Metódy výpočtu približných konfidenčných intervalov parametra polohy z digitalizovaných meraní

Gejza Wimmer jr.

MÚ SAV, Štefánikova 49, 814 73 Bratislava

ÚM SAV, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava

dzibo7@gmail.com

Príspevok sa zaoberá algoritmom pre výpočet približných konfidenčných intervalov parametera polohy z digitalizovaných meraní. Je prezentovaný všeobecný popis algoritmu pre generovanie náhodného výberu z fiduciálnej distribúcie ako aj podrobnejšie znázornenie vytvorenia množiny možných hodnôt parametrov (μ,σ) tak, aby táto bola neprázdna. Nasledujúcim krokom je vytvorenie výberového mechanizmu, ktorý vygeneruje jedinú hodnotu parametra (μ,σ) z polygónu všetkých možných hodnôt parametrov. Na záver sú zhrnuté výsledky simulačnej štúdie, ktorej cieľom bolo porovnať základne štatistické vlastnosti (pravdepodobnosť pokrytia a očakávanú dĺžku) približných konfidenčných intervalov pre parameter μ na základe malého výberu z digitalizovaných meraní.

Algoritmus pre generovanie náhodného výberu z fiduciálnej distribúcie

Združená fiduciálna distribučná funkcia parametrov (μ,σ) (závisí od G, Q, a V) je daná ako

$$F_{(\mu,\sigma)}((\mu^\star,\sigma^\star)) = \Pr\left(V(Q(x,Z^\star)) \le (\mu^\star,\sigma^\star) \,|\, Z^\star \in S(x)\right), \qquad (1)$$

kde $(\mu^\star,\sigma^\star)$ je pevne zvolený vektor hodnôt a $Z^\star = (Z_1^\star, Z_2^\star, \dots, Z_n^\star)' \sim N(0, I_n)$. Tu $X = G(\xi, Z)$ je známy systém štrukturálnych rovníc (dáta generujúci mechanizmus, spája náhodný vektor pozorovaní X s vektorom parametrov $\xi \in \Xi$), $Q(X,Z)$ reprezentuje 'inverznú funkciu' ku G (pre ľubovoľnú pevnú hodnotu x a z tvorí množinu všetkých možných parametrov) a $V(\cdot)$ je náhodný mechanizmus voľby parametra (μ,σ) z uzáveru množiny možných parametrov $Q(x,z)$, pričom $V(\cdot)$ má rovnomerné rozdelenie nad $Q(x,z)$. Navyše, ak $z \in S(x)$, kde

$$S(x) = \{(z_1,\dots,z_n) : \exists(\mu,\sigma),\ \text{že}\ \ x_i - \delta/2 \le \mu + \sigma z_i < x_i + \delta/2,\ i = 1,2,...,n\}, \qquad (2)$$

pričom $x_i = \delta k_i = \delta\lfloor(\mu + \sigma Z_i)/\delta + 0.5\rfloor$, kde δ je rozlíšenie meracieho prístroja, tak množina paramterov $Q(x,z)$ vytvára polygón.

Základné kroky algoritmu

Napriek tomu, že explicitný tvar rozdelenia (1) nie je známy, generovanie náhodného výberu parametrov (μ,σ) možno urobiť priamo podľa (1). Na to, aby sa počas generovania realizácií náhodného vektora $Z^\star$ nevyskytli prípady, keď $Q(x,Z^\star) = \emptyset$ (t.j. aby nebolo nutné v každom kroku algoritmu overovať podmienku $Z^\star \in S(x)$) s výhodou možno využiť metódy generovania založené na MCMC (Markov Chain Monte Carlo). Detailný popis algoritmu možno nájsť v práci Hannig *et al.* (2007), pričom je založený na nasledovnom postupe:

1. Ak je realizácia vektora meraní $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ konzistentná s modelom (daným výberovým mechanizmom G), potom musí existovať najmenej jeden parameter, napr. $\xi^{(0)} = \left(\mu^{(0)}, \sigma^{(0)}\right)$, že $x = G\left(\xi^{(0)}, z\right)$ pre nejakú hodnotu z, povedzme $z^{(0)}$, teda platí $z^{(0)} \in S(x)$.
2. Pre ľubovoľnú hodnotu vektora chýb $z \in S(x)$, povedzme $z^{(k-1)}$, algoritmus nájde polygón $Q\left(x, z^{(k-1)}\right)$ s nekonečným počtom možných hodnôt parametrov (μ,σ).
3. Pomocou výberového mechanizmu $V(\cdot)$ algoritmus vygeneruje jedinú hodnotu parametra (μ,σ) z polygónu $Q\left(x, z^{(k-1)}\right)$, napr. $(\mu^{(k)}, \sigma^{(k)})$, ktorý spĺňa podmienky $\alpha_i \le \mu^{(k)} + \sigma^{(k)} z_i < \beta_i$ pre všetky z_i, také že $\left(\alpha_i - \mu^{(k)}\right)/\sigma^{(k)} \le z_i < \left(\beta_i - \mu^{(k)}\right)/\sigma^{(k)}$, $i = 1, \dots, n$.
4. Z týchto možných hodnôt z_i algoritmus náhodne vyberie novú verziu vektora chýb z, napr. $z^{(k)} = \left(z_1^{(k)}, \dots, z_n^{(k)}\right)$. Algoritmus potom pokračuje opakovaním krokov 2-4, pokiaľ sa nedosiahne požadovaný počet realizácii náhodného výberu parametrov (μ,σ) z fiduciálnej distribúcie.
5. Na vylepšenie rýchlosti konvergencie k cieľovej fiduciálnej distribúcii je potrebné zaviesť nasledovný zmiešavací krok (mixing step): Pre dané $z = (z_1, \dots, z_n)$, $z \in S(x)$, algoritmus v každom kroku náhodne posunie z do $\tilde z = (\tilde z_1, \dots, \tilde z_n)$,

