \neq \emptyset\}$. Někdy se uvádí Ohserova modifikace tohoto odhadu:

$$\widehat{\lambda^2 K_O(r)} = \sum_{X,Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[\|X-Y\| \leq r]}}{|W^{(\|X-Y\|)}|} \cdot \frac{|\partial b(X, \|X-Y\|)|}{|\partial b(X, \|X-Y\|) \cap W|}.$$

Tento odhad je nestranný pro $r < r^* = \sup\{s > 0 : |W^{(s)}| > 0\}$. Pro $W = [0, 1]^2$ je $r_0 = \sqrt{2}/2$, $r^* = \sqrt{2}$ a $W^{(s)} = W$ pro všechna $s \leq r_0$.

Při odhadování $K(r)$ je třeba dělit odhadem druhé mocniny intenzity, což má za následek porušení nestrannosti. Vychýlení a rozptyl se typicky zvětšují s rostoucím r . Pro obdélníkové okno se doporučuje odhady počítat pro r menší než čtvrtina kratší strany obdélníku. Výsledné odhady nemusí být monotónní funkce v r (na rozdíl od teoretické funkce).

S rostoucím r a dimenzí prostoru dochází u okrajové metody k významné ztrátě informace z dat. Statisticky lepší vlastnosti mají odhady založené na korekčních faktorech. Na druhou stranu výpočet \hat{K}_b je rychlejší.

Odhad párové korelační funkce

Podle věty 15 pro stacionární a izotropní proces souvisí párová korelační funkce s K -funkcí: $g(r) = \frac{K'(r)}{\sigma_d r^{d-1}}$. Lze použít jádrový odhad s translačním nebo Ripleyho korekčním faktorem:

$$\hat{g}_t(r) = \frac{1}{\lambda^2} \sum_{X,Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{k_b(\|X-Y\| - r)}{\sigma_d r^{d-1} |W \cap (W + X - Y)|},$$

$$\hat{g}_R(r) = \frac{1}{\lambda^2} \sum_{X,Y \in \Phi \cap W}^{\neq} \frac{k_b(\|X-Y\| - r)}{\sigma_d r^{d-1} |W|} \cdot \frac{|\partial b(X, \|X-Y\|)|}{|\partial b(X, \|X-Y\|) \cap W|},$$

kde k_b je vhodná jádrová funkce s vhodnou šířkou pásma (vyhlazovacím okénkem) b . V balíčku `spatstat` lze párovou korelační funkci odhadnout pomocí `pcf`. Odhad \hat{g}_t odpovídá volbě `correction="translate"`, zatímco odhad \hat{g}_R volbě `correction="ripley"`.

Další možnost je využít některý z odhadů K -funkce a aproximovat derivaci numerickými metodami (např. pomocí splinů). To obvykle není snadné, protože odhad K -funkce je po částech konstantní funkce.

Odhad distribuční funkce nejbližšího souseda

K výpočtu následujících odhadů distribuční funkce nejbližšího souseda lze použít `Gest`.

0. *nekorigovaný odhad (uncorrected estimate)*, `correction="none"`: Kdybychom pro každý pozorovaný bod procesu znali vzdálenost k nejbližšímu sousedu, tak můžeme odhadnout distribuční funkci nejbližšího souseda klasickým způsobem jako empirickou distribuční funkci

$$\hat{G}(r) = \frac{1}{\Phi(W)} \sum_{X \in \Phi \cap W} \mathbf{1}_{[e(X) \leq r]},$$

kde $e(x) = d(x, \Phi \setminus \{x\})$ je vzdálenost bodu x k nejbližšímu sousedu. Z Campbellovy-Meckeho věty (věta 9) plyne, že tento odhad je podílově nestranný, tj.

$$\frac{\mathbb{E} \sum_{X \in \Phi \cap W} \mathbf{1}_{[e(X) \leq r]}}{\mathbb{E} \Phi(W)} = G(r).$$

Opět díky okrajovým efektům nejsme schopni získat $e(X)$ pro každé $X \in \Phi \cap W$, viz obrázek 14. Pokud nahradíme $e(X)$ vzdáleností $e^*(X) = d(X, (\Phi \setminus \{X\}) \cap W)$, kterou jsme schopni pozorovat, dostáváme následující naivní odhad

$$\hat{G}_r(r) = \frac{1}{\Phi(W)} \sum_{X \in \Phi \cap W} \mathbf{1}_{[e^*(X) \leq r]}.$$

1. *minusový odhad (border corrected estimate, reduced sample estimate)*, *correction="border"* nebo "rs": Přejdeme-li opět k erodovanému oknu $W_{\ominus r}$, dostaneme podílově nestranný odhad

$$\hat{G}_b(r) = \frac{1}{\Phi(W_{\ominus r})} \sum_{X \in \Phi \cap W_{\ominus r}} \mathbf{1}_{[e(X) \leq r]}.$$

2. *Kaplanův-Meierův odhad (Kaplan-Meier estimate)*, *correction="km"*: Okrajové efekty lze chápat jako druh cenzorování (viz podkapitola 5.1). Můžeme tak zavést odhad Kaplanova-Meierova typu:

$$\hat{G}_{KM}(r) = 1 - \prod_{s \leq r} \left(1 - \frac{\#\{X \in \Phi \cap W : e(X) = s, e(X) \leq c(X)\}}{\#\{X \in \Phi \cap W : e(X) \geq s, c(X) \geq s\}} \right),$$

kde $c(x) = d(x, \partial W)$ je vzdálenost x od hranice okna. Uvědomme si, že k výpočtu tohoto odhadu nám stačí informace, kterou máme z okna W .

Pokud máme absolutně spojitou distribuční funkci $H(t)$ s hustotou $h(t)$, tak *riziková funkce (hazard function)* je definována jako $\lambda_h(t) = h(t)/(1 - H(t))$. Prostorová Kaplanova-Meierova metoda umožňuje odhadnout rizikovou funkci $\lambda_h(r)$ distribuční funkce $G(r)$. Musíme však být opatrní, protože G nemusí mít nutně hustotu. V balíčku *spatstat* se tento odhad počítá společně s Kaplanovým-Meierovým odhadem G -funkce.

3. *Hanischův odhad (Hanisch estimate)*, *correction="han"* nebo "Hanisch": Jiné vylepšení minusového odhadu přináší následující korekce na okrajové efekty:

$$\hat{G}_H(r) = \frac{1}{\hat{\lambda}} \sum_{X \in \Phi \cap W} \frac{\mathbf{1}_{[e(X) \leq c(X)]}}{|W_{\ominus e(X)}|} \mathbf{1}_{[e(X) \leq r]},$$

kde

$$\hat{\lambda} = \sum_{X \in \Phi \cap W} \frac{\mathbf{1}_{[e(X) \leq c(X)]}}{|W_{\ominus e(X)}|}.$$

Odhady G nemusí být distribuční funkce: \hat{G}_b nemusí být monotónní a maximální hodnota může být větší nebo menší než 1, \hat{G}_{KM} je neklesající, ale maximální hodnota může být menší než 1. Kaplanův-Meierův odhad je vydatnější než minusový odhad.

Odhad kontaktní distribuční funkce

V prostoru \mathbb{R}^d zvolme pravidelnou mříž I :

$$I_a = y + a\mathbb{Z}^d = \{(y_1 + a_1 z_1, \dots, y_d + a_d z_d) \in \mathbb{R}^d : z_i \in \mathbb{Z}\},$$

kde $y = (y_1, \dots, y_d) \in \mathbb{R}^d$ a $a = (a_1, \dots, a_d) \in \mathbb{R}_+^d$, tj. $a_i > 0$ pro $i = 1, \dots, d$. K výpočtu následujících odhadů kontaktní distribuční funkce v rovinném případě lze použít *Fest*.

0. *nekorigovaný odhad (uncorrected estimate)*, *correction="none"*: Pro každý bod mříže v okně W najdeme nejbližší bod procesu, ten ovšem může ležet mimo okno. Pokud budeme naivně uvažovat pouze body $\Phi \cap W$, dostaneme

$$\hat{F}_r(r) = \frac{1}{I_a(W)} \sum_{x \in I_a \cap W} \mathbf{1}_{[d(x, \Phi \cap W) \leq r]},$$

kde $I_a(W)$ je počet prvků množiny $I_a \cap W$. Tento odhad je záporně vychýlený, tj. $\mathbb{E}\hat{F}_r(r) \leq F(r)$, neboť $\mathbf{1}_{[d(x, \Phi \cap W) \leq r]} \leq \mathbf{1}_{[d(x, \Phi) \leq r]}$ a $\mathbb{P}(d(x, \Phi) \leq r) = F(r)$ ze stacionarity. Vychýlení je způsobeno okrajovými efekty.

1. *minusový odhad (border corrected estimate, reduced sample estimate), correction="border" nebo "rs"*: Označme $d(x) = d(x, \Phi)$ vzdálenost x od nejbližšího bodu procesu. Potom

$$\hat{F}_b(r) = \frac{1}{I_a(W_{\ominus r})} \sum_{x \in I_a \cap W_{\ominus r}} \mathbf{1}_{[d(x) \leq r]}$$

je nestranný odhad $F(r)$, neboť vzhledem ke stacionaritě $\mathbb{P}(d(x) \leq r) = F(r)$. Spojitá verze tohoto odhadu (když $a \rightarrow 0$) má tvar

$$\hat{F}_b(r) = \frac{|W_{\ominus r} \cap \Phi_r|}{|W_{\ominus r}|},$$

kde $\Phi_r = \{x \in \mathbb{R}^d : d(x, \Phi) \leq r\} = \cup_{X \in \Phi} b(X, r)$. Opět se jedná o nestranný odhad.

2. *Kaplanův-Meierův odhad (Kaplan-Meier estimate), correction="km"*:

$$\hat{F}_{KM}(r) = 1 - \prod_{s \leq r} \left(1 - \frac{\#\{x \in I_a \cap W : d(x) = s, d(x) \leq c(x)\}}{\#\{x \in I_a \cap W : d(x) \geq s, c(x) \geq s\}} \right),$$

kde $c(x) = d(x, \partial W)$ je vzdálenost x od hranice okna.

Kontaktní distribuční funkce $F(r)$ stacionárního procesu je absolutně spojitá a riziková funkce $\lambda_h(r)$ existuje. Odhad je založen na Kaplan-Meierově odhadu $\hat{F}_{KM}(r)$.

3. *Chiu-Stoyanův odhad (Chiu-Stoyan estimate), correction="cs" nebo "Hanisch"*: Použitím stejné korekce na okrajové efekty jako u Hanischova odhadu G -funkce dostaneme

$$\hat{F}_{CS}(r) = \frac{1}{C_a} \sum_{x \in I_a \cap W} \frac{\mathbf{1}_{[d(x) \leq c(x)]}}{|W_{\ominus d(x)}|} \mathbf{1}_{[d(x) \leq r]},$$

kde

$$C_a = \sum_{x \in I_a \cap W} \frac{\mathbf{1}_{[d(x) \leq c(x)]}}{|W_{\ominus d(x)}|}.$$

Spojitá verze tohoto odhadu má tvar

$$\hat{F}_{CS}(r) = \frac{1}{C} \int_W \frac{\mathbf{1}_{[d(x) \leq c(x)]}}{|W_{\ominus d(x)}|} \mathbf{1}_{[d(x) \leq r]} dx,$$

kde

$$C = \int_W \frac{\mathbf{1}_{[d(x) \leq c(x)]}}{|W_{\ominus d(x)}|} dx.$$

Odhady F nemusí být distribuční funkce: \hat{F}_b nemusí být spojitá ani monotónní a maximální hodnota může být větší nebo menší než 1, \hat{F}_{KM} je neklesající, ale maximální hodnota může být menší než 1. Kaplan-Meierův odhad je vydatnější než minusový odhad.

Odhad J -funkce

V balíčku `spatstat` je možné J -funkci odhadnout pomocí `Jest`.

Odhad J -funkce vychází z její definice:

$$\hat{J}(r) = \frac{1 - \hat{G}(r)}{1 - \hat{F}(r)}.$$

Rozlišíme následující odhady (podle toho, jaké odhady G a F použijeme): *nekorigovaný (uncorrected, correction="none")*, *minusový (border corrected, reduced sample, correction="border" nebo "rs")*, *Kaplanův-Meierův (Kaplan-Meier, correction="km")* a *Hanischův (Hanisch-style, correction="Hanisch")*.

I když nekorigované odhady \hat{G}_r a \hat{F}_r jsou výrazně vychýlené, tak jejich podílem se dostane přibližně nestranný odhad (alespoň když daný bodový proces je blízko Poissonovu procesu). Výhodou tohoto odhadu je necitlivost vzhledem k okrajovým efektům, měl by se tedy použít, pokud jsou okrajové efekty významné.

Další tři odhady jsou mírně vychýlené (podíl dvou přibližně nestranných odhadů). Logaritmus Kaplanova-Meierova odhadu je nestranný odhad $\log J$.

Knihovna `spatstat` umožňuje odhadnout čtyři základní sumární statistiky (F , G , J , K funkce) najednou pomocí `allstats`.

Odhad indexu agregace

Pro každou nezápornou náhodnou veličinu T platí mezi její střední hodnotou $\mathbb{E}T$ a distribuční funkcí $H(t)$ následující vztah

$$\mathbb{E}T = \int_0^\infty (1 - H(t)) dt.$$

Máme-li odhad $\hat{G}(t)$ distribuční funkce nejbližšího souseda $G(t)$, můžeme tak dostat odhad Clarkova-Evansova indexu jako

$$\widehat{\text{CE}} = \frac{d(\hat{\lambda})^{1/d}}{\Gamma(1/d)} \int_0^\infty (1 - \hat{G}(t)) dt.$$

V knihovně spatstat je pro odhad CE určena funkce clarkevans.

3. Geostatistika

3.1 Náhodná pole

Při modelování geostatistických dat je základním pojmem náhodné pole.

Definice 34. Nechť D je pevná podmnožina \mathbb{R}^d s kladnou d -rozměrnou Lebesgueovou mírou. *Náhodné pole (random field)* je kolekce náhodných veličin $\{Z(x) : x \in D\}$ definovaných na pravděpodobnostním prostoru $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$.

Nejvíce studována jsou gaussovská náhodná pole.

Definice 35. Náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ je *gaussovské (Gaussian)*, jestliže všechna jeho konečně rozměrná rozdělení jsou normální, tj. pro každé $n \in \mathbb{N}$ a $x_1, \dots, x_n \in D$ má vektor $(Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$ n -rozměrné normální rozdělení.

Poznámka: Gaussovské náhodné pole je určeno střední hodnotou $\mu(x) = \mathbb{E}Z(x)$ a kovariancemi $C(x, y) = \text{cov}(Z(x), Z(y))$, $x, y \in D$.

V praxi většinou pozorujeme pouze jednu realizaci z náhodného pole Z v konečně mnoha bodech x_1, \dots, x_n . K tomu, abychom mohli dělat nějaké statistické závěry, tak potřebujeme přijmout další předpoklady na náhodné pole Z .

Definice 36. Náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ je *striktně stacionární (strict(ly) stationary, strong(ly) stationary)*, pokud konečně rozměrná rozdělení vektorů $(Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$ a $(Z(x_1+h), \dots, Z(x_n+h))^T$ jsou stejná pro každé $n \in \mathbb{N}$, $x_1, \dots, x_n \in D$ a $h \in \mathbb{R}^d$ takové, že $x_1+h, \dots, x_n+h \in D$. Řekneme, že náhodné pole s konečnými druhými momenty je *slabě stacionární (weak(ly) stationary, second-order stationary)*, pokud střední hodnota je konstantní ($\mathbb{E}Z(x) = \mu$ pro všechna $x \in D$) a (auto)kovarianční funkce $C(x, y) = \text{cov}(Z(x), Z(y))$ je invariantní vůči posunutím, tj. $C(x+h, y+h) = C(x, y)$ pro každé $x, y \in D$ a $h \in \mathbb{R}^d$ splňující $x+h, y+h \in D$. V tom případě je $C(x, y) = C(x-y)$ pro všechna $x, y \in D$. Pro kovarianční funkci $C(h) = \text{cov}(Z(x+h), Z(x))$ se v geostatistice také užívá název *kovariogram (covariogram)*. Je-li splněna pouze podmínka na kovarianční funkci (střední hodnota nemusí být konstantní), tak náhodné pole je *kovariančně stacionární (covariance stationary)*.

Poznámka: Striktně stacionární náhodné pole s konečnými druhými momenty je slabě stacionární. U gaussovského náhodného pole plyne ze slabé stacionarity striktní stacionarita.

Definice 37. Řekneme, že náhodné pole je *vnitřně stacionární (intrinsic(ally) stationary)*, pokud pro každé $x, y \in D$ je $\mathbb{E}(Z(x) - Z(y)) = 0$ a $\text{var}(Z(x) - Z(y))$ je funkcí rozdílu $x - y$.

Poznámka: Pro slabě stacionární náhodné pole platí: $\mathbb{E}(Z(x) - Z(y)) = \mu - \mu = 0$ a

$$\text{var}(Z(x+h) - Z(x)) = \text{var} Z(x+h) + \text{var} Z(x) - 2 \text{cov}(Z(x), Z(x+h)) = 2(C(o) - C(h)). \quad (6)$$

Znamená to, že každé slabě stacionární náhodné pole je také vnitřně stacionární. Obrácená implikace neplatí, např. pro $d = 1$ je Wienerův proces vnitřně stacionární ($\text{var}((Z(x+h) - Z(x)) = |h|)$), ale není slabě stacionární ($\text{var} Z(x) = |x|$).

Definice 38. Řekneme, že náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ je *L_2 -spojité (L_2 -continuous)* nebo také *spojité podle kvadratického středu (mean square continuous)* v bodě $x \in D$, jestliže $\mathbb{E}(Z(x+h) - Z(x))^2 \rightarrow 0$ pro $\|h\| \rightarrow 0$. Pole je *L_2 -spojité*, pokud je *L_2 -spojité* v každém bodě $x \in D$.

Poznámka: Uvědomte si, že L_2 -spojitost neznamenaá spojitost realizací náhodného pole.

O hladkosti náhodného pole vypovídá jeho diferencovatelnost.

Definice 39. Náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ je L_2 -diferencovatelné (L_2 -differentiable) nebo také *diferencovatelné podle středu* (mean square differentiable) v bodě $x \in D$ ve směru $h \in \mathbb{R}^d$, jestliže existuje limita pro $t \rightarrow 0$ podílu $\frac{Z(x+th)-Z(x)}{t}$ v prostoru L_2 . Pokud tuto limitu označíme $Z'(x, h)$, tak musí tedy platit

$$\lim_{t \rightarrow 0} \mathbb{E} \left(\frac{Z(x+th) - Z(x)}{t} - Z'(x, h) \right)^2 = 0.$$

Nechť $\{e_1, \dots, e_d\}$ je kanonická báze prostoru \mathbb{R}^d , pak $Z'(x, e_j)$, $j = 1, \dots, d$, jsou *parciální derivace* (partial derivatives) náhodného pole v bodě x .

3.2 Variogram a kovarianční funkce

Definice a vlastnosti

Definice 40. Pro vnitřně stacionární náhodné pole definujeme *variogram* (variogram) jako

$$2\gamma(h) = \text{var}(Z(x+h) - Z(x)), \quad h \in D - D,$$

kde $D - D = \{h \in \mathbb{R}^d : h = x - y, x \in D, y \in D\}$. Pro $\gamma(h)$ se používá označení *semivariogram* (semivariogram). Pokud navíc je $\gamma(h)$ pouze funkcí $\|h\|$, mluvíme o izotropním semivariogramu a variogramu.

Poznámka: Pro slabě stacionární náhodná pole je (semi)variogram omezená funkce a z (6) dostáváme vztah mezi semivariogramem a kovariogramem: $\gamma(h) = C(o) - C(h)$.

Z definice je vidět, že zřejmě platí $\gamma(h) = \gamma(-h)$, $\gamma(o) = 0$ a $\gamma(h) \geq 0$. Dále $\gamma(h) \rightarrow 0$ pro $\|h\| \rightarrow 0$ právě tehdy, když náhodné pole je L_2 -spojité. To plyne přímo z definice, neboť pro vnitřně stacionární náhodné pole je $2\gamma(h) = \text{var}(Z(x+h) - Z(x)) = \mathbb{E}(Z(x+h) - Z(x))^2$. Pokud $\gamma(h)$ není spojitá v počátku, tak se hovoří o tzv. *nugget efektu* (nugget effect). Funkce γ nemusí být omezená.

Definice 41. Pokud existuje limita $\lim_{\|h\| \rightarrow 0} 2\gamma(h) = c_0 > 0$, nazývá se *zbytkový rozptyl* (nugget). Pokud existuje konečná limita $\lim_{\|h\| \rightarrow \infty} 2\gamma(h) = 2\sigma^2$, nazývá se *práh* (sill). V tom případě definujeme *rozsah* (range) jako

$$r = \inf\{s \geq 0 : 2\gamma(h) = 2\sigma^2 \text{ pro všechna } h \in \mathbb{R}^d : \|h\| \geq s\}.$$

Poznámka: Zbytkový rozptyl znamená, že opakovaná měření ve stejném místě dávají rozdílné hodnoty. Vyskytuje se například v situaci, kdy nepozorujeme přímo realizaci náhodného pole, ale pozorované hodnoty jsou zatíženy nějakou chybou. Mějme vnitřně stacionární náhodné pole $\{S(x) : x \in D\}$ (tzv. signál) s variogramem $2\gamma_S(h)$, který je spojitý v počátku, a vnitřně stacionární náhodné pole $\{\varepsilon(x) : x \in D\}$ (tzv. šum), které je nezávislé na $\{S(x) : x \in D\}$. Pozorujeme realizaci náhodného pole $\{Z(x) : x \in D\}$, kde $Z(x) = S(x) + \varepsilon(x)$. Pokud $\varepsilon(x)$ jsou nekorelované náhodné veličiny s konstantní střední hodnotou a rozptylem $c_0/2$ (tzv. *bílý šum* (white noise)), potom variogram $\{Z(x) : x \in D\}$ je $2\gamma(h) = 2\gamma_S(h) + c_0 \mathbf{1}_{[h \neq o]}$ a zbytkový rozptyl je tudíž roven c_0 .

Kovariogram slabě stacionárního náhodného pole má následující vlastnosti: $C(h) = C(-h)$; $C(o) = \text{var } Z(x) \geq 0$; $|C(h)| \leq C(o)$, tudíž C je omezená funkce; C spojitá v o právě tehdy, když Z je spojitě podle kvadratického středu. Dá se ukázat, že L_2 -diferencovatelnost náhodného pole souvisí s diferencovatelností kovarianční funkce (případně variogramu) v počátku.

Nyní vyslovíme pomocné tvrzení, které se bude hodit při výpočtech charakteristik druhého řádu náhodného pole.

Lemma 22. Pro kovariančně stacionární náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ platí:

$$\text{cov} \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j Z(x_j), \sum_{j=1}^n \beta_j Z(x_j) \right) = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_j \beta_k C(x_k - x_j)$$

pro každé $n \in \mathbb{N}$, $x_1, \dots, x_n \in D$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_n \in \mathbb{R}$.

Pro vnitřně stacionární náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ platí:

$$\text{cov} \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j Z(x_j), \sum_{j=1}^n \beta_j Z(x_j) \right) = - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_j \beta_k \gamma(x_k - x_j)$$

pro každé $n \in \mathbb{N}$, $x_1, \dots, x_n \in D$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_n \in \mathbb{R}$ splňující $\sum_{j=1}^n \alpha_j = \sum_{j=1}^n \beta_j = 0$.

Důkaz: První vztah je obvyklý vzoreček pro výpočet kovariance lineárních kombinací náhodných veličin. K důkazu druhého vztahu použijeme

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j Z(x_j) = \sum_{j=1}^n \alpha_j (Z(x_j) - Z(x_1)), \quad \sum_{j=1}^n \beta_j Z(x_j) = \sum_{j=1}^n \beta_j (Z(x_j) - Z(x_1))$$

a identitu

$$2\gamma(x_j - x_k) = 2\gamma(x_j - x_1) + 2\gamma(x_k - x_1) - 2\text{cov}(Z(x_j) - Z(x_1), Z(x_k) - Z(x_1)),$$

kteřá plyne z $Z(x_j) - Z(x_k) = Z(x_j) - Z(x_1) + Z(x_1) - Z(x_k)$ spočtením rozptylu na obou stranách. Celkem tak máme

$$\begin{aligned} \text{cov} \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j Z(x_j), \sum_{j=1}^n \beta_j Z(x_j) \right) &= \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_j \beta_k \text{cov}(Z(x_j) - Z(x_1), Z(x_k) - Z(x_1)) \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_j \beta_k (\gamma(x_j - x_1) + \gamma(x_k - x_1) - \gamma(x_j - x_k)) \\ &= - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_j \beta_k \gamma(x_j - x_k). \end{aligned}$$

□

Definice 42. Necht $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ je symetrická funkce, tj. $f(x) = f(-x)$ pro každé $x \in \mathbb{R}^d$. Řekneme, že f je *pozitivně semidefinitní* (*positive semidefinite*), jestliže pro každé $n \in \mathbb{N}$, $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$ platí

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_j \alpha_k f(x_j - x_k) \geq 0.$$

Funkce f se nazývá *podmíněně negativně definitní* (*conditional negative definite*), jestliže pro každé $n \in \mathbb{N}$, $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ a $\beta_1, \dots, \beta_n \in \mathbb{R}$ splňující $\sum_{j=1}^n \beta_j = 0$ platí

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \beta_j \beta_k f(x_j - x_k) \leq 0.$$

Důsledek 23. Kovarianční funkce kovariančně stacionárního náhodného pole je pozitivně semidefinitní. Variogram vnitřně stacionárního náhodného pole je podmíněně negativně definitní.

Důkaz: Z lemmatu 22 plyne

$$0 \leq \text{var} \sum_{j=1}^n \alpha_j Z(x_j) = \text{cov} \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j Z(x_j), \sum_{j=1}^n \alpha_j Z(x_j) \right) = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_j \alpha_k C(x_j - x_k)$$

a

$$0 \leq \text{var} \sum_{j=1}^n \beta_j Z(x_j) = \text{cov} \left(\sum_{j=1}^n \beta_j Z(x_j), \sum_{j=1}^n \beta_j Z(x_j) \right) = - \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \beta_j \beta_k \gamma(x_j - x_k).$$

□

Platí dokonce, že třída všech kovariogramů kovariančně stacionárních náhodných polí splývá s třídou pozitivně semidefinitních funkcí.

Věta 24. *Ke každé pozitivně semidefinitní funkci $C : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ existuje kovariančně stacionární náhodné pole takové, že C je jeho kovarianční funkce.*

Důkaz: Pro každé $n \in \mathbb{N}$ a libovolná $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ je matice $\Sigma = (C(x_i - x_j))_{i,j=1,\dots,n}$ pozitivně semidefinitní (plyne z pozitivní semidefinitnosti funkce C) a můžeme tak uvažovat n -rozměrné centrované normální rozdělení s varianční maticí Σ . Dostáváme systém konečně rozměrných rozdělení, který je projektivní, a proto podle Daniellovy-Kolmogorovy věty ([15], věta I.9.4) existuje gaussovské náhodné pole $\{Z(x) : x \in \mathbb{R}^d\}$, které splňuje $\text{cov}(Z(x), Z(y)) = C(x - y)$. □

Spektrální rozklad

Podobně jako u náhodných procesů lze uvažovat spektrální rozklad kovarianční funkce náhodného pole. Pro (komplexní) slabě stacionární L_2 -spojité náhodné pole lze kovarianční funkci vyjádřit jako (Bochnerova věta)

$$C(h) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\omega^T h} dS(\omega), \quad h \in \mathbb{R}^d, \quad (7)$$

kde S je tzv. *spektrální distribuční funkce (spectral distribution function)*, která má následující vlastnosti:

1. $\lim_{\min_{i=1,\dots,d} \omega_i \rightarrow \infty} S(\omega_1, \dots, \omega_d) = C(o)$,
2. $\lim_{\omega_i \rightarrow -\infty} S(\omega_1, \dots, \omega_d) = 0$ pro každé $i = 1, \dots, d$,
3. S je zprava spojitá v každé složce,
4. S je neklesající v ω neboli pro každé $\omega, \vartheta \in \mathbb{R}^d$ takové, že $\omega_i < \vartheta_i, i = 1, \dots, d$, platí

$$\mu_S((\omega, \vartheta]) = \sum_{\delta_1=0}^1 \cdots \sum_{\delta_d=0}^1 (-1)^{d-\sum_{i=1}^d \delta_i} S(\omega_1 + \delta_1(\vartheta_1 - \omega_1), \dots, \omega_d + \delta_d(\vartheta_d - \omega_d)) \geq 0,$$

kde $(\omega, \vartheta] = (\omega_1, \vartheta_1] \times \cdots \times (\omega_d, \vartheta_d]$.

Funkce S generuje konečnou Lebesgueovu-Stieltjesovu míru μ_S . Integrál v (7) je třeba chápat jako integrál podle této míry (místo $dS(\omega)$ bychom mohli psát $\mu_S(d\omega)$), jedná se tedy o Lebesgueův-Stieltjesův integrál. Pokud existuje hustota $s(\omega)$ funkce $S(\omega)$, nazývá se *spektrální hustota (spectral density)*. Inverzní formule pro spektrální hustotu má tvar (pokud $\int |C(h)| dh < \infty$)

$$s(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\omega^T h} C(h) dh, \quad \omega \in \mathbb{R}^d.$$

Pro náhodné pole s reálnými hodnotami je

$$C(h) = \int_{\mathbb{R}^d} \cos(\omega^T h) dS(\omega) = \int_{\mathbb{R}^d} \cos(\omega^T h) s(\omega) d\omega, \quad h \in \mathbb{R}^d$$

a

$$s(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \cos(\omega^T h) C(h) dh, \quad \omega \in \mathbb{R}^d,$$

pokud existuje spektrální hustota. Pro izotropní kovarianční funkci platí

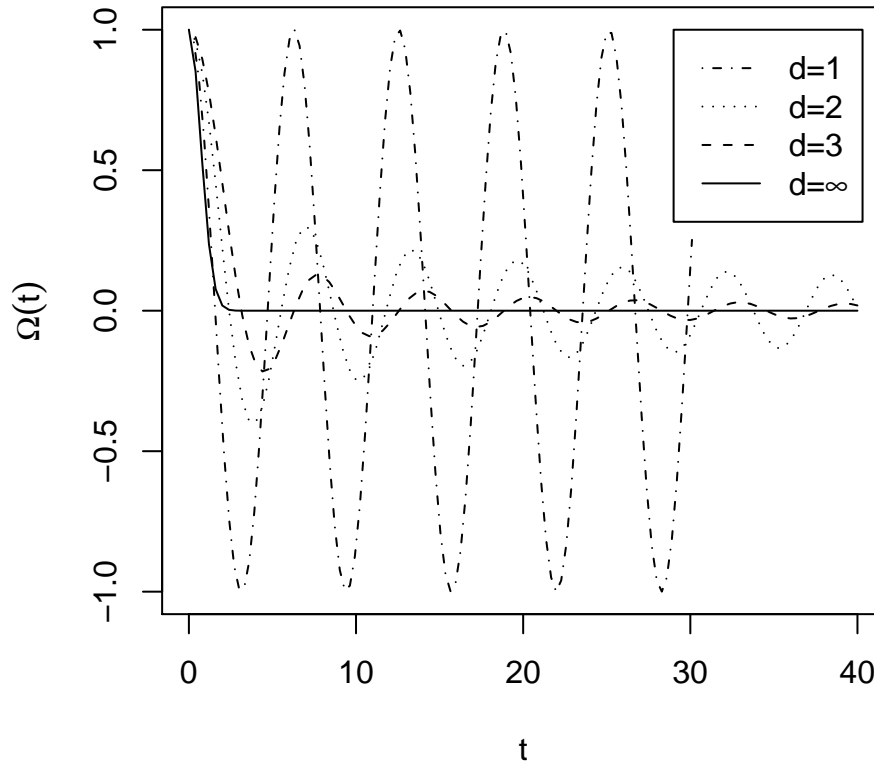
$$C(\|h\|) = \int_0^\infty \Omega_d(\omega \|h\|) dH(\omega), \quad (8)$$

kde

$$\Omega_d(t) = \left(\frac{2}{t}\right)^v \Gamma(d/2) J_v(t),$$

$v = d/2 - 1$ a J_v je Besselova funkce prvního druhu řádu v (viz podkapitola 5.2). Funkce $H(u)$ je neklesající na \mathbb{R}^+ s konečnou limitou pro $u \rightarrow \infty$ a souvisí se spektrální distribuční funkcí vztahem $H(u) = \mu_S(b(o, u)) = \int_{b(o, u)} dS(\omega)$. Vyjádření (8) se nazývá *Hankelova transformace (Hankel transform)*.