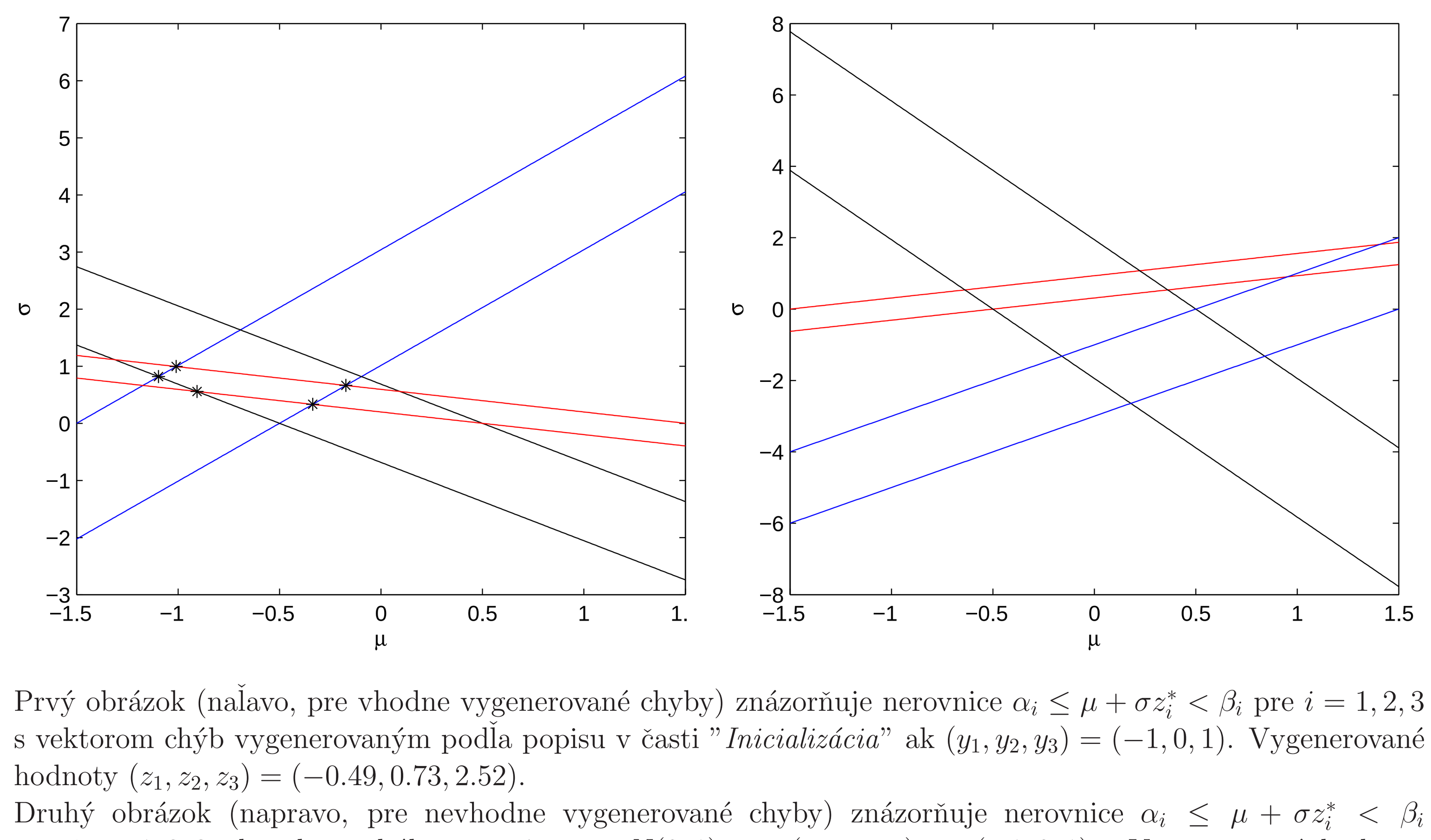
$$\tilde z_i = \frac{1}{n}U^\star + \frac{\sqrt{W^\star}}{\sum_{i=1}^{n}(z_i - \bar z)^2}(z_i - \bar z),\ i = 1, \dots, n, \qquad (3)$$

kde $\bar z = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n z_i$. $U^\star \sim N(0,1)$ a $W^\star \sim \chi^2_{(n-1)}$ sú nezávislé náhodné premenné, spoločné pre všetky $i = 1, \dots, n$. Pri tomto postupe vždy platí, že $\tilde z \in S(x)$.