Funkce Ω_d je základní funkce (basis function) kovariogramu. Speciálně je $\Omega_1(t) = \cos t$, $\Omega_2(t) = J_0(t)$, $\Omega_3(t) = \frac{\sin t}{t}$ a $\lim_{d \rightarrow \infty} \Omega_d(t) = e^{-t^2}$. Tyto funkce jsou znázorněny na obrázku 15.



Obrázek 15. Základní funkce $\Omega_d(t)$ pro $d = 1$, $d = 2$, $d = 3$ a $d \rightarrow \infty$.

Izotropní variogram vnitřně stacionárního náhodného pole má rovněž spektrální reprezentaci:

$$2\gamma(\|h\|) = \int_0^\infty \frac{1 - \Omega_d(\omega\|h\|)}{\omega^2} dH(\omega),$$

kde $\int_0^\infty (1 + \omega^2)^{-1} dH(\omega) < \infty$.

Neparametrické odhady

Jak už bylo zmíněno, pro vnitřně stacionární náhodné pole je $2\gamma(h) = \text{var}(Z(x+h) - Z(x)) = \mathbb{E}(Z(x+h) - Z(x))^2$. Pokud chceme neparametricky odhadnout $2\gamma(h)$ na základě pozorování $z(x_1), \dots, z(x_n)$, které považujeme za realizaci náhodného pole Z v n bodech $x_1, \dots, x_n \in D$, tak momentová metoda dává následující nestranný odhad:

$$2\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{|N(h)|} \sum_{N(h)} (Z(x_i) - Z(x_j))^2, \quad (9)$$

kde $N(h) = \{(x_i, x_j) : x_i - x_j = h, i, j = 1, \dots, n\}$ a $|N(h)|$ je počet různých dvojic v $N(h)$. Výhodou je, že nemusíme odhadovat střední hodnotu, což je rozdíl od klasického odhadu kovariogramu pro slabě stacionární pole:

$$\hat{C}(h) = \frac{1}{|N(h)|} \sum_{N(h)} (Z(x_i) - \bar{Z})(Z(x_j) - \bar{Z}),$$

kde $\bar{Z} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n Z(x_j)$ je klasický odhad střední hodnoty μ . Povšimněme si, že $2\hat{\gamma}(h) \neq 2(\hat{C}(o) - \hat{C}(h))$, tedy vztah (6) není zachován při přechodu k momentovým odhadům.

Pokud jsou body x_1, \dots, x_n neregulárně rozmístěny v prostoru, tak množina $N(h)$ může obsahovat velmi málo dvojic a odhad variogramu je proto velmi variabilní. V tom případě můžeme (podobně jako u tvorby histogramu) dvojice bodů rozdělit do několika skupin s podobnými hodnotami rozdílů $x_i - x_j$ a spočítat průměr veličin $(Z(x_i) - Z(x_j))^2$ v každé skupině. Jiná možnost je použít vyhlazení pomocí vhodné jádrové funkce k_b s šířkou pásma b :

$$2\hat{\gamma}(h) = \frac{\sum_{i \neq j} (Z(x_i) - Z(x_j))^2 k_b(x_i - x_j - h)}{\sum_{i \neq j} k_b(x_i - x_j - h)}.$$

Často předpokládáme, že náhodné pole je izotropní, variogram je pak funkce vzdálenosti $\|h\|$, čehož lze využít při jeho odhadování, např. u odhadu na bázi histogramu uvažujeme skupiny dvojic bodů s blízkými vzdálenostmi mezi sebou nebo v jádrově vyhlazeném odhadu pokládáme $k_b(\|x_i - x_j\| - \|h\|)$, kde k_b je jednorozměrná jádrová funkce.

Nevýhodou těchto neparametrických odhadů je jejich velký rozptyl a také to, že odhady variogramu a kovariogramu nemusí dávat platný variogram nebo kovariogram. Jak víme, každý variogram musí být podmíněně negativně definitní a každý kovariogram pozitivně semidefinitní funkce, ale $\hat{\gamma}$ a \hat{C} už tyto vlastnosti mít nemusí (a často taky nemají).

Parametrické modely

Proto se uvažují parametrické modely variogramu a kovariogramu. Uvedme si několik základních parametrických modelů pro izotropní variogramy. Ve všech modelech je jedním z parametrů zbytkový rozptyl $c_0 \geq 0$.

1. *mocninný (power)*:

$$2\gamma(h) = \begin{cases} 0 & \text{pro } h = o, \\ c_0 + b\|h\|^\nu & \text{pro } h \neq o, \end{cases}$$

kde $0 \leq \nu < 2$ a $b > 0$. Tento model nemá práh, pokud $\nu > 0$. Příklad $\nu = 0$ se označuje jako *nugget model*. Nekorelované náhodné veličiny s konstantní střední hodnotou a konečným rozptylem $\sigma^2 = (c_0 + b)/2$ (bílý šum) tvoří příklad náhodného pole, jehož variogram je nugget model. Pro $\nu = 1$ se mocninný model nazývá *lineární (linear)*. Příklad $d = 1$ a $c_0 = 0$ odpovídá frakcionálnímu Brownovu pohybu s Hurstovým parametrem $H = \nu/2$ (viz cvičení). Pro $d > 1$ a $c_0 = 0$ máme tzv. *frakcionální izotropní Brownův pohyb (fractional isotropic Brownian motion)* v \mathbb{R}^d nebo také *Lévyho frakcionální Brownovo náhodné pole (Lévy's fractional Brownian random field)*, viz např. [3].

2. *sférický (spherical)*:

$$2\gamma(h) = c_0 \mathbf{1}_{[h \neq o]} + c_s \left(1 - \frac{|b(o, \varrho) \cap b(h, \varrho)|}{|b(o, \varrho)|} \right),$$

kde $c_s \geq 0$, $\varrho > 0$. Prah tohoto modelu je $2\sigma^2 = c_0 + c_s$ a rozsah $r = 2\varrho$. Nejčastěji používaný je sférický model pro $d = 3$:

$$2\gamma(h) = \begin{cases} 0 & \text{pro } h = o, \\ c_0 + c_s \left(\frac{3\|h\|}{2r} - \frac{\|h\|^3}{2r^3} \right) & \text{pro } 0 < \|h\| \leq r, \\ c_0 + c_s & \text{pro } \|h\| \geq r. \end{cases}$$

Tento model je platný také pro nižší dimenze $d = 1$ a $d = 2$. Obecně však model platný v nižší dimenzi není platný ve vyšší dimenzi (viz cvičení).

3. *zobecněný exponenciální (generalized exponential)*:

$$2\gamma(h) = c_0 \mathbf{1}_{[h \neq o]} + c_e (1 - \exp\{- (\|h\|/a)^\nu \}),$$

kde $c_e \geq 0$, $a > 0$ a $0 < \nu \leq 2$. Prah tohoto modelu je $2\sigma^2 = c_0 + c_e$, rozsah je nekonečný. Nejčastěji jsou užívané dva speciální případy: pro $\nu = 1$ máme *exponenciální (exponential)* model a pro $\nu = 2$ dostáváme *gaussovský (Gaussian)* model.

Podobně lze uvažovat parametrické modely pro kovariogram, např. sférický: $C(h) = \sigma^2 \frac{|b(\sigma, \varrho) \cap b(h, \varrho)|}{|b(\sigma, \varrho)|}$ nebo zobecněný exponenciální: $C(h) = \sigma^2 \exp\{-\alpha \|h\|/a\}$. Celkem širokou flexibilní třídu parametrických modelů izotropního kovariogramu tvoří Matérnův model:

$$C(h) = \sigma^2 \frac{1}{2^{\nu-1} \Gamma(\nu)} (\alpha \|h\|)^{\nu} K_{\nu}(\alpha \|h\|), \quad (10)$$

kde $\nu > 0$, $\alpha > 0$, $\sigma^2 > 0$ jsou parametry a K_{ν} značí modifikovanou Besselovu funkci druhého druhu řádu ν (viz podkapitola 5.2). Tento model (stejně jako předchozí uvedené) je případně možné rozšířit o nugget jako další parametr. Parametr σ^2 je rozptyl náhodného pole, α je parametr měřítka a parametr ν souvisí s diferencovatelností kovariogramu a tedy také příslušného náhodného pole. Pro $\nu = 1/2$ jde o exponenciální kovarianční funkci ($C(h) = \sigma^2 \exp\{-\alpha \|h\|\}$) a pro $\nu \rightarrow \infty$ se dostává gaussovská kovarianční funkce. Spektrální hustota kovarianční funkce (10) má následující tvar:

$$s(\omega) = \sigma^2 \frac{\Gamma(\nu + \frac{d}{2})}{\Gamma(\nu) \pi^{d/2}} \cdot \frac{\alpha^{2\nu}}{(\alpha^2 + \omega^2)^{\nu + \frac{d}{2}}}.$$

Pro odhad parametrů variogramu nebo kovariogramu z dat existují alespoň dvě možnosti. První je založena na neparametrickém odhadu spočteném v několika bodech h_j a proložení křivky definující model variogramu body $(h_j, \hat{\gamma}(h_j))$ metodou (vážených) nejmenších čtverců. Druhá možnost je hledat odhad parametrů metodou maximální věrohodnosti. Pro gaussovské náhodné pole se střední hodnotou μ má logaritmická věrohodnostní funkce založena na datech $\mathbf{z} = (z(x_1), \dots, z(x_n))^T$ tento tvar:

$$-2 \log L(\mu, \theta) = n \log 2\pi + \log \det(C_n(\theta)) + (\mathbf{z} - \mu \mathbf{1})^T C_n(\theta)^{-1} (\mathbf{z} - \mu \mathbf{1}),$$

kde $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^T$ a $C_n(\theta)_{ij} = C(x_i - x_j)$ závisí na vektoru parametrů kovarianční funkce. Pro dané θ je $L(\mu, \theta)$ maximální pro

$$\tilde{\mu} = (\mathbf{1}^T C_n(\theta)^{-1} \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}^T C_n(\theta)^{-1} \mathbf{z}. \quad (11)$$

Jedná se o zobecnění klasického odhadu metodou nejmenších čtverců. Dosazením $\tilde{\mu}$ do $L(\mu, \theta)$ dostaneme funkci θ (tzv. *profilová věrohodnost (profile likelihood)*), kterou je třeba maximalizovat (většinou numericky). Odhad μ pak dostaneme dosazením odhadu θ do (11). Populární variantou maximální věrohodnosti je REML – odhad metodou *reziduální maximální věrohodnosti (restricted maximum likelihood, residual maximum likelihood)*.

3.3 Krigování

Naším cílem je nalezení predikce $\hat{Z}(x_0)$ hodnoty $Z(x_0)$ na základě vektoru $\mathbf{Z} = (Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$. Pro metody prostorové predikce založené na minimalizaci střední kvadratické chyby se používá název *krigování (kriging)*. Ten je odvozen od D. G. Krigeho, jehož práce [7] zabývající se odhadem zásob rudy je v geostatistice považována za průkopnickou.

Jednoduché krigování

Z přednášek *Teorie pravděpodobnosti I* nebo *Matematická statistika 1* je dobře známo, že za předpokladu konečných druhých momentů je střední kvadratická chyba $\mathbb{E}[Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)]^2$ minimalizována podmíněnou střední hodnotou $\mathbb{E}[Z(x_0) | \mathbf{Z}]$ a chyba predikce je $\mathbb{E}[Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)]^2 = \mathbb{E} \text{var}[Z(x_0) | \mathbf{Z}]$. V praxi však bývá obtížné podmíněnou střední hodnotu určit. Pro jednoduchost proto uvažujeme lineární predikci $\hat{Z}(x_0) = \alpha + \beta^T \mathbf{Z}$. Chceme odhadnout α a β tak, aby střední kvadratická chyba byla minimální. Z teorie lineárních modelů víme, že řešením je

$$\beta_0 = C_n^{-1} \mathbf{c}_n, \quad \alpha_0 = \mu(x_0) - \beta_0^T \boldsymbol{\mu}_n,$$

kde $\boldsymbol{\mu}_n = \mathbb{E} \mathbf{Z} = (\mu(x_1), \dots, \mu(x_n))^T$ je vektor středních hodnot \mathbf{Z} , $\mu(x_0) = \mathbb{E} Z(x_0)$,

$$C_n = (\text{cov}(Z(x_i), Z(x_j)))_{i,j=1,\dots,n}$$

je varianční matice vektoru \mathbf{Z} a $\mathbf{c}_n = (C(x_0, x_1), \dots, C(x_0, x_n))^T$. Tedy

$$\hat{Z}(x_0) = \mu(x_0) + \beta_0^T (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_n)$$

a chyba predikce je

$$\mathbb{E}(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0))^2 = \text{var } Z(x_0) - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n.$$

Tato prostorová predikce se nazývá *jednoduché krigování* (*simple kriging*). I když jsme to nepožadovali, tak predikce $\hat{Z}(x_0)$ je nestranná, tj. $\mathbb{E}\hat{Z}(x_0) = \mathbb{E}Z(x_0)$. Všimněme si, že chyba predikce nezávisí na datech. Pokud x_0 je jedna z poloh x_1, \dots, x_n , tak $\hat{Z}(x_0) = Z(x_0)$, prostorová predikce tedy interpoluje data. Pro gaussovské náhodné pole je jednoduché krigování optimální.

Lemma 25. *Nechť $\{Z(x) : x \in D\}$ je gaussovské náhodné pole. Nejlepší lineární predikce $\hat{Z}(x_0) = \mu(x_0) + \beta_0^T(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_n)$ je nejlepší predikce $Z(x_0)$ a platí*

$$Z(x_0) | \mathbf{Z} \sim N(\hat{Z}(x_0), \mathbb{E}(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0))^2).$$

Důkaz: Sdružené rozdělení $(Z(x_0), \mathbf{Z})^T$ je $(n+1)$ -rozměrné normální. Například z přednášky *Matematická statistika 1* víme, že podmíněná rozdělení v mnohorozměrném normálním rozdělení jsou opět normální. V našem případě je podmíněné rozdělení $Z(x_0) | \mathbf{Z}$ normální se střední hodnotou $\mu(x_0) + \mathbf{c}_n^T C_n^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_n)$ a rozptylem $\text{var } Z(x_0) - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n$. Nejlepší (ne nutně lineární) predikce $Z(x_0)$ je podmíněná střední hodnota $\mathbb{E}[Z(x_0) | \mathbf{Z}]$. □

Problém je, že $\boldsymbol{\mu}_n$, $\mu(x_0)$, \mathbf{c}_n a C_n jsou v praxi neznámé. Obecně se jedná o $(n+1) + n + \binom{n+1}{2}$ neznámých parametrů, které by bylo třeba odhadnout pouze z n dat.

Obyčejné krigování

Předpokládejme nyní, že náhodné pole má konstantní konečnou střední hodnotu μ a lineární predikce má tvar

$$\hat{Z}(x_0) = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z}, \quad \text{kde } \sum_{j=1}^n \lambda_j = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{1} = 1.$$

Prostorová predikce za těchto předpokladů se označuje jako *obyčejné krigování* (*ordinary kriging*). Pro vnitřně stacionární náhodné pole je podle lemmatu 22

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0))^2 &= \mathbb{E}(Z(x_0) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z})^2 = \text{var}(Z(x_0) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z}) \\ &= - \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j \gamma(x_i - x_j) + 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma(x_i - x_0). \end{aligned} \quad (12)$$

K určení predikce $\hat{Z}(x_0)$ tedy nepotřebujeme znát střední hodnotu μ . Pro minimalizaci (12) za podmínky $\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{1} = 1$ se dá užít Lagrangeova věta o multiplikátorech. Pomocí ní je možno ukázat, že

$$\hat{Z}(x_0) = \left(\gamma_n + \mathbf{1} \frac{1 - \mathbf{1}^T \Gamma_n^{-1} \boldsymbol{\gamma}_n}{\mathbf{1}^T \Gamma_n^{-1} \mathbf{1}} \right)^T \Gamma_n^{-1} \mathbf{Z},$$

kde $\boldsymbol{\gamma}_n = (\gamma(x_0 - x_1), \dots, \gamma(x_0 - x_n))^T$ a $\Gamma_n = (\gamma(x_i - x_j))_{i,j=1,\dots,n}$. Podobně lze pro slabě stacionární náhodná pole přepsat obyčejné krigování pomocí kovariogramu. Predikce hodnoty $Z(x_0)$ na základě dat $\mathbf{z} = (z(x_1), \dots, z(x_n))^T$ má tvar $\lambda_1 z(x_1) + \dots + \lambda_n z(x_n)$, kde λ_i jsou složky vektoru $\boldsymbol{\lambda}^T = \left(\gamma_n + \mathbf{1} \frac{1 - \mathbf{1}^T \Gamma_n^{-1} \boldsymbol{\gamma}_n}{\mathbf{1}^T \Gamma_n^{-1} \mathbf{1}} \right)^T \Gamma_n^{-1}$ a označují se jako *predikční váhy* (*prediction weights*). Typicky bývají predikční váhy odpovídající bodům blízkým x_0 velké, ale jejich přesná hodnota závisí na polohách x_i a kovarianční struktuře dat. Může se stát, že λ_i bude záporné nebo větší než 1.

Univerzální krigování

V následujícím odstavci se budeme zabývat situací, kdy střední hodnota $\mu(x) = \mathbb{E}Z(x)$ není konstantní. Nejjednodušším způsobem je pak použít lineární model

$$\mu(x) = \sum_{j=0}^p \beta_j f_j(x),$$

kde $f_0(x), \dots, f_p(x)$ jsou známé pozorované hodnoty funkcí f_j v místě x a β_0, \dots, β_p jsou neznámé parametry. Za f_0 se typicky volí konstantní funkce rovna jedné, β_0 je pak absolutní člen. Častou volbou $f_i(x)$ je polynom prostorových souřadnic polohy x . Takto je možné modelovat například lineární trend. Jiná možnost je, že $f_i(x)$ představuje pozorovanou vysvětlující proměnnou (covariate). Označme $\mathbf{f} = (f_0(x_0), \dots, f_p(x_0))^T$ a F matici typu $n \times (p+1)$, jejíž prvky jsou $f_j(x_i)$, $i = 1, \dots, n$, $j = 0, \dots, p$. Pokud uvažujeme predikci tvaru

$$\hat{Z}(x_0) = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Z}, \quad \text{kde } \boldsymbol{\lambda}^T F = \mathbf{f}^T,$$

mluvíme o *univerzálním krigování* (*universal kriging*). Volba $\boldsymbol{\lambda}^T F = \mathbf{f}^T$ zaručí, že tato predikce je nestranná, neboť

$$\mathbb{E}\hat{Z}(x_0) = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbb{E}\mathbf{Z} = \boldsymbol{\lambda}^T F\boldsymbol{\beta} = \mathbf{f}^T \boldsymbol{\beta} = \mu(x_0) = \mathbb{E}Z(x_0).$$

Optimální predikci (minimalizující střední čtvercovou chybu) lze opět hledat pomocí Lagrangeových multiplikátorů. Dá se ukázat, že optimální predikční váhy mají tvar

$$\boldsymbol{\lambda}^T = (\boldsymbol{\gamma}_n + F(F^T \Gamma_n^{-1} F)^{-1}(\mathbf{f} - F^T \Gamma_n^{-1} \boldsymbol{\gamma}_n))^T \Gamma_n^{-1}.$$

Chyba predikce je

$$\boldsymbol{\gamma}_n^T \Gamma_n^{-1} \boldsymbol{\gamma}_n + (\mathbf{f} - F^T \Gamma_n^{-1} \boldsymbol{\gamma}_n)^T (F^T \Gamma_n^{-1} F)^{-1} (\mathbf{f} - F^T \Gamma_n^{-1} \boldsymbol{\gamma}_n).$$

Jedná se zobecnění vzorců pro obyčejné krigování. Pomocí kovariancí lze predikční váhy přepsat jako

$$\boldsymbol{\lambda}^T = (\mathbf{c}_n + F(F^T C_n^{-1} F)^{-1}(\mathbf{f} - F^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n))^T C_n^{-1},$$

chybu predikce jako

$$C(o) - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n + (\mathbf{f} - F^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n)^T (F^T C_n^{-1} F)^{-1} (\mathbf{f} - F^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n).$$

Pomocí zobecněných nejmenších čtverců lze pak odhadnout i parametr $\boldsymbol{\beta}$:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (F^T C_n^{-1} F)^{-1} F^T C_n^{-1} \mathbf{Z}.$$

Predikce se tak dá zapsat ve tvaru

$$\hat{Z}(x_0) = \mathbf{f}^T \hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} (\mathbf{Z} - F \hat{\boldsymbol{\beta}}).$$

V případě, že veličina $Z(x_0)$ je nekorelovaná s daty, tak predikce $\hat{Z}(x_0)$ splývá s nejlepším lineárním nestranným odhadem střední hodnoty. Obecně jsou predikce $Z(x_0)$ a odhad $\mathbb{E}Z(x_0)$ odlišné.

3.4 Vliv odhadů kovariančních parametrů

Vzorečky pro prostorovou predikci odvozené v minulé podkapitole závisí na hodnotách kovariogramu nebo variogramu, které jsou v praxi typicky neznámé a je třeba je nějakým způsobem odhadnout. Již byly zmíněny základní postupy, kterými lze odhadovat parametry variogramu nebo kovariogramu. Dosazením odhadů parametrů za neznámé parametry do parametrického tvaru příslušné funkce dostaneme tzv. *plug-in* odhad. Postup tedy probíhá v následujících krocích:

1. vybereme parametrický model pro variogram $\gamma_\theta(h)$ nebo kovariogram $C_\theta(h)$,
2. odhadneme parametry θ ,
3. upravíme statistickou inferenci vzhledem k tomu, že místo konstanty θ pracujeme s náhodnou veličinou $\hat{\theta}$.

U obyčejného krigování plug-in predikce

$$\hat{Z}(x_0) = \left(\mathbf{c}_n(\hat{\theta}) + \mathbf{1} \frac{1 - \mathbf{1}^T C_n(\hat{\theta})^{-1} \mathbf{c}_n(\hat{\theta})}{\mathbf{1}^T C_n(\hat{\theta})^{-1} \mathbf{1}} \right)^T C_n(\hat{\theta})^{-1} \mathbf{Z}$$

už není nejlepší nestranná lineární predikce (best linear unbiased predictor – BLUP) $Z(x_0)$, je to pouze odhad této predikce, tzv. EBLUP. Zatímco chyba predikce $\hat{Z}(x_0)$ je

$$C(o) - \mathbf{c}_n(\theta)^T C_n(\theta)^{-1} \mathbf{c}_n(\theta) + \frac{(1 - \mathbf{1}^T C_n(\theta)^{-1} \mathbf{c}_n(\theta))^2}{\mathbf{1}^T C_n(\theta)^{-1} \mathbf{1}}, \quad (13)$$

tak chybu predikce $\hat{Z}(x_0)$ neznáme. Dosadíme-li $\hat{\theta}$ do (13), dostaneme odhad chyby predikce $\hat{Z}(x_0)$, tedy jiné predikce než ve skutečnosti používáme. Takto získaný odhad chyby predikce má tendenci podhodnocovat skutečnou chybu predikce $\hat{Z}(x_0)$, protože nepostihujeme fakt, že náhodné $\hat{\theta}$ vnáší další variabilitu do odhadu predikce.

Vraťme se k situaci univerzálního krigování, kdy uvažujeme model $Z(x) = \mathbf{F}(x)^T \boldsymbol{\beta} + e(x)$, kde $\mathbf{F}(x) = (f_0(x), \dots, f_p(x))^T$ a $\{e(x) : x \in D\}$ je vnitřně stacionární náhodné pole s variogramem parametrizovaným pomocí θ . Pro odhad parametru θ není rozumné použít empirický odhad z dat $Z = (Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$, protože ten je vychýlený. Vychýlení odhadu (9) je způsobeno tím, že $Z(x)$ nemá konstantní střední hodnotu, a proto $\mathbb{E}(Z(x_i) - Z(x_j))^2 = \text{var}(Z(x_i) - Z(x_j)) + (\mu(x_i) - \mu(x_j))^2$. Potřebovali bychom odhad variogramu $\{e(x) : x \in D\}$, ovšem náhodné pole chyb $\{e(x) : x \in D\}$ nepozorujeme. Pokud by však bylo $\boldsymbol{\beta}$ známé, pak $e(x) = Z(x) - \mathbf{F}(x)^T \boldsymbol{\beta}$ a z hodnot $\mathbf{e} = (e(x_1), \dots, e(x_n))^T$ bychom mohli odhadnout θ . Jenže parametr $\boldsymbol{\beta}$ je neznámý. Pokud je pole $\{e(x) : x \in D\}$ slabě stacionární s kovarianční funkcí $C_\theta(h)$, tak dostaneme odhad $\boldsymbol{\beta}$ pomocí metody zobecněných nejmenších čtverců

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{F}^T C_n(\theta)^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T C_n(\theta)^{-1} \mathbf{Z}.$$

Tento odhad však vyžaduje znalost parametru θ . Znamená to, že nemůžeme rozumně odhadnout θ bez znalostí $\boldsymbol{\beta}$ a na druhou stranu k odhadu $\boldsymbol{\beta}$ potřebujeme odhad θ . O této kruhové situaci se někdy mluví jako hře kočky s myší univerzálního krigování (cat and mouse game of universal kriging).

Možné řešení nabízí metoda IRWGLS (iteratively re-weighted generalized least squares):

1. získáme počáteční odhad parametru $\boldsymbol{\beta}$ nezávisle na θ , např. metodou obyčejných nejmenších čtverců: $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{F}^T \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{Z}$,
2. spočteme rezidua $\mathbf{r} = \mathbf{Z} - \mathbf{F} \hat{\boldsymbol{\beta}}$,
3. odhadneme parametrický model variogramu nebo kovariogramu reziduí a dostaneme $\hat{\theta}$,
4. spočteme nový odhad $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ jako $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{F}^T C_n(\hat{\theta})^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T C_n(\hat{\theta})^{-1} \mathbf{Z}$,
5. opakujeme kroky 2.-4., až dokud relativní změny v odhadech $\boldsymbol{\beta}$ a θ jsou malé.

Odhad variogramu je vychýlený, ale tentokrát není vychýlení způsobeno nekonstantní střední hodnotou, ale tím, že odhadujeme variogram reziduí a ne pole $\{e(x) : x \in D\}$.

Studium chování této procedury je složité. Není zaručeno, že odhady budou konvergovat k teoretickým hodnotám.

Jiná možnost je použít metodu maximální věrohodnosti k odhadu $\boldsymbol{\beta}$ a θ současně.

3.5 Bayesovský přístup

Na základě pozorovaných dat \mathbf{z} je v klasickém přístupu nejlepší predikce $\mathbb{E}[Z(x_0) | \mathbf{Z} = \mathbf{z}]$ a její chyba je rovna $\text{var}[Z(x_0) | \mathbf{Z} = \mathbf{z}]$. Často nás však spíše než střední hodnota nebo rozptyl zajímá celé podmíněné rozdělení $Z(x_0)$ za podmínky $\mathbf{Z} = \mathbf{z}$, tzv. *prediktivní rozdělení* (*predictive distribution*). V bayesovském přístupu je prediktivní rozdělení rovno aposteriornímu rozdělení $Z(x_0)$.

Připomeňme, že v bayesovské statistice se parametry modelu považují za náhodné. Znamená to, že není rozdíl mezi predikcí a odhadem parametrů. Bayesovský přístup je založen na kombinaci historické informace o neznámých parametrech θ a pozorovaných dat \mathbf{z} . Informace o parametrech je určena *apriorním (prior) rozdělením* s hustotou $p(\theta)$ vzhledem k σ -konečné míře ν na parametrickém prostoru Θ . Pokud má \mathbf{Z} při daném θ hustotu $f(\mathbf{z} | \theta)$, tak *aposteriorní (posterior) rozdělení* θ za podmínky $\mathbf{Z} = \mathbf{z}$ je dáno Bayesovou větou

$$p(\theta | \mathbf{z}) = \frac{f(\mathbf{z} | \theta)p(\theta)}{\int_{\Theta} f(\mathbf{z} | \theta)p(\theta) \nu(d\theta)},$$

pokud je jmenovatel nenulový. Tento vztah se většinou zkráceně zapisuje jako $p(\theta | \mathbf{z}) \propto f(\mathbf{z} | \theta)p(\theta)$, symbol \propto značí rovnost až na multiplikativní konstantu.

Pro predikci $Z(x_0)$ dostaneme *prediktivní hustotu (predictive density)* vyintegrováním přes θ

$$f(z_0 | \mathbf{z}) = \int_{\Theta} f(z_0 | \mathbf{z}, \theta)p(\theta | \mathbf{z}) \nu(d\theta).$$

Pokud umíme spočítat aposteriorní hustoty $p(\theta | \mathbf{z})$ a $p(\theta | \mathbf{z}, z_0)$, tak lze použít vztah

$$f(z_0 | \mathbf{z}) = f(z_0 | \mathbf{z}, \theta) \frac{p(\theta | \mathbf{z})}{p(\theta | \mathbf{z}, z_0)}.$$

Příklad: Uvažujme lineární model

$$Z(x) = \mathbf{F}(x)^T \boldsymbol{\beta} + e(x),$$

kde $\mathbf{F}(x) = (f_0(x), \dots, f_p(x))^T$ je vektor vysvětlujících proměnných, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \dots, \beta_p)^T$ je vektor regresních parametrů s apriorním rozdělením $N_{p+1}(m, Q)$ a $\{e(x) : x \in D\}$ je slabě stacionární centrované gaussovské náhodné pole s kovarianční funkcí $C(h)$. Předpokládáme, že známe vektor m , matici Q i funkci C . Cílem je prostorová predikce $Z(x_0)$ na základě dat $\mathbf{Z} = (Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$. Označme C_n matici s prvky $C(x_i - x_j)$, $i, j = 1, \dots, n$, a F matici typu $n \times (p+1)$, jejíž prvky jsou $f_j(x_i)$, $i = 1, \dots, n$, $j = 0, \dots, p$. Dále předpokládejme, že Q i $F^T C_n^{-1} F$ mají plnou hodnotu. Díky konjugovanosti normálního rozdělení je aposteriorní rozdělení $\boldsymbol{\beta} | \mathbf{Z}$ mnohorozměrné normální $N_{p+1}(m^*, Q^*)$, kde

$$m^* = (Q^{-1} + F^T C_n^{-1} F)^{-1} (F^T C_n^{-1} Z + Q^{-1} m), \quad Q^* = (Q^{-1} + F^T C_n^{-1} F)^{-1}.$$

Sdružené rozdělení $(\mathbf{Z}, Z(x_0))^T$ je mnohorozměrné normální $N_{n+1}(F_{n0} \boldsymbol{\beta}, C_{n0})$, kde

$$F_{n0} = \begin{pmatrix} F \\ \mathbf{F}(x_0)^T \end{pmatrix}$$

a

$$C_{n0} = \begin{pmatrix} C_n & \mathbf{c}_n \\ \mathbf{c}_n^T & C(o) \end{pmatrix},$$

$\mathbf{c}_n = (C(x_0 - x_1), \dots, C(x_0 - x_n))^T$. Prediktivní hustotu dostaneme z vyjádření

$$f(z_0 | \mathbf{z}) = \int f(z_0 | \mathbf{z}, \boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\beta} | \mathbf{z}) d\boldsymbol{\beta},$$

přítom $p(\boldsymbol{\beta} | \mathbf{z})$ je hustota $N_{p+1}(m^*, Q^*)$ a $f(z_0 | \mathbf{z}, \boldsymbol{\beta})$ je hustota normálního rozdělení se střední hodnotou $\mathbf{F}(x_0)^T \boldsymbol{\beta} + \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} (\mathbf{z} - F \boldsymbol{\beta})$ a rozptylem $C(o) - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n$. Po přímočarém (i když poněkud zdlouhavém) výpočtu se zjistí, že prediktivní rozdělení je normální se střední hodnotou

$$(\mathbf{F}(x_0)^T - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} F) Q^* Q^{-1} m + [\mathbf{c}_n^T C_n^{-1} + (\mathbf{F}(x_0)^T - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} F) Q^* F^T C_n^{-1}] \mathbf{Z}$$

a rozptylem

$$C(o) - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} \mathbf{c}_n + (\mathbf{F}(x_0)^T - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} F) Q^* (\mathbf{F}(x_0)^T - \mathbf{c}_n^T C_n^{-1} F)^T.$$

V praxi většinou neznáme funkci C . Můžeme však použít některý z parametrických modelů (např. Matérnův), specifikovat vhodné apriorní rozdělení pro parametry kovarianční funkce a odvodit aposteriorní rozdělení.

3.6 Další témata

Transformace gaussovského modelu

I když je lineární predikce optimální v případě gaussovského modelu, může mít špatné vlastnosti, pokud jsou porušeny předpoklady normálního rozdělení. K vyrovnání se s tímto problémem se ve statistice často používá transformace dat vedoucí na normální rozdělení. Příkladem je tzv. *Boxova-Coxova transformace* (*Box-Cox transformation*)

$$g_\lambda(z) = \begin{cases} \frac{z^\lambda - 1}{\lambda}, & \lambda \neq 0, \\ \log z, & \lambda = 0. \end{cases}$$

Existují různé metody, jak odhadnout parametr λ . Rovněž je možné volit bayesovský přístup a považovat λ za náhodné.