Jednotlivé časti algoritmu

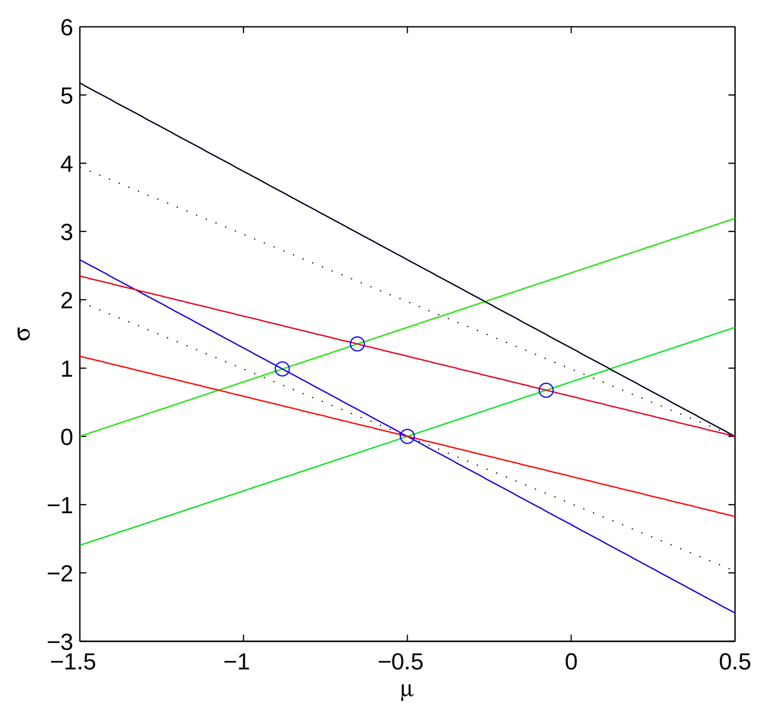
Úvodným krokom je načítanie vstupných údajov, ako sú získané (resp. vygenerované) merania a rôzne konštanty (rozlišovacia schopnosť meracieho prístroja, rozsah náhodného výberu z združenej fiduciálnej distribúcie, hladinu významnosti α_v a pod.). Ďalšiu časť tvorí "*Inicializácia*", kde sa na základe meraní a rozlíšenia meracieho prístroja určí dolná a horná hranica $\alpha_i = x_i - \delta/2$ a $\beta_i = x_i - \delta/2$, $i = 1,2,...,n$ z (2) a vygeneruje sa vektor chýb $z^* \in S(x)$ tak, aby existoval polygón $Q(x, z^*)$. Tento sa tvorí nasledovne:

- vygenerujú sa "'nové merania"' $\mathbf{Y}^* = (Y_1^*, \dots, Y_n^*)'$ z rovnomerného rozdelenia na intervale (α, β)
- spočíta sa $\sigma^* = S_{Y^*}\sqrt{(n-1)/W}$, kde $W \sim \chi^2_{(n-1)}$ a $\mu^* = \bar Y^* + (\sigma^*/\sqrt{n})Z$, kde $Z \sim N(0,1)$. Tu $\bar Y^*$, resp. $S^2_{Y^*}$ je výberová stredná hodnota, resp. výberová disperzia, spočítaná z hodnôt $(Y_1^*, \dots, Y_n^*)$
- vygeneruje sa vektor chýb
  $\mathbf{z}^* = (\mathbf{Y}^* - \mu^*)/\sigma^*$



Prvý obrázok (naľavo, pre vhodne vygenerované chyby) znázorňuje nerovnice $\alpha_i \le \mu + \sigma z_i^* < \beta_i$ pre $i = 1,2,3$ s vektorom chýb vygenerovaným podľa popisu v časti "*Inicializácia*" ak $(y_1, y_2, y_3) = (-1, 0, 1)$. Vygenerované hodnoty $(z_1, z_2, z_3) = (-0.49, 0.73, 2.52)$.
Druhý obrázok (napravo, pre nevhodne vygenerované chyby) znázorňuje nerovnice $\alpha_i \le \mu + \sigma z_i^* < \beta_i$ pre $i = 1,2,3$ ak vektor chýb generujeme z $N(0,1)$ pre $(y_1, y_2, y_3) = (-1, 0, 1)$. Vygenerované hodnoty $(z_1, z_2, z_3) = (-1.60, 0.26, -0.50)$.

Potom nasleduje redukcia počtu nerovníc, ktorých prienik tvorí polygón $Q(x, z^*)$ na najmenší potrebný počet $n^* \le n$ nerovníc. Táto časť je vhodná najmä v prípade, ak obdržíme opakované hodnoty meraní.



Zredukované nerovnice $\alpha_i \le \mu + \sigma z_i^* < \beta_i$ pre $i = 1,2,3,4$ s vektorom chýb vygenerovaným podľa popisu v časti Inicializácia ak $(y_1, y_2, y_3, y_4) = (-1, 0, 0, 1)$. Bodkovanou čiarou je znázornená zredukovaná nerovnosť.

Následne sa vyhľadá spoločný prienik zredukovaných nerovníc $\alpha_i \le \mu + \sigma z_i^* < \beta_i$, $i = 1, \dots, n^*$, tzn. určí polygón $Q(x, z^*)$ z ktorého pomocou výberového mechanizmu $V(\cdot)$ vygenerujeme jednen bodu z jeho vnútra, tzn. získame jednu hodnotu (μ_g, σ_g).Záverečným krokom je vygenerovanie nového vektora chýb tak, aby $z_n \in S(x)$. Tu sa pri vstupných hodnotách (μ_g, σ_g) z predchádzajúceho kroku spočíta hodnota Φ distribučnej funkcie $N(0,1)$ v bodoch $(\alpha - \mu_g)/\sigma_g$ a $(\beta - \mu_g)/\sigma_g$, tzn. hodnoty $r_1 = \Phi((\alpha - \mu_g)/\sigma_g)$ a $r_2 = \Phi((\beta - \mu_g)/\sigma_g)$. Pomocou nich potom vygenerujeme nové chyby z_n ako $z_n = \Phi^{-1}(r_1 + R(r_2 - r_1))$, kde R je vygenerované z rovnomerného $(0,1)$ rozdelenia. Z týchto na záver pomocou zmiešavacieho kroku určíme hodnotu $\tilde z_n$. Celý postup sa potom opakuje podľa potreby, vzhľadom na to, koľko hodnôt z fiduciálnej distribúcie je požadovaných.

Simulačná štúdia

Cieľom simulačnej štúdie bolo porovnať základné štatistické vlastnosti (pravdepodobnosť pokrytia a očakávanú dĺžku) približných konfidenčných intervalov pre parameter μ na základe malého výberu z digitalizovaných meraní. V simulačnej štúdii boli zahrnuté približné konfidenčné intervaly CI_μ^{ML}, CI_μ^{St}, CI_μ^{W} a CI_μ^{FD} pre parameter polpohy μ (t.j. intervaly určené metódou maximálnej vierohodnosti, klasický Studentov konfidenčný interval, interval navrhnutý Willinkom a interval určený z fiduciálnej distribučnej funkcie). Uvažovali sme malé rozsahy výberu n, $n \in \{5, 10, 30\}$, relatívne malé rozptyly chýb σ^2 (vzhľadom k rozlíšeniu prístroja $\delta > 0$),$\sigma \in \{0.1\delta, 0.3\delta, 0.5\delta, 1.0\delta\}$, ako aj rôzne hodnoty parametra polohy μ v rozsahu jednej jednotky danej škály meracieho prístroja.$\mu \in \{0.0\delta, 0.1\delta, 0.2\delta, 0.3\delta, 0.4\delta, 0.5\delta\}$ Bez újmy na všeobecnosti sme uvažovali len s rozlíšením meracieho prístroja $\delta = 1$. Pre každú zvolenú kombináciu parametrov n, μ a σ sme vygenerovali realizácie digitalizovaných meraní $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ a na jej základe vypočítali hodnoty približných 95% konfidenčných intervalov pre parameter polohy μ: teda $CI_\mu^{ML}(1-\alpha)$, $CI_\mu^{St}(1-\alpha)$ a $CI_\mu^{W}(1-\alpha)$ pre $\alpha = 0.05$. Na určenie konfidenčného intervalu $CI_\mu^{FD}(1-\alpha)$ sme navyše generovali náhodný výber rozsahu $N = 10000$ z fiduciálnej distribúcie (1). Keďže rozdelenie náhodného vektora meraní $(X_1, X_2, \dots, X_n)$ má diskrétny charakter, realizácie meraní $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ viedli k relatívne malému počtu rôznych hodnôt, hlavne pre malé hodnoty σ. To umožnilo významne zredukovať výpočtové nároky na určenie konfidenčného intervalu z fiduciálneho rozdelenia. Korektnosť uvažovaných konfidenčných intervalov sme posudzovali s ohľadom na kritérium $\Pr(\mu \in CI_\mu(1-\alpha)) \ge 1 - \alpha$, kde μ je skutočná hodnota parametra. Z výsledkov tejto simulačnej štúdie vyplýva nasledovné:

- Približný konfidenčný interval CI_μ^{ML} je pre uvažované situácie neadekvátny, hoci je teoreticky známe, že je asymptoticky správny. Ako sa ukázalo aj v iných situáciách pre malé hodnoty skutočného parametra σ, konfidenčný interval CI_μ^{ML} nemusí dosiahnuť stanovenú pravdepodobnosť pokrytia ani pre veľmi veľké rozsahy náhodného výberu z pozorovaní n.
- Približný konfidenčný interval CI_μ^{St} je korektný (správny) aj pre malé rozsahy výberov n, pokiaľ hodnota skutočného parametra σ je blízka danému rozlíšeniu prístroja δ (alebo väčšia).
- Približné konfidenčné intervaly CI_μ^{W} a CI_μ^{FD} boli korektné takmer pre všetky uvažované situácie.
- Interval CI_μ^{W} dosahoval mierne väčšie hodnoty priemerných dĺžok intervalov ako konfidenčný interval založený na fiduciálnej distribúcii CI_μ^{FD}.

		n=5								n=10							
σ	μ	Fiducial		Willink		Student		ML		Fiducial		Willink		Student		ML	
0.1	0.0	1.0000	(1.00)	1.0000	(1.60)	1.0000	(0.00)	1.0000	(0.00)	1.0000	(1.00)	1.0000	(1.31)	1.0000	(0.00)	1.0000	(0.00)
	0.1	1.0000	(1.00)	1.0000	(1.60)	0.0001	(0.00)	0.0000	(0.00)	1.0000	(1.00)	1.0000	(1.31)	0.0002	(0.00)	0.0000	(0.00)
	0.2	1.0000	(1.00)	1.0000	(1.60)	0.0064	(0.01)	0.0000	(0.00)	1.0000	(0.99)	1.0000	(1.30)	0.0144	(0.01)	0.0000	(0.00)
	0.3	1.0000	(1.01)	1.0000	(1.55)	0.1103	(0.12)	0.0000	(0.00)	1.0000	(0.93)	1.0000	(1.25)	0.2058	(0.10)	0.0000	(0.00)
	0.4	1.0000	(1.10)	1.0000	(1.36)	0.5834	(0.69)	0.5533	(0.10)	0.9999	(0.70)	0.9999	(0.95)	0.4865	(0.31)	0.8099	(0.09)
	0.5	1.0000	(1.22)	1.0000	(1.30)	0.9384	(1.20)	0.6307	(0.15)	1.0000	(0.65)	0.9920	(0.73)	0.9808	(0.71)	0.8937	(0.15)
0.3	0.0	1.0000	(1.03)	1.0000	(1.62)	1.0000	(0.24)	0.8039	(0.01)	1.0000	(0.87)	1.0000	(1.28)	1.0000	(0.19)	0.6564	(0.02)
	0.1	1.0000	(1.04)	1.0000	(1.51)	0.2777	(0.32)	0.0090	(0.01)	0.9976	(0.83)	1.0000	(1.17)	0.4754	(0.24)	0.0304	(0.02)
	0.2	0.9986	(1.07)	0.9986	(1.41)	0.4592	(0.54)	0.0050	(0.01)	0.9907	(0.73)	0.9998	(1.03)	0.7069	(0.38)	0.0166	(0.01)
	0.3	0.9997	(1.13)	1.0000	(1.33)	0.6910	(0.84)	0.0018	(0.00)	0.9982	(0.67)	0.9989	(0.87)	0.9052	(0.55)	0.0062	(0.00)