Blokové krigování

Předpokládejme, že místo predikce $Z(x_0)$ z dat $Z(x_1), \dots, Z(x_n)$ nás zajímá předpověď průměrné hodnoty v nějaké oblasti (bloku) B

$$Z(B) = \frac{1}{|B|} \int_B Z(x) dx.$$

Analogie obyčejného krigování vede k *blokovému krigování* (*block kriging*)

$$\hat{Z}(B) = \sum_{i=1}^n \hat{\lambda}_i Z(x_i),$$

kde $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$ a optimální váhy mají tvar

$$\boldsymbol{\lambda}^T = \left(\mathbf{c}_B + \mathbf{1} \frac{\mathbf{1} - \mathbf{1}^T C_n^{-1} \mathbf{c}_B}{\mathbf{1}^T C_n^{-1} \mathbf{1}} \right)^T C_n^{-1},$$

kde $\mathbf{c}_B = (\text{cov}(Z(B), Z(x_1)), \dots, \text{cov}(Z(B), Z(x_n)))^T$. Vyjádření pomocí variogramu by vypadalo analogicky.

Podobně nás může zajímat predikce $g(Z(x_0))$, kde g je daná funkce. Dalším častým příkladem je úloha odhadu pravděpodobnosti $\mathbb{P}(Z(x_0) \leq y \mid \mathbf{Z})$, kde y je daná reálná hodnota. Mluví se pak o *indikátorovém krigování* (*indicator kriging*).

4. Prostorové modely na mřížích

4.1 Markovská náhodná pole

Nechť $L \subseteq \mathbb{R}^d$ je konečná množina, kterou budeme označovat jako *mříž* (*lattice*). Nemusí nutně jít o regulární mříž bodů jako je např. $L = \{1, 2, \dots, N\}^d$. Vrcholy mříže často reprezentují nějakou oblast (např. okresy). Počet bodů mříže budeme značit $n = |L|$.

Mějme symetrickou relaci \sim na $L \times L$. Řekneme, že dva body mříže jsou sousedé, pokud jsou v této relaci. Pro jednoduchost budeme používat následující značení: $\partial i = \{j \in L : j \sim i, j \neq i\}$, $-i = L \setminus \{i\}$ pro $i \in L$ a $-A = L \setminus A$ pro $A \subseteq L$. Množina L spolu s relací \sim generuje neorientovaný graf, jehož množina vrcholů je L a dva vrcholy $i, j \in L$ jsou spojeny hranou právě tehdy, když $i \sim j$. Opět budeme používat označení klika (viz definice 33) pro podmnožinu $A \subseteq L$, ve které jsou každé dva body sousedé.

Budeme uvažovat náhodná pole $\{Z_i, i \in L\}$ s hodnotami v $S \subseteq \mathbb{R}$. Pro $A \subseteq L$ budeme psát zkráceně $\mathbf{Z}_A = \{Z_j, j \in A\}$. Označme $p(\mathbf{z})$ hustotu náhodného pole $\{Z_i, i \in L\}$ vzhledem k σ -konečné míře ν na S^L . Proměnná $\mathbf{z} = (z_i, i \in L)$ je prvek prostoru S^L . Opět budeme zkráceně psát $\mathbf{z}_A = (z_i, i \in A)$ a dále $\mathbf{z}_A \mathbf{w}_B$ pro disjunktní A a B bude značit $(y_i, i \in A \cup B)$, přitom $y_i = z_i$, když $i \in A$, a $y_i = w_i$, když $i \in B$.

Definice 43. Náhodné pole $\{Z_i, i \in L\}$ se nazývá *markovské* vzhledem k relaci \sim , jestliže podmíněné rozdělení $Z_i \mid \mathbf{Z}_{-i}$ je stejné jako podmíněné rozdělení $Z_i \mid \mathbf{Z}_{\partial i}$. V řeči podmíněných hustot to znamená, že $p(z_i \mid \mathbf{z}_{-i}) = p(z_i \mid \mathbf{z}_{\partial i})$ pro ν -s.v. $\mathbf{z} = (z_i, i \in L) \in S^L$ splňující $p(\mathbf{z}) > 0$. Hustoty $p(z_i \mid \mathbf{z}_{\partial i})$ se nazývají *lokální charakteristiky* (*local characteristics*).

Poznámka: Markovský řetězec $\{Z_1, \dots, Z_n\}$ je jednorozměrné markovské náhodné pole ($d = 1$ a $L = \{1, \dots, n\}$) vzhledem k relaci $i \sim j \Leftrightarrow |i - j| \leq 1$ (viz cvičení).

Počet sousedů je většinou daleko menší než počet všech vrcholů mříže. Zatímco plně podmíněná rozdělení mohou být komplikována, tak lokální charakteristiky závisí jenom na sousedech daného vrcholu. Díky markovské vlastnosti je tak struktura náhodného pole jednodušší. Například u metod MCMC jsou kroky v Gibbsově výběrovém plánu typicky daleko snadnější.

U markovských řetězců pravděpodobnosti přechodu (nebo přechodové hustoty) spolu s počátečním rozdělením určují sdružené rozdělení řetězce. Nabízí se otázka, kdy systém lokálních charakteristik korektně určuje sdruženou hustotu náhodného pole. Na rozdíl od markovských řetězců nemůžeme čekat, že bychom mohli lokální charakteristiky volit libovolně tak, aby sdružená hustota existovala a byla jednoznačná (viz cvičení). Následující věta říká, že podmíněná rozdělení dobře definují sdružené rozdělení, pokud jsou odvozena ze sdružené hustoty určitého tvaru.

Věta 26. (*Hammersleyho-Cliffordova věta*) Náhodné pole s hustotou splňující $p(\mathbf{z}) > 0$ pro každé $\mathbf{z} \in S^L$ je markovské právě tehdy, když existují funkce $g_C : S^C \rightarrow \mathbb{R}^+$ takové, že

$$p(\mathbf{z}) = \prod_{C \in \mathcal{C}} g_C(\mathbf{z}_C), \quad \mathbf{z} \in S^L,$$

kde $\mathcal{C} = \{C \subseteq L : C \text{ je klika}\}$.

Důkaz: Jednodušší implikace je zprava doleva. Pokud má hustota požadovaný tvar, potom

$$p(z_i | z_{-i}) = \frac{p(\mathbf{z})}{p(\mathbf{z}_{-i})} \propto \prod_{C \in \mathcal{C}: i \in C} g_C(\mathbf{z}_C) \propto p(z_i | \mathbf{z}_{\partial i}).$$

Předpokládejme nyní, že náhodné pole je markovské. Zvolme pevně konfiguraci $\mathbf{w} \in S^L$. Zavedme

$$\Psi_A(\mathbf{z}_A) = -\log p(\mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A}) \quad \text{a} \quad \Phi_A(\mathbf{z}_A) = \sum_{B \subseteq A} (-1)^{|A|-|B|} \Psi_B(\mathbf{z}_B).$$

Z lemmatu 27 plyne, že $\Psi_A(\mathbf{z}_A) = \sum_{B \subseteq A} \Phi_B(\mathbf{z}_B)$. Pro hustotu $p(\mathbf{z})$ dostáváme

$$p(\mathbf{z}) = \exp(-\Psi_L(\mathbf{z}_L)) = \exp\left(-\sum_{B \subseteq L} \Phi_B(\mathbf{z}_B)\right) = \prod_{B \subseteq L} g_B(\mathbf{z}_B),$$

kde $g_B(\mathbf{z}_B) = \exp(-\Phi_B(\mathbf{z}_B))$. Zbývá tak ukázat, že pokud B není klika, tak $g_B = 1$, neboli $\Phi_B = 0$. Pokud B není klika, tak existují $i, j \in B$, $i \not\sim j$. Pro $A \subseteq B \setminus \{i, j\}$ označme $A_1 = A \cup \{i\}$, $A_2 = A \cup \{j\}$, $A_3 = A \cup \{i, j\}$. Potom

$$\begin{aligned} \Phi_B(\mathbf{z}_B) &= \sum_{A \subseteq B} (-1)^{|B|-|A|} \Psi_A(\mathbf{z}_A) \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} (\Psi_A(\mathbf{z}_A) - \Psi_{A_1}(\mathbf{z}_{A_1}) - \Psi_{A_2}(\mathbf{z}_{A_2}) + \Psi_{A_3}(\mathbf{z}_{A_3})) \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} \log \frac{p(\mathbf{z}_{A_1} \mathbf{w}_{L \setminus A_1}) p(\mathbf{z}_{A_2} \mathbf{w}_{L \setminus A_2})}{p(\mathbf{z}_{A_3} \mathbf{w}_{L \setminus A_3}) p(\mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A})} \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} \log \frac{p(z_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_1}) p(w_i | \mathbf{z}_{A_2} \mathbf{w}_{L \setminus A_3})}{p(z_i | \mathbf{z}_{A_2} \mathbf{w}_{L \setminus A_3}) p(w_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_1})} \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} \log \frac{p(z_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_3}) p(w_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_3})}{p(z_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_3}) p(w_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_3})} = 0. \end{aligned}$$

Využili jsme vztahu $p(z_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_1}) = p(z_i | \mathbf{z}_A \mathbf{w}_{L \setminus A_3}) = p(z_i | \mathbf{z}_{A_2} \mathbf{w}_{L \setminus A_3})$, který plyne z markovské vlastnosti plyne a toho, že $i \not\sim j$.

Poznamenejme, že $\Phi_\emptyset = \Psi_\emptyset = -\log p(\mathbf{w})$ a $g_\emptyset = e^{-\Phi_\emptyset} = p(\mathbf{w})$ je normující konstanta, která bývá obecně obtížně určitelná. □

Lemma 27. (*Möbiova inverzní formule*) *Nechť Φ, Ψ jsou reálné funkce definované na potenční množině konečné množiny L . Pak platí*

$$\Phi(A) = \sum_{B \subseteq A} (-1)^{|A|-|B|} \Psi(B) \quad \forall A \subseteq L \quad \iff \quad \Psi(A) = \sum_{B \subseteq A} \Phi(B) \quad \forall A \subseteq L.$$

Důkaz: Nejprve ukážeme implikaci zleva doprava:

$$\sum_{B \subseteq A} \Phi(B) = \sum_{B \subseteq A} \sum_{D \subseteq B} (-1)^{|B|-|D|} \Psi(D) = \sum_{D \subseteq A} \sum_{C \subseteq A \setminus D} (-1)^{|C|} \Psi(D) = \Psi(A),$$

protože součet $\sum_{C \subseteq A \setminus D} (-1)^{|C|}$ je různý od nuly pouze, když $A \setminus D = \emptyset$. To si lze uvědomit z identity $\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-1)^k = 0$ pro $n \in \mathbb{N}$, která plyne z binomické věty.

Opačná implikace se ukáže analogicky:

$$\sum_{B \subseteq A} (-1)^{|A|-|B|} \Psi(B) = \sum_{B \subseteq A} \sum_{D \subseteq B} (-1)^{|A|-|B|} \Phi(D) = \sum_{D \subseteq A} \sum_{C \subseteq A \setminus D} (-1)^{|A|-|D|-|C|} \Phi(D) = \Phi(A).$$

□

Definice 44. Rozdělení náhodného pole $\{Z_i, i \in L\}$ s hustotou

$$p(\mathbf{z}) = \exp\left(-\sum_{C \in \mathcal{C}} \Phi_C(\mathbf{z}_C)\right) \quad (14)$$

se nazývá *Gibbsovo rozdělení*. Ve statistické mechanice, kde hraje důležitou roli, se většinou zapisuje jako $p(\mathbf{z}) = \exp(-E/T)$, kde E značí celkovou energii a T teplotu. Přitom $T\Phi_C(\mathbf{z}_C)$ představuje potenciál konfigurace \mathbf{z}_C a $T\Psi_C(\mathbf{z}_C)$ energii \mathbf{z}_C .

Poznámka: Hammersleyho-Cliffordova věta říká, že každé náhodné pole s všude kladnou hustotou má Gibbsovo rozdělení, přičemž $g_C(\mathbf{z}_C) = \exp(-\Phi_C(\mathbf{z}_C))$. Místo abychom specifikovali podmíněná rozdělení přímo, lze je zkonstruovat pomocí volby potenciálových funkcí Φ_C . Protože vyjádření

$$p(\mathbf{z}) = \prod_{C \in \mathcal{C}} g_C(\mathbf{z}_C)$$

není jednoznačné, nejsou ani potenciály jednoznačné. Lokální charakteristiky lze pomocí potenciálů zapsat následovně:

$$p(z_i | \mathbf{z}_{-i}) \propto \exp\left(-\sum_{C \in \mathcal{C}: i \in C} \Phi_C(\mathbf{z}_C)\right). \quad (15)$$

Uvedme několik příkladů markovských náhodných polí.

Příklad: Nejjednodušší netriviální situaci tvoří dvouprvkový stavový prostor $S = \{0, 1\}$. V obrazové analýze představují vrcholy mříže L pixely, $z_i = 1$ označuje černou barvu a $z_i = 0$ bílou. Definujeme-li (pro $C \neq \emptyset$)

$$\Phi_C(\mathbf{z}_C) = \begin{cases} -\beta, & \text{pokud } C = \{i, j\} \text{ a } z_i = z_j, \\ 0, & \text{jinak,} \end{cases}$$

kde $\beta \geq 0$ je parametr (tzv. inverzní teplota), dostaneme sdruženou hustotu

$$p(\mathbf{z}) = \frac{1}{c(\beta)} \exp\left(\beta \sum_{\{i,j\}: i \sim j} \mathbf{1}_{[z_i=z_j]}\right),$$

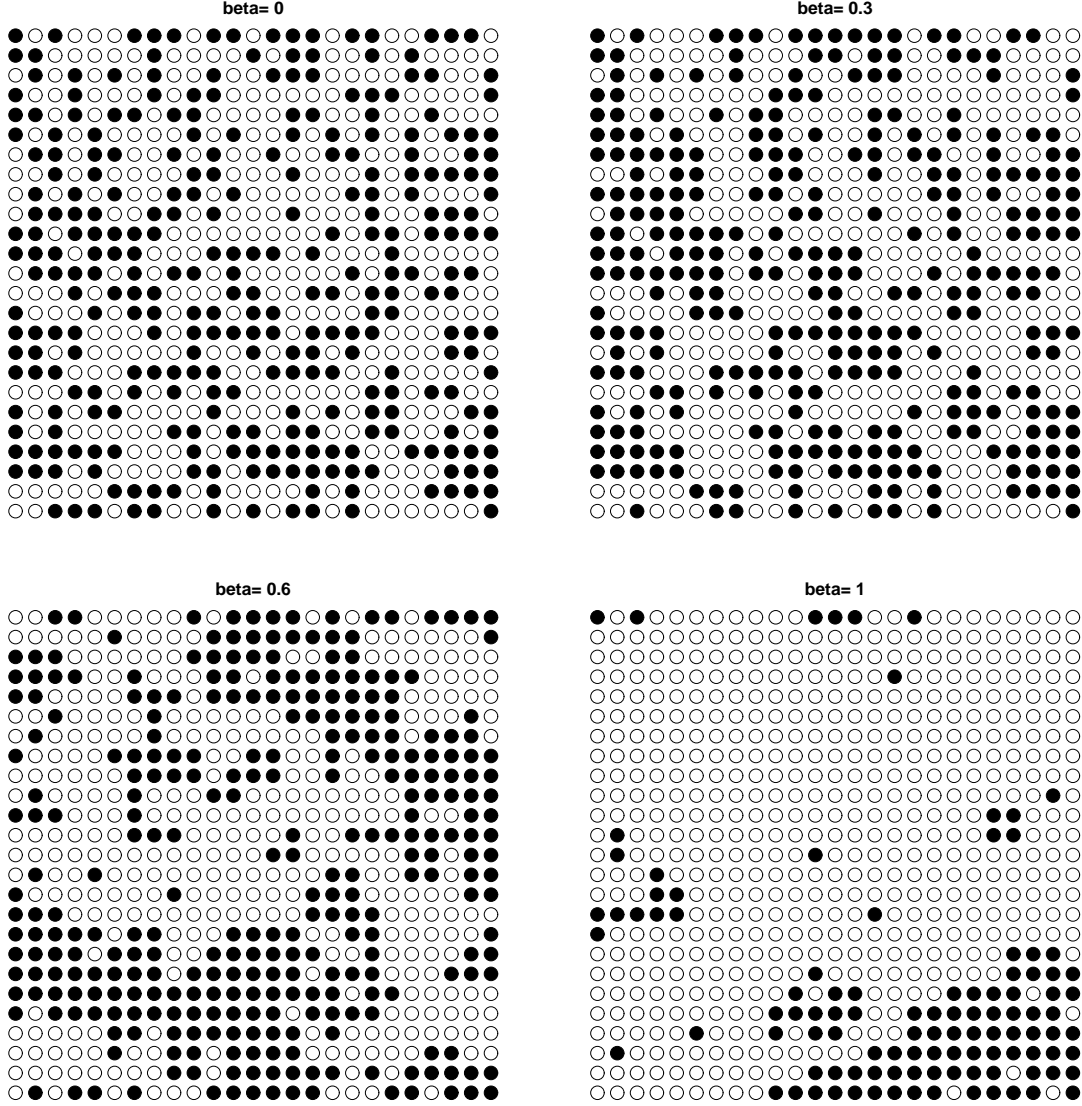
kde

$$c(\beta) = \sum_{\mathbf{z} \in \{0,1\}^L} \exp\left(\beta \sum_{\{i,j\}: i \sim j} \mathbf{1}_{[z_i=z_j]}\right) = e^{\Phi_0}$$

je normující konstanta, ve statistické fyzice se nazývá *partiční suma* (*partition sum*). Lokální charakteristiky splňují

$$p(z_i | \mathbf{z}_{\partial i}) = \frac{\exp\left(\beta \sum_{j \in \partial i} \mathbf{1}_{[z_j=z_i]}\right)}{\exp\left(\beta \sum_{j \in \partial i} \mathbf{1}_{[z_j=1]}\right) + \exp\left(\beta \sum_{j \in \partial i} \mathbf{1}_{[z_j=0]}\right)}.$$

Pro $\beta = 0$ má každá konfigurace stejnou pravděpodobnost, jedná se o náhodné přiřazení 0 a 1 vrcholům mříže. Pro $\beta > 0$ má větší pravděpodobnost konfigurace, kde se sousedi přitahují. Pravděpodobnost, že daný pixel je černý za předpokladu, že má k černých sousedů je úměrná hodnotě $e^{\beta k}$. Pro $\beta \rightarrow \infty$ převládá v celé konfiguraci jeden stav. Na obrázku 16 jsou nasimulované realizace náhodného pole na pravidelné mříži 25×25 pro různé volby parametru β .



Obrázek 16. Simulace náhodného pole na pravidelné mříži 25×25 pro $\beta \in \{0; 0,3; 0,6; 1\}$.

Takto definované náhodné pole se nazývá *Isingův model* (*Ising model*) [6]. Ve statistické fyzice se využívá jako základní model pro feromagnetismus. Hodnoty ve vrcholech mříže reprezentují spiny, většinou se používá $+1$ pro orientaci nahoru a -1 pro orientaci dolů.

Isingův model (i obecnější markovská náhodná pole) lze rozšířit na nekonečnou mříž. Problém je, že množina všech konfigurací je potom nespočetná a vyjádření (14) tak nemá smysl. Lze však stále uvažovat lokální charakteristiky (pokud každý vrchol má konečně sousedů) tvaru (15). Gibbsovo rozdělení se dá definovat tak, že jeho podmíněná rozdělení jsou dané lokální charakteristiky. Otázkou zůstává, jak je to s existencí a jednoznačností takto definovaného rozdělení. Ukazuje se, že Gibbsovo rozdělení na nekonečné mříži existuje (pokud množina stavů je kompaktní), ale není obecně jednoznačné. V tom případě se mluví o *fázovém přechodu* (*phase transition*). Pro konkrétnost uvažujme pravidelnou rovinnou mříž $L_N = \{-N, \dots, N\}^2$. Zajímá nás chování Isingova modelu pro $N \rightarrow \infty$, tj. $L_N \nearrow \mathbb{Z}^2$. Existuje kritická hodnota $\beta_c = \log(1 + \sqrt{2}) \doteq 0,881$ (analyticky spočtena Onsagerem [10]), při které dochází k fázovému přechodu. Pro $\beta \leq \beta_c$ je Gibbsovo rozdělení jednoznačné, pro $\beta > \beta_c$ není jednoznačné. V případě $\beta > \beta_c$ hodnoty na hranici mříže L_N ovlivňují marginální rozdělení $Z_{(0,0)}$, když $N \rightarrow \infty$, v konfiguraci jsou interakce dalekého dosahu, fyzikálně to znamená, že částice je magnetizována.

Pokud bychom v definici Φ_C připustili nenulové hodnoty pro jednobodové kliky ($\Phi_{\{i\}}(z_i) = -\beta h_i$), tak celková energie je

$$E = - \sum_{i \in L} h_i - \sum_{\{i,j\}: i \sim j} \mathbf{1}_{[z_i = z_j]}$$

a sdružená hustota $p(\mathbf{z}) = \exp(-E/T) = \exp(-\beta E)$. Fyzikálně lze hodnoty h_i interpretovat jako vliv vnějšího magnetického pole. Další možné zobecnění je připustit, že síla interakce závisí na poloze nebo hodnotě pole v daném místě. Znamená to, že β je pak funkcí i, j, z_i a z_j . Také se dají uvažovat i interakce vyšších řádů než jen párové.

Přes jednoduchou lokální strukturu je Isingův model celkem komplikovaný. Sdružená hustota obsahuje výpočetně složitou normující konstantu, takže například simulovat realizace modelu přímo je prakticky nemožné a je třeba využít metod MCMC.

Příklad: Vícebarevným zobecněním Isingova modelu je *Pottsův model (Potts model)*. Nechť

$$S = \{0, 1, \dots, n_c - 1\},$$

kde $n_c > 2$ určuje počet barev. Potenciálové funkce Φ_C jsou definovány stejně jako v Isingově modelu. Lokální charakteristiky jsou

$$p(z_i | \mathbf{z}_{\partial i}) = \frac{\exp\left(\beta \sum_{j \in \partial i} \mathbf{1}_{[z_j = z_i]}\right)}{\sum_{k=0}^{n_c-1} \exp\left(\beta \sum_{j \in \partial i} \mathbf{1}_{[z_j = k]}\right)}, \quad z_i \in \{0, \dots, n_c - 1\}.$$

Příklad: V Pottsově modelu nezáleží na uspořádání barev (prvků množiny S). Pokud by ale stavy představovaly různé odstíny šedé, kde hraje uspořádání roli, nabízí se například model s následujícími lokálními charakteristikami

$$\begin{aligned} p(z_i | \mathbf{z}_{\partial i}) &= \binom{n_c - 1}{z_i} \pi(\mathbf{z}_{\partial i})^{z_i} (1 - \pi(\mathbf{z}_{\partial i}))^{n_c - 1 - z_i} \\ &= \binom{n_c - 1}{z_i} (1 - \pi(\mathbf{z}_{\partial i}))^{n_c - 1} \exp\left\{z_i \log\left(\frac{\pi(\mathbf{z}_{\partial i})}{1 - \pi(\mathbf{z}_{\partial i})}\right)\right\}, \end{aligned}$$

kde $\pi(\mathbf{z}_{\partial i})$ jsou předepsané pravděpodobnosti. Znamená to, že $Z_i | \mathbf{Z}_{\partial i} = \mathbf{z}_{\partial i}$ má binomické rozdělení s parametry $n_c - 1$ a $\pi(\mathbf{z}_{\partial i})$. Předpokládáme-li, že $\pi(\mathbf{z}_{\partial i})$ splňují

$$\log\left(\frac{\pi(\mathbf{z}_{\partial i})}{1 - \pi(\mathbf{z}_{\partial i})}\right) = -\beta_i - \sum_{j \in \partial i} \beta_{ij} z_j, \quad (16)$$

dostáváme markovské náhodné pole s potenciály $\Phi_{\{i\}}(z_i) = \beta_i z_i - \log \binom{n_c - 1}{z_i}$, $\Phi_{\{i,j\}}(z_i z_j) = \beta_{ij} z_i z_j$ a $\Phi_C(\mathbf{z}_C) = 0$ pro $|C| > 2$. Vztah (16) je analogický k modelu logistické regrese. Protože veličiny Z_i , $i \in L$, jsou na levé i pravé straně v (16), mluví se o *autologistickém modelu (autologistic model)*.

Příklad: Přejdeme nyní ke spočetné množině hodnot: $S = \mathbb{N}_0$. V praxi se tato situace vyskytuje, pokud data určují počty nějakých událostí, např. počty případů jisté nemoci v daném místě. Uvažujme model, kdy tyto počty mají Poissonovo rozdělení s intenzitou $\lambda(\mathbf{z}_{\partial i})$ závislou na počtech v okolních místech:

$$p(z_i | \mathbf{z}_{\partial i}) = \exp(-\lambda(\mathbf{z}_{\partial i})) \frac{\lambda(\mathbf{z}_{\partial i})^{z_i}}{z_i!} = \exp(-\lambda(\mathbf{z}_{\partial i}) + z_i \log \lambda(\mathbf{z}_{\partial i}) - \log z_i!).$$

Tyto lokální charakteristiky se nazývají *auto-Poissonovy (auto-Poisson)*. Abychom dostali Gibbsovo rozdělení náhodného pole, požadujeme

$$\log \lambda(\mathbf{z}_{\partial i}) = -\beta_i - \sum_{j \in \partial i} \beta_{ij} z_j.$$

Musíme však ještě zajistit konečnost normující konstanty

$$\sum_{\mathbf{z} \in S^L} \exp\left(-\sum_{i \in L} (\log z_i! + \beta_i z_i) - \sum_{\{i,j\} \in \mathcal{C}} \beta_{ij} z_i z_j\right).$$

Dá se ukázat, že suma je konečná právě tehdy, když $\beta_{ij} \geq 0$ pro všechna $i, j \in L$ (viz cvičení). Podmínka $\beta_{ij} \geq 0$ znamená, že velké hodnoty sousedů místa i znamenají malé hodnoty v i . Proto je praktické použití auto-Poissonova modelu omezené.

4.2 Gaussovské modely

Nejznámějším příkladem markovských náhodných polí se spojitými hodnotami jsou gaussovská markovská náhodná pole.

Definice 45. Necht $\mathbf{Z} = \{Z_i, i \in L\}$ má n -rozměrné normální rozdělení se střední hodnotou $\boldsymbol{\mu}$ a regulární varianční maticí Σ . Označme q_{ij} prvky matice $Q = \Sigma^{-1}$ a definujme relaci sousedství předpisem $i \sim j \Leftrightarrow q_{ij} \neq 0$. Řekneme, že \mathbf{Z} je *gaussovské markovské náhodné pole* (*Gaussian Markov random field*), jestliže je markovské vzhledem k relaci \sim .

Sdružená hustota gaussovského markovského náhodného pole má tvar

$$p(\mathbf{z}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det \Sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})\right), \quad \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n.$$

Označíme-li dále $\mathbf{r} = \Sigma^{-1}\boldsymbol{\mu} = Q\boldsymbol{\mu}$, tak podmíněná rozdělení $Z_i \mid \mathbf{Z}_{\partial i}$ jsou normální se střední hodnotou

$$\frac{r_i}{q_{ii}} - \frac{1}{q_{ii}} \sum_{j \in \partial i} q_{ij} z_j = \mu_i - \frac{1}{q_{ii}} \sum_{j \in \partial i} q_{ij} (z_j - \mu_j)$$

a rozptylem $\frac{1}{q_{ii}}$.

Věta 28. Necht $\mathbf{Z} = \{Z_i, i \in L\}$ je gaussovské markovské náhodné pole. Potom pro $i \neq j$ jsou Z_i a Z_j podmíněně nezávislé při $\mathbf{Z}_{-\{i,j\}}$ právě tehdy, když $i \not\sim j$ (neboli $q_{ij} = 0$).

Důkaz: Připomeňme, že podmíněná nezávislost Z_i a Z_j při daném $\mathbf{Z}_{-\{i,j\}}$ znamená, že $p(z_i, z_j \mid \mathbf{z}_{-ij}) = p(z_i \mid \mathbf{z}_{-ij})p(z_j \mid \mathbf{z}_{-ij})$. Přitom sdružené rozdělení Z je normální, a proto i podmíněné hustoty jsou hustoty normálního rozdělení. Ze vztahu pro sdruženou hustotu

$$p(\mathbf{z}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det \Sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{k,l} (z_k - \mu_k) q_{kl} (z_l - \mu_l)\right)$$

zjistíme, že

$$p(z_i, z_j \mid \mathbf{z}_{-ij}) \propto \exp\left(- (z_i - \mu_i)(z_j - \mu_j) q_{ij} - \sum_{k \neq j} (z_i - \mu_i)(z_k - \mu_k) q_{ik} - \sum_{l \neq i} (z_j - \mu_j)(z_l - \mu_l) q_{jl}\right).$$

Pokud $q_{ij} = 0$, potom

$$p(z_i, z_j \mid \mathbf{z}_{-ij}) \propto \exp\left(- \sum_{k \neq j} (z_i - \mu_i)(z_k - \mu_k) q_{ik}\right) \exp\left(- \sum_{k \neq i} (z_j - \mu_j)(z_k - \mu_k) q_{jk}\right),$$

kde první člen je až na normující konstantu $p(z_i \mid \mathbf{z}_{-ij})$ a druhý $p(z_j \mid \mathbf{z}_{-ij})$. Obráceně, pokud $p(z_i, z_j \mid \mathbf{z}_{-ij}) = p(z_i \mid \mathbf{z}_{-ij})p(z_j \mid \mathbf{z}_{-ij})$, nevystupuje na pravé straně vyjádření $p(z_i, z_j \mid \mathbf{z}_{-ij})$ člen s $(z_i - \mu_i)(z_j - \mu_j)$, tudíž $q_{ij} = 0$. □

Gaussovské markovské náhodné pole je tak gaussovské pole za dodatečných markovských vlastností (veličiny odpovídající nesousedním vrcholům jsou podmíněně nezávislé). Relaci sousedství je možno specifikovat pomocí inverze varianční matice (*precision matrix*). Jednoduchým příkladem gaussovského markovského náhodného pole je gaussovská autoregresní posloupnost řádu 1 (viz cvičení). Více informací o teorii i aplikacích gaussovských markovských náhodných polí lze nalézt v monografii [13].

Kromě přístupu přes podmíněná rozdělení je možné uvažovat prostorové gaussovské modely, při kterých je náhodné pole definováno souběžně. Motivací je zobecnění modelu autoregresní posloupnosti z časových náhodných procesů. Necht $\boldsymbol{\varepsilon} = \{\varepsilon_i, i \in L\}$ je posloupnost nezávislých náhodných veličin s normálním rozdělením $N(0, \sigma^2)$. Mějme matici $B = (b_{ij})_{i,j \in L}$ s nulovými diagonálními prvky ($b_{ii} = 0$

pro každé $i \in L$) a předpokládejme, že $(I - B)^{-1}$ existuje. Matice B nemusí být nutně symetrická. Definujeme náhodné pole $\mathbf{Z} = \{Z_i, i \in L\}$ předpisem

$$(I - B)(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (17)$$

Zřejmě $\mathbb{E}\mathbf{Z} = \boldsymbol{\mu}$ a varianční matice \mathbf{Z} je $\mathbb{E}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu})^T = \sigma^2(I - B)^{-1}(I - B^T)^{-1}$. Protože \mathbf{Z} je lineární kombinací $\boldsymbol{\varepsilon}$, je rozdělení \mathbf{Z} gaussovské. Vztah (17) lze ekvivalentně přepsat

$$Z_i - \mu_i = \sum_{j \in L} b_{ij}(Z_j - \mu_j) + \varepsilon_i, \quad i \in L.$$

Odtud je vidět analogie s autoregresním modelem časových řad. Prvky matice B určují prostorové závislosti. Pokud $b_{ij} = 0$, tak Z_i a Z_j jsou podmíněně nezávislé za $Z_{-\{i,j\}}$. Sdružená hustota má tvar

$$p(\mathbf{z}) = \frac{\det(I - B)}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T(I - B^T)(I - B)(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})\right), \quad \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n.$$

Pro odhad parametrů $\boldsymbol{\mu}$, B a σ^2 se tak nabízí použití metody maximální věrohodnosti. Všimněme si, že $\text{cov}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{Z}) = \sigma^2(I - B^T)^{-1}$, což není diagonální matice (na rozdíl od časové autoregresní posloupnosti).

Podobně se dá uvažovat zobecnění modelu klouzavých součtů nebo ARMA modelů na prostorové modely.