	0.4	0.9955	(1.19)	1.0000	(1.30)	0.8750	(1.10)	0.6515	(0.13)	0.9948	(0.65)	0.9949	(0.77)	0.9008	(0.63)	0.7496	(0.10)
	0.5	0.9999	(1.22)	1.0000	(1.30)	0.9332	(1.19)	0.6279	(0.15)	1.0000	(0.65)	0.9897	(0.72)	0.9776	(0.70)	0.8880	(0.15)
0.5	0.0	0.9954	(1.39)	0.9970	(1.85)	0.9954	(1.25)	0.4656	(0.38)	0.9625	(0.80)	0.9817	(1.04)	0.9625	(0.76)	0.6902	(0.50)
	0.1	0.9857	(1.37)	0.9922	(1.69)	0.8446	(1.25)	0.2944	(0.36)	0.9353	(0.78)	0.9800	(0.94)	0.9478	(0.76)	0.6275	(0.47)
	0.2	0.9773	(1.37)	0.9805	(1.57)	0.8688	(1.28)	0.2697	(0.34)	0.9547	(0.78)	0.9816	(0.88)	0.9398	(0.77)	0.5543	(0.43)
	0.3	0.9880	(1.38)	0.9998	(1.52)	0.9088	(1.33)	0.2350	(0.30)	0.9713	(0.77)	0.9798	(0.84)	0.9648	(0.79)	0.4464	(0.35)
	0.4	0.9718	(1.36)	0.9982	(1.47)	0.9235	(1.34)	0.6424	(0.35)	0.9670	(0.76)	0.9698	(0.82)	0.9472	(0.79)	0.6977	(0.35)
	0.5	0.9860	(1.37)	0.9919	(1.44)	0.9376	(1.35)	0.6871	(0.37)	0.9786	(0.77)	0.9852	(0.82)	0.9787	(0.81)	0.9057	(0.38)
1.0	0.0	0.9623	(2.37)	0.9697	(2.55)	0.9623	(2.37)	0.7475	(1.28)	0.9497	(1.39)	0.9576	(1.41)	0.9524	(1.40)	0.8921	(1.09)
	0.1	0.9438	(2.34)	0.9628	(2.50)	0.9356	(2.34)	0.7239	(1.26)	0.9461	(1.39)	0.9578	(1.41)	0.9529	(1.40)	0.8895	(1.09)
	0.2	0.9583	(2.36)	0.9771	(2.50)	0.9528	(2.37)	0.7419	(1.29)	0.9454	(1.38)	0.9538	(1.40)	0.9497	(1.39)	0.8886	(1.08)
	0.3	0.9561	(2.38)	0.9838	(2.50)	0.9509	(2.39)	0.7476	(1.30)	0.9524	(1.39)	0.9536	(1.40)	0.9517	(1.40)	0.8913	(1.09)
	0.4	0.9451	(2.34)	0.9823	(2.46)	0.9385	(2.35)	0.7965	(1.28)	0.9539	(1.39)	0.9565	(1.40)	0.9549	(1.40)	0.9025	(1.10)
	0.5	0.9519	(2.37)	0.9764	(2.45)	0.9447	(2.38)	0.8130	(1.29)	0.9527	(1.40)	0.9556	(1.41)	0.9447	(1.40)	0.9014	(1.09)

Pravdepodobnosť pokrytia a priemerná dĺžka približných 95% konfidenčných intervalov parametera μ, pre rozsah výberu $n = 5$ a $n = 10$.

Poďakovanie

Práca bola podporená grantmi VEGA 1/3016/06 a APVV RPEU-0008-06.

Referencie

[1] Hannig J., Iyer H.K., Wang C.M. (2007) *Fiducial approach to uncertainty assessment accounting for error due to instrument resolution.* Metrologia **44**, 476–483.

[2] Witkovský V., Wimmer G. (2008) *Confidence intervals for the location parameter based on digitized measurements.* Submitted to Mathematica Slovaca.