4.3 Statistická analýza

V minulých dvou podkapitolách jsme se věnovali modelům. Nyní nás bude zajímat jejich statistická analýza. Zaměříme se na míru prostorové korelace a odhad parametrů modelů z pozorovaných dat.

Míra prostorové autokorelace

Jak už sám název napovídá, označují *prostorové autokorelace (spatial autocorrelation)* v náhodném poli $\{Z_i, i \in L\}$ korelace mezi dvojicemi veličin Z_i a Z_j pro $i, j \in L$. Zavedeme některé statistické míry, které slouží k posouzení, do jaké míry jsou prostorová data korelována.

Typicky se prostorové autokorelace projevují především u veličin odpovídajícím místům, které jsou v prostoru „blízko“ sobě. U markovských náhodných polí je „blízkost“ v prostoru vyjádřena pomocí relace \sim . Každé dvojici (i, j) bodů mříže L přiřadíme nezápornou váhu w_{ij} . Požadujeme přitom, aby $w_{ij} = 0$, pokud $i = j$ nebo $i \not\sim j$. Váhy w_{ij} se označují jako *prostorové blízkostní váhy (spatial proximity weights, spatial connectivity weights)*. Nejjednodušším příkladem jsou *binární váhy (binary weights)*

$$w_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{pokud } i \sim j, i \neq j, \\ 0, & \text{jinak.} \end{cases}$$

Dalším používaným příkladem jsou následující prostorové váhy

$$w_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{|\partial i|}, & j \in \partial i, \\ 0, & j \notin \partial i, \end{cases}$$

kde $|\partial i|$ značí počet prvků množiny ∂i . Všimněme si, že nevyžadujeme symetrii, nemusí tedy platit $w_{ij} = w_{ji}$. Označme W matici, jejíž prvky jsou w_{ij} , $i, j \in L$.

Uvažujme nejprve binární náhodná pole. Množina stavů $S = \{0, 1\}$ je dvouprvková. Stav většinou představují to, zda v daném místě i sledovaný jev nastal ($Z_i = 1$) nebo ne ($Z_i = 0$). V analýze obrazu typicky hodnota 1 odpovídá černé barvě pixelu i a hodnota 0 bílé barvě.

Definice 46. Nechť $\mathbf{Z} = (Z_i, i \in L)$ je náhodné pole s množinou stavů $S = \{0, 1\}$. Definujeme tzv. *Black-Black join count statistic* jako

$$BB = \frac{1}{2} \sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij} Z_i Z_j$$

a *Black-White join count statistic* jako

$$BW = \frac{1}{2} \sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij} (Z_i - Z_j)^2.$$

Poznámka: Pro binární váhy je BB počet dvojic sousedů, které mají oba černou barvu. Obdobně BW je počet dvojic sousedů takových, že jeden má černou a druhý bílou barvu.

Předpokládejme, že z n bodů mříže je jich m černých (náhodné pole nabývá hodnoty 1) a $n-m$ bílých (náhodné pole nabývá hodnoty 0). Situaci, kdy neexistují prostorové autokorelace v datech, si můžeme představit tak, že černé a bílé hodnoty jsou bodům mříže přiřazeny zcela náhodně. Samozřejmě existuje mnoho způsobů, jak toto náhodné přiřazení provést. Nejpřirozenější jsou binomický a hypergeometrický výběrový model. Při binomickém předpokládáme, že $\mathbb{P}(Z_i = 1) = \pi = m/n$, potom počet černých vrcholů má binomické rozdělení s parametry n a π . Zřejmě platí $\mathbb{E}BB = \frac{1}{2}\pi^2 w$ a $\mathbb{E}BW = \pi(1-\pi)w$, kde $w = \mathbf{1}^T W \mathbf{1} = \sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij}$. Pokud chceme zaručit, že počet černých vrcholů bude právě m , je vhodný hypergeometrický výběr. V tom případě $\mathbb{P}(Z_i = 1) = m/n$ a $\mathbb{P}(Z_i = 1, Z_j = 1) = \frac{m(m-1)}{n(n-1)}$, a proto

$$\mathbb{E}BB = \frac{w}{2} \cdot \frac{m(m-1)}{n(n-1)}.$$

Vzorečky pro rozptyl v obou modelech jsou o něco komplikovanější (viz [4]). Za předpokladu, že

$$\frac{BB - \mathbb{E}BB}{\sqrt{\text{var } BB}} \quad \text{a} \quad \frac{BW - \mathbb{E}BW}{\sqrt{\text{var } BW}}$$

mají asymptoticky normální rozdělení, můžeme sestavit asymptotický test hypotézy, že Z_i jsou nekorelované. Pokud statistika BB spočtená z dat je výrazně větší než $\mathbb{E}BB$ svědčí to pro pozitivní autokorelace, sousední vrcholy mříže mají tendenci mít stejnou barvu. Naopak velké hodnoty BW odpovídají negativním autokorelacím, neboť sousední vrcholy mříže jsou spíše odlišné barvy. Pro realizace Isingova modelu z obrázku 16 jsou hodnoty BW postupně (s rostoucím β) 588, 489, 352 a 133. Přitom teoretická střední hodnota pro případ $\beta = 0$ (nulové prostorové autokorelace – nezávislé rovnoměrně náhodné přiřazení 0 a 1 vrcholům mříže) je 600. S rostoucím β se výrazněji projevují pozitivní prostorové autokorelace.

Pro spojitá data se jako míra podobnosti veličin v místech i a j nejčastěji používá $(Z_i - \bar{Z})(Z_j - \bar{Z})$ nebo $(Z_i - Z_j)^2$. Spojením příspěvků těchto veličin přes všechny dvojice sousedů a normováním odhadem rozptylu dostaneme následující indexy.

Definice 47. Nechť $\{Z_i, i \in L\}$ je náhodné pole s konstantní střední hodnotou $\mathbb{E}Z_i = \mu$ a konstantním rozptylem $\text{var } Z_i = \sigma^2$. *Moranův index (Moran's I)* je definován předpisem

$$I = \frac{n}{w} \frac{\sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij} (Z_i - \bar{Z})(Z_j - \bar{Z})}{\sum_{i \in L} (Z_i - \bar{Z})^2}.$$

Gearyho index (Geary's c) je dán vztahem

$$c = \frac{n-1}{2w} \frac{\sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij} (Z_i - Z_j)^2}{\sum_{i \in L} (Z_i - \bar{Z})^2}.$$

Veličiny z předchozí definice se používají při testování hypotézy, že v datech jsou nulové prostorové autokorelace. Označme M jednu z definovaných testových statistik (Moranův nebo Gearyho index) a M_{obs} tuto testovou statistiku spočtenou z dat. Pro testování se obvykle používá některý z následujících čtyřech přístupů.

1. *permutační test (permutation test):* Nulovou hypotézu nepřítomnosti prostorových autokorelací chápeme tak, že pozorovaným hodnotám $Z_i, i \in L$, jsou body mříže přiřazeny zcela náhodně. Pro n vrcholů mříže máme celkem $n!$ možných přiřazení. Spočteme-li veličinu M pro $n!$ přiřazení, dostaneme její rozdělení za nulové hypotézy. Potom je možné zjistit pravděpodobnost, že hodnota M_{obs} bude překročena. Velké nebo malé hodnoty této pravděpodobnosti svědčí proti nulové hypotéze (při oboustranném testu). U tohoto přístupu založeného na znáhodnění (*randomization approach*) také můžeme z rozdělení testové statistiky za nulové hypotézy určit její střední hodnotu a rozptyl, označme je $\mathbb{E}_r M$ a $\text{var}_r M$.
2. *Monte Carlo test (Monte-Carlo test):* I pro ne moc velká n je počet možných permutací velký. Místo výpočtu pro všechna přiřazení můžeme generovat k náhodných přiřazení a sestavit empirické rozdělení M za nulové hypotézy. Čím větší k , tím lepší je aproximace rozdělení za nulové hypotézy.

Spojíme k získaných hodnot s M_{obs} a spočteme pořadí M_{obs} . Pro extrémní hodnoty pořadí je hypotéza nekorelovanosti zamítnuta. Například pro $k = 999$ zamítneme hypotézu na hladině 5%, pokud pořadí M_{obs} je mezi 1 a 25 nebo mezi 976 a 1000.

3. *Asymptotický test založený na normálním rozdělení (asymptotic test with Gaussian assumption):* Rozdělení M je možné určit za předpokladu, že známe rozdělení Z . Typickým předpokladem je normální rozdělení s konstantní střední hodnotou a konstantním rozptylem. Uvažujeme nulovou hypotézu tvaru $\text{cov}(Z_i, Z_j) = 0$ pro $i \neq j$. Pak není těžké vyjádřit střední hodnotu a rozptyl M za nulové hypotézy, označme je $\mathbb{E}_g M$ a $\text{var}_g M$. Vzhledem k tomu, že často lze ukázat asymptotickou normalitu zvolené testové statistiky, stačí porovnat

$$\frac{M_{obs} - \mathbb{E}_g M}{\sqrt{\text{var}_g M}}$$

s kvantily normovaného normálního rozdělení.

4. *Asymptotický test založený na znáhodnění (asymptotic test under randomization):* V tomto případě porovnáváme

$$\frac{M_{obs} - \mathbb{E}_r M}{\sqrt{\text{var}_r M}}$$

s kvantily normovaného normálního rozdělení. Přitom $\mathbb{E}_r M$ a $\text{var}_r M$ jsou získané z přístupu založeného na znáhodnění (jako v permutačním nebo Monte Carlo testu).

Dá se ukázat, že $\mathbb{E}_g I = \mathbb{E}_r I = -\frac{1}{n-1}$ a $\mathbb{E}_g c = \mathbb{E}_r c = 1$. Vyjádření rozptylu za předpokladu normality a znáhodnění se už ovšem liší (viz [4]). Moranovu a Gearyho statistiku lze interpretovat následovně: pokud $I > \mathbb{E}I$ nebo $c < \mathbb{E}c$, tak vrchol mříže má tendenci být spojen s vrcholem mříže, který má podobnou hodnotu pole, prostorová autokorelace je kladná. Naopak, pokud $I < \mathbb{E}I$ nebo $c > \mathbb{E}c$, mají hodnoty ve dvou sousedních vrcholech mříže tendenci být odlišné. Můžeme tak uvažovat jednostranné testy proti alternativě, že autokorelace je kladná nebo naopak záporná.

Předpoklad konstantní střední hodnoty a konstantního rozptylu náhodného pole je důležitý. Jinak by totiž hodnoty v blízkých místech mohly být podobné ne kvůli kladné prostorové autokorelaci, ale proto, že se jedná o nezávislé realizace z rozdělení s podobnou střední hodnotou. Podobně hodnoty v bodech, které jsou v prostoru vzdálené, by se mohly jevit odlišné proto, že se mění střední hodnota náhodného pole.

Odhad parametrů

Uvažujme markovské náhodné pole $\{Z_i : i \in L\}$ s hustotou $p_\theta(\mathbf{z})$ parametrizovanou konečně rozměrným vektorem θ . Pro diskrétní data je hustota $p_\theta(\mathbf{z})$ rovna sdružené pravděpodobnosti $\mathbb{P}(Z_i = z_i, i \in L)$, $\mathbf{z} = (z_i, i \in L)$. Pro spojitá data jde o sdruženou hustotu vzhledem k n -rozměrné Lebesgueově míře.

Pro odhad parametrů je ve statistice nejpoužívanějším postupem metoda maximální věrohodnosti. Pro daná data $\mathbf{z} = (z_i, i \in L)$ hledáme hodnotu θ , která maximalizuje věrohodnostní funkci $L(\theta) = p_\theta(\mathbf{z})$.

Pro markovské náhodné pole s Gibbsovým rozdělením je

$$L(\theta) = p_\theta(\mathbf{z}) = \exp\left(-\sum_{C \in \mathcal{C}} \Phi_C(\mathbf{z}_C, \theta)\right) = \frac{\exp\left(-\sum_{C \in \mathcal{C}: C \neq \emptyset} \Phi_C(\mathbf{z}_C, \theta)\right)}{\int \exp\left(-\sum_{C \in \mathcal{C}: C \neq \emptyset} \Phi_C(\mathbf{z}_C, \theta)\right) \nu(d\mathbf{z})}.$$

Problém je, že normující konstanta závisí na θ a obvykle je velmi komplikovaná. Existují metody, kterými je možné normující konstantu aproximovat pomocí simulací (většinou MCMC), a potom maximalizovat takto aproximovanou věrohodnost.

Jednodušší možnost je uvažovat tzv. *pseudověrohodnost (pseudolikelihood)*

$$L_P(\theta) = \prod_{i \in L} p_\theta(z_i | \mathbf{z}_{\partial i}) = \prod_{i \in L} \frac{\exp\left(-\sum_{C \in \mathcal{C}: C \neq \emptyset, i \in C} \Phi_C(\mathbf{z}_C, \theta)\right)}{c(\mathbf{z}_{\partial i}, \theta)}.$$

Tentokrát lze normující konstantu $c(\mathbf{z}_{\partial i}, \theta)$ často vyjádřit (v diskrétním případě jde o sumu $|S|$ členů). Pokud bychom očíslovali prvky L pomocí $1, \dots, n$, tak věrohodnost lze zapsat jako

$$L(\theta) = p_\theta(z_1 | z_2, \dots, z_n) p_\theta(z_2 | z_3, \dots, z_n) \cdots p_\theta(z_{n-1} | z_n) p_\theta(z_n).$$

Když nahradíme podmíněné hustoty $p_\theta(z_k | z_{k+1}, \dots, z_n)$ plně podmíněnými hustotami $p_\theta(z_k | \mathbf{z}_{-k})$, které jsou díky markovské vlastnosti rovny $p_\theta(z_k | z_{\partial k})$, dostaneme pseudověrohodnost $L_P(\theta)$.

Odhad metodou maximální pseudověrohodnosti patří do třídy odhadů, které jsou ve statistice označovány jako M -odhady. Obecně je M -odhad parametru θ řešením úlohy maximalizace kontrastní funkce $\varrho(\mathbf{Z}, \theta)$. V klasické situaci maximální věrohodnosti pro posloupnost nezávislých stejně rozdělených náhodných veličin je

$$\varrho(\mathbf{z}, \theta) = \sum_{i=1}^n \log p_\theta(z_i, \theta).$$

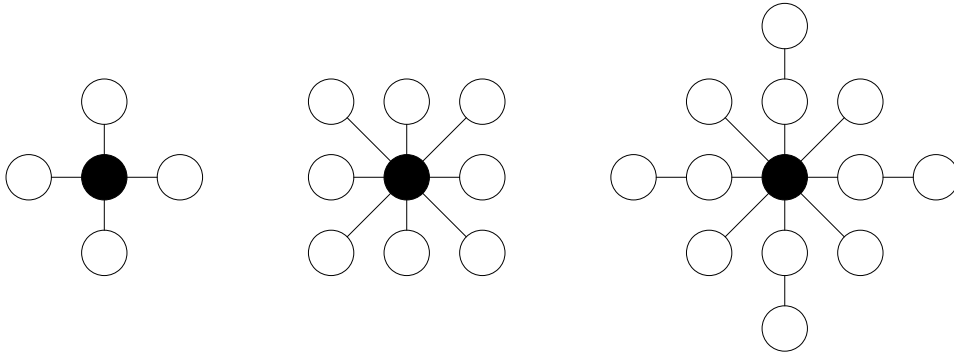
V našem případě je

$$\varrho(\mathbf{z}, \theta) = \sum_{i \in L} \log p_\theta(z_i | \mathbf{z}_{\partial i}).$$

4.4 Rekonstrukce obrázků

Na závěr krátce zmíníme použití náhodných polí na mřížích v analýze obrazu (image analysis). V některých oborech (např. medicínská diagnostika, astronomie nebo materiálové vědy) jsou častá data ve formě obrázků (ať už satelitních nebo mikroskopických). Můžeme rozlišit dva základní typy úloh ve zpracování obrazu. První druh je označován jako *low level tasks*. Cílem je snaha o vylepšení kvality obrázku pomocí lokálních akcí (např. odstranění šumu v satelitních obrázcích). Úlohy, které berou do úvahy globální vlastnosti obrázku, se nazývají *high level tasks*. Jde např. o lokalizování nebo rozeznání zadaných objektů v obrázku.

Obrázek je možné nejčastěji popsat pomocí náhodného pole na pravidelné rovinné mříži. Vrcholy mříže jsou pixely. Jako struktura sousedství se typicky volí 4, 8 nebo 12 nejbližších sousedů (viz obrázek 17).



Obrázek 17. Znázornění tří různých voleb relace sousedství v pravidelné rovinné mříži.

Budeme se zabývat problémem rekonstrukce obrázku (image restoration). Nechť $\mathbf{Z} = \{Z_i, i \in L\}$ je původní neporušený obrázek, který ovšem není pozorovatelný. Místo toho pozorujeme rozmazaný obrázek $\mathbf{Y} = \{Y_i, i \in L\}$. Souvislost mezi \mathbf{Z} a \mathbf{Y} je dána vztahem

$$Y_i = \sum_{j \in L} \gamma(i, j) Z_j + \varepsilon_i, \quad i \in L,$$

kde γ je tzv. *bodová rozšiřovací funkce (point spread function)* a $\{\varepsilon_i, i \in L\}$ jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny, nezávislé na \mathbf{Z} . Předpokládejme, že $\gamma(i, j) = \gamma(i - j)$ a $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma_\varepsilon^2)$. Označme $N_i = \{j \in L : \gamma(i, j) \neq 0\}$. Potom podmíněná hustota $\mathbf{Y} | \mathbf{Z}$ má tvar

$$f(\mathbf{y} | \mathbf{z}) = \prod_{i \in L} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\varepsilon^2}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma_\varepsilon^2} \left(y_i - \sum_{j \in N_i} \gamma(i, j) z_j \right)^2 \right] = \prod_{i \in L} f(y_i | z_{N_i}).$$

Speciálním případem je situace, kdy obrázek \mathbf{Z} není rozmazán pomocí funkce γ , pouze se projevuje aditivní gaussovský šum, signál \mathbf{Y} má pak tvar $Y_i = Z_i + \varepsilon_i, i \in L$.

Rekonstrukce obrázku \mathbf{Z} z pozorování \mathbf{Y} je příkladem inverzního problému. Z pozorovaných dat $\mathbf{y} = (y_i, i \in L)$ chceme získat parametry modelu. Pokud bychom neznámé hodnoty $\mathbf{z} = (z_i, i \in L)$ považovali za neznámé parametry, dostaneme metodou maximální věrohodnosti odhad $\hat{\mathbf{z}}$, který maximalizuje funkci

$$l(\mathbf{z}) = \sum_{i \in L} \log f(y_i | z_{N_i}).$$

To ale nevede k použitelnému odhadu, protože počet neznámých parametrů je stejný jako počet pozorování. Například pro situaci $Y_i = Z_i + \varepsilon_i$ máme

$$\log f(y_i | z_i) = -\frac{1}{2\sigma_\varepsilon^2} \sum_{i \in L} (y_i - z_i)^2 - \frac{1}{2} \log 2\pi\sigma_\varepsilon^2,$$

a proto maximálně věrohodný odhad je $\hat{z}_i = y_i$.

Nejsmyslnější přístup k rekonstrukci obrázku je využití apriorní informace. Dá se očekávat, že sousední hodnoty si budou podobné. To vede k bayesovskému přístupu. Uvažujme proto apriorní rozdělení pole \mathbf{Z} , které je dané hustotou $p(\mathbf{z})$. Z Bayesovy věty pak dostáváme aposteriorní rozdělení

$$p(\mathbf{z} | \mathbf{y}) \propto p(\mathbf{z}) \prod_{i \in L} f(y_i | z_{N_i}).$$

Jako odhad \mathbf{z} můžeme použít modus tohoto aposteriorního rozdělení (zkráceně MAP – *maximum a posteriori*), neboli hodnotu $\hat{\mathbf{z}}$, pro kterou nabývá funkce $\log p(\mathbf{z} | \mathbf{y}) = \log p(\mathbf{z}) + l(\mathbf{z}) + c$ svého maxima. Jiná možnost je odhadnout \mathbf{z} pomocí aposteriorní střední hodnoty

$$\hat{z}_i = \mathbb{E}[Z_i | \mathbf{Y} = \mathbf{y}] = \int \cdots \int z_i p(\mathbf{z} | \mathbf{y}) \prod_{j \in L} dz_j.$$

Rozdíl mezi maximalizací logaritmicke věrohodnostní funkce $l(\mathbf{z})$ a logaritmu aposteriorní hustoty je ve členu $\log p(\mathbf{z})$. Znamená to, že konfigurace s nižší apriorní hustotou jsou penalizovány.

Vhodnou volbou apriorního rozdělení je markovské náhodné pole se speciálním Gibbsovým rozdělením:

$$p(\mathbf{z}) \propto \exp \left[-\beta_1 \sum_{i \in L} \varphi(z_i) - \beta_2 \sum_{\{i,j\}: i \sim j} \varrho \left(\frac{z_i - z_j}{\delta} \right) \right].$$

Funkce ϱ je sudá a taková, že $\varrho(0) = 0$ a $\varrho(x) > 0$ pro $x \neq 0$. Příklady obvyklých voleb jsou $\varrho(x) = \frac{x^2}{2}$,

$$\varrho(x) = \begin{cases} x^2/2, & \text{pro } |x| \leq 1, \\ |x| - 1/2, & \text{pro } |x| \geq 1, \end{cases}$$

nebo $\varrho(x) = \frac{x^2}{1+x^2}$. Pro $\beta_2 > 0$ jsou pak v apriorním rozdělení upřednostňovány konfigurace, ve kterých jsou hodnoty v sousedních pixelech podobné. Volba funkce ϱ ovlivňuje, jak silně jsou rozdílné sousední hodnoty potlačovány. První dvě uvedené funkce ϱ jsou konvexní, třetí je omezená a konvexní na intervalu obsahujícím nulu. Volba konvexních funkcí je výhodná z výpočetního hlediska. Funkce φ se většinou volí jako nulová, což znamená, že každá hodnota je apriorně stejně pravděpodobná. Pokud je však S neomezená, vede to k nevlastní hustotě $p(\mathbf{z})$.

Můžeme se ptát, jestli aposteriorní rozdělení opět odpovídá markovskému náhodnému poli. Výpočtem zjistíme

$$p(z_i | \mathbf{z}_{-i}, \mathbf{y}) \propto p(\mathbf{z}) \prod_{j \in L} f(y_j | z_{N_j}) \propto \prod_{C \in \mathcal{C}: i \in C} g_C(\mathbf{z}_C) \prod_{j \in L: i \in N_j} f(y_j | z_{N_j}).$$

Pravá strana závisí pouze na těch z_k , pro které buď $k \sim i$ nebo existuje j takové, že $i \in N_j$ i $k \in N_j$. Pokud $N_j \subseteq \partial j \cup \{j\}$ pro každé j (tj. rozmazání zahrnuje pouze sousedy), potom dostáváme markovské náhodné pole ovšem k nové (obohacené) relaci sousedství: k je sousedem s i , pokud buď $k \sim i$ nebo existuje j takové, že $i \in N_j$ i $k \in N_j$. V případě, kdy není žádné rozmazání ($\gamma(i, i) = 1$ a $\gamma(i, j) = 0$ pro

$i \neq j$), jsou relace sousedství v apriorním i aposteriorním náhodném poli stejné, což usnadňuje výpočet odhadu \hat{z} .

Pokud předpokládáme, že parametry σ_ε^2 , β_1 , β_2 a δ jsou známé, je v gaussovském případě maximalizace aposteriorní hustoty (výpočet MAP odhadu) vzhledem k \mathbf{z} celkem jednoduchou úlohou. Pro jiná rozdělení je většinou třeba užít složitějších postupů, například iterativní metody nebo simulované žihání. Metody MCMC umožňují provádět simulace z aposteriorního rozdělení. Když nás zajímá nějaká kvantitativní informace související s obrázkem (označme ji $g(\mathbf{Z})$), můžeme aposteriorní střední hodnotu $\mathbb{E}[g(\mathbf{Z}) \mid \mathbf{Y} = \mathbf{y}]$ aproximovat ergodickým průměrem MCMC výstupu. Podobně můžeme aproximovat například kvantily aposteriorního rozdělení a získat tak intervaly spolehlivosti.

Pokud jsou parametry neznámé, existují přístupy založené na věrohodnosti (pseudověrohodnosti) nebo lze použít plně bayesovský přístup. V bayesovském přístupu považujeme σ_ε^2 , β_1 , β_2 , δ za náhodné veličiny, předepíšeme jejich apriorní rozdělení a pracujeme s plným aposteriorním rozdělením

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}, \sigma_\varepsilon^2, \beta_1, \beta_2, \delta \mid \mathbf{y}) &\propto f(\mathbf{y} \mid \mathbf{z}, \sigma_\varepsilon^2, \beta_1, \beta_2, \delta) p(\mathbf{z}, \sigma_\varepsilon^2, \beta_1, \beta_2, \delta) \\ &= f(\mathbf{y} \mid \mathbf{z}, \sigma_\varepsilon^2, \beta_1, \beta_2, \delta) p(\mathbf{z} \mid \beta_1, \beta_2, \delta) p(\beta_1, \beta_2, \delta) p(\sigma_\varepsilon^2), \end{aligned}$$

kde předpokládáme nezávislá apriorní rozdělení pro $(\beta_1, \beta_2, \delta)$ a σ_ε^2 . Z apriorní hustoty $p(\mathbf{z} \mid \beta_1, \beta_2, \delta)$ se do vyjádření aposteriorní hustoty dostane normující konstanta závisící na β_1 , β_2 a δ . Ta poněkud komplikuje zvládnutelnost práce s aposteriorním rozdělením. Většinou je třeba použít speciální MCMC algoritmy.

Doposud jsme uvažovali, že Y_i má spojité rozdělení, ačkoli Z_i mohlo nabývat diskrétních hodnot. V případě černobílých obrázků nabývá Z_i pouze hodnot 0 (bílá) nebo 1 (černá). Nejjednodušší model, kdy i Y_i je černobílý obrázek, dostaneme, pokud pravděpodobnost, že je pozorována špatná barva, má alternativní rozdělení. Mluvíme pak o *binárním šumu* (*binary noise*, *flip noise*). Pro $p \in (0, 1)$ je tedy $Y_i = Z_i$ s pravděpodobností $1 - p$ a $Y_i \neq Z_i$ s pravděpodobností p , neboli

$$\log p(y_i \mid z_i) = \mathbf{1}_{[y_i=z_i]} \log \frac{1-p}{p} + \log p.$$

Pro $p = 1/2$ nedává \mathbf{Y} žádnou informaci o \mathbf{Z} . Apriorní rozdělení můžeme volit například jako markovské náhodné pole s hustotou (Isingův model)

$$p(\mathbf{z}) \propto \exp \left(\beta \sum_{\{i,j\}:i \sim j} \mathbf{1}_{[z_i=z_j]} \right).$$

Aposteriovní rozdělení tak je

$$p(\mathbf{z} \mid \mathbf{y}) \propto \exp \left(\beta \sum_{\{i,j\}:i \sim j} \mathbf{1}_{[z_i=z_j]} + \gamma \sum_{i \in L} \mathbf{1}_{[z_i=y_i]} \right),$$

kde $\gamma = \log \frac{1-p}{p}$.

Pro binární obrázky nedává aposteriorní střední hodnota rozumný odhad. Kromě MAP odhadu se obvykle používá odhad MPM (*marginal posterior modes*), který minimalizuje aposteriorní střední hodnotu počtu špatně klasifikovaných pixelů. Každá složka tohoto odhadu je modus aposteriorního marginálního rozdělení. V našem případě binárních obrázků tak platí

$$\hat{Z}_i = \begin{cases} 1, & \text{když } \mathbb{P}(Z_i = 1 \mid Y) > 1/2, \\ 0, & \text{když } \mathbb{P}(Z_i = 1 \mid Y) < 1/2. \end{cases}$$

K výpočtu tohoto odhadu můžeme generovat N realizací z aposteriorního rozdělení a pokud počet případů $Z_i = 1$ je větší než $N/2$, položíme $\hat{Z}_i = 1$, jinak položíme $\hat{Z}_i = 0$.

5. Dodatky

5.1 Náhodné cenzorování

Předpokládejme, že T_1, \dots, T_n jsou nezávislé stejně rozdělené nezáporné náhodné veličiny s distribuční funkcí F . Naším cílem je získat odhad distribuční funkce F . V případě, kdy pozorujeme všechny sledované veličiny T_1, \dots, T_n , je přirozeným odhadem F empirická distribuční funkce

$$\hat{F}_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{[T_i \leq t]}, \quad t \geq 0.$$

V některých situacích, ale nemáme k dispozici pozorování všech T_i . Může tomu být například proto, že některá měření sledované veličiny byla předčasně ukončena. Příkladem je medicínská studie, ve které se zkoumá vliv určité léčby na přežití skupiny pacientů, některá pozorování nejsou úplná, protože se pacient odstěhoval nebo čas vyhrazený pro studii uplynul. Jiný příklad pochází z teorie spolehlivosti, kde je měřena doba do poruchy určitého výrobku. Kromě náhodných veličin T_i (tzv. časy přežití nebo doby života) ještě uvažujeme náhodné veličiny C_1, \dots, C_n (tzv. časové cenzory). Přitom pozorujeme jen náhodný výběr $(\tilde{T}_1, D_1), \dots, (\tilde{T}_n, D_n)$, kde $\tilde{T}_i = \min(T_i, C_i)$ jsou cenzorované časy přežití a $D_i = \mathbf{1}_{[T_i \leq C_i]}$ jsou indikátory necenzorování. Pro $D_i = 1$ máme k dispozici skutečné pozorování T_i . Naopak pokud je $D_i = 0$ (nastalo cenzorování), máme pouze částečnou informaci, že $T_i \geq \tilde{T}_i$. V případě náhodného cenzorování předpokládáme, že C_1, \dots, C_n jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny a nezávislé na T_1, \dots, T_n .

5.2 Besselovy funkce

Besselova funkce prvního druhu (Bessel function of the first kind) řádu ν je definována jako

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(k + \nu + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2k+\nu}.$$

Jedná se o řešení Besselovy diferenciální rovnice

$$y'' + \frac{1}{z}y' + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right)y = 0.$$

Existují dva druhy *modifikovaných Besselových funkcí (modified Bessel functions)*. Jedná se o řešení modifikované Besselovy rovnice

$$w'' + \frac{1}{z}w' - \left(1 + \frac{\nu^2}{z^2}\right)w = 0.$$

Modifikovaná Besselova funkce prvního druhu řádu ν je

$$I_\nu(z) = i^{-\nu} J_\nu(zi) = e^{-\frac{1}{2}\nu\pi i} J_\nu(zi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(k + \nu + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2k+\nu}$$

a modifikovaná Besselova funkce druhého druhu řádu ν má tvar

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin \pi \nu}.$$

Speciálně pro $\nu = 1/2$ je

$$I_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sinh z, \quad K_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-z} z^{-1/2}.$$

Literatura

- [1] A. BADDELEY AND B. W. SILVERMAN (1984): A cautionary example on the use of second-order methods for analyzing point patterns, *Biometrics* **40**, 1089–1094.
- [2] A. BADDELEY AND R. TURNER (2005): Spatstat: an R package for analyzing spatial point patterns, *Journal of Statistical Software* **12**, 1–42.
- [3] Z. CIESIELSKI AND A. KAMONT (1995): Levy’s fractional Brownian random field and function spaces, *Acta Sci. Math.* **60**, 99–118.
- [4] A. D. CLIFF AND J. K. ORD (1981): *Spatial Processes; Models and Applications*, Pion Limited, London.
- [5] D. J. DALEY AND D. VERE-JONES (1988): *An Introduction to the Theory of Point Processes*, Springer-Verlag, New York.
- [6] E. ISING (1925): Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, *Z. Physik* **31**, 253–258.
- [7] D. G. KRIGE (1951): A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand, *J. Chem. Metal. Min. Soc. S. Afr.* **52**, 119–139.
- [8] P. LACHOUT (2004): *Teorie pravděpodobnosti*, Karolinum, Praha.
- [9] J. MØLLER AND R. P. WAAGEPETERSEN (2003): *Statistical Inference and Simulation for Spatial Point Processes*, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton.
- [10] L. ONSAGER (1944): Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, *Phys. Rev.* **65**, 117–149.
- [11] J. RATAJ (2006): *Bodové procesy*, Karolinum, Praha.
- [12] R DEVELOPMENT CORE TEAM (2010): R: A language and environment for statistical computing, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL: <http://www.R-project.org>.
- [13] H. RUE AND L. HELD (2005): *Gaussian Markov Random Fields: Theory and Applications*, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton.
- [14] D. J. STRAUSS (1975): A model for clustering, *Biometrika* **62**, 467–475.
- [15] J. ŠTĚPÁN (1987): *Teorie pravděpodobnosti – matematické základy*, Academia, Praha.