Cvičení STP005 – dodatky ke geostatistice

Besselova funkce prvního druhu

Besselova funkce prvního druhu 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

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

Modifikovaná Besselova funkce

Existují dva druhy modifikovaných Besselových funkcí. Jedná se o řešení modifikované Beseelovy rovnice

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

Modifikovaná Besselova funkce prvního druhu řádu ν je

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

a modifikovaná Besselova funkce druhého druhu řádu ν má tvar

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

Frakcionální Brownův pohyb

Frakcionální Brownův pohyb (fractional Brownian motion) $\{W_t^H, t \geq 0\}$ je spojitý centrovaný gaussovský proces s kovariancemi $\mathbb{E}W_t^H W_s^H = \frac{1}{2}\left(t^{2H} + s^{2H} - |t-s|^{2H}\right)$. Parametr $H \in (0,1)$ se nazývá Hurstův. Proces má stacionární přírůstky, které jsou nezávislé pro $H = \frac{1}{2}$, jedná se o Wienerův proces. Pro $H > \frac{1}{2}$ jsou přírůstky pozitivně korelované, zatímco pro $H < \frac{1}{2}$ jsou negativně korelované. Variogram frakcionálního Brownova pohybu je

$$\begin{aligned} 2\gamma(h) &= \mathrm{var}(W_{t+h}^H - W_t^H) = \mathbb{E}(W_{t+h}^H)^2 + \mathbb{E}(W_t^H)^2 - 2\mathbb{E}W_{t+h}^H W_t^H \\ &= (t+h)^{2H} + t^{2H} - t^{2H} - (t+h)^{2H} + |h|^{2H} = |h|^{2H}. \end{aligned}$$

Jde o příklad mocninného modelu variogramu.

Frakcionální Brownův list

Zobecnění frakcionálního Brownova pohybu na $d > 1$ je *frakcionální Brownův list (fractional Brownian sheet)*. Je to spojité centrované gaussovské náhodné pole $\{W_t^H, t \in \mathbb{R}_+^d\}$ s kovariancemi

$$\mathbb{E}W_t^H W_s^H = \frac{1}{2^d} \prod_{i=1}^{d} (t_j^{2H_j} + s_j^{2H_j} - |t_j - s_j|^{2H_j}), \quad t = (t_1, \ldots, t_d) \in \mathbb{R}_+^d, s = (s_1, \ldots, s_d) \in \mathbb{R}_+^d,$$

kde $H = (H_1, \ldots, H_d) \in (0,1)^d$ je vektor Hurstových parametrů. Pokud $H_1 = \cdots = H_d = 1/2$, dostáváme tzv. *Brownův list (Brownian sheet)*. Takto definované náhodné pole není vnitřně stacionární.

Jiná možnost, jak zobecnit frakcionální Brownův pohyb, je uvažovat spojité centrované gaussovské náhodné pole $\{W_t^H, t \in \mathbb{R}_+^d\}$ s kovariancemi

$$\mathbb{E}W_t^H W_s^H = \frac{1}{2}(\|t\|^{2H} + \|s\|^{2H} - \|t-s\|^{2H}), \quad t = (t_1, \ldots, t_d) \in \mathbb{R}_+^d, s = (s_1, \ldots, s_d) \in \mathbb{R}_+^d,$$

kde $H \in (0,1)$. Potom $\mathbb{E}(W_t^H - W_s^H)^2 = \|t-s\|^{2H}$. Dostáváme tak opět příklad mocninného modelu variogramu. Takto definované náhodné pole se označuje jako *Lévyho frakcionální Brownovo náhodné pole (Lévy's fractional Brownian random field).*

Sférický model kovariogramu

Mezi časté používané izotropní parametrické modely kovarianční funkce patří sférický model:

$$C(h) = \sigma^2 \frac{|b(o,\varrho) \cap b(h,\varrho)|}{|b(o,\varrho)|}.$$

Tento model je platný v dimenzi d a ve všech nižších, ne však v dimenzích vyšších.

Pro $d = 1$ dostáváme $C(h) = \sigma^2 \max\left(1 - \frac{|h|}{a}, 0\right)$, kde $a = 2\varrho$. Pokud bychom uvažovali tento model v $\mathbb{R}^2$, tak se můžeme přesvědčit, že

$$C(h) = \sigma^2 \left(1 - \frac{\|h\|}{a}\right), \quad \|h\| \le a,$$

není pozitivně semidefinitní funkce. Stačí uvažovat body $x_{ij} = (ia^*, ja^*_)$, $i,j = 1,\dots,8$ a $a^* = \frac{a}{\sqrt{2}}$ a $\alpha_{ij} = (-1)^{i+j}$. Potom

$$\sum_{i,j}\sum_{k,l} \alpha_{ij}\alpha_{kl} C(x_{ij} - x_{kl}) = \sigma^2 \left[64 - (2\cdot 4 + 3 \cdot 24 + 4 \cdot 36)\left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right] < 0.$$

Reziduální maximální věrohodnost

Nechť $\{Z(x) : x \in D\}$ je slabě stacionární gaussovské náhodné pole se střední hodnotou $\mathbb{E}Z(x) = \mu$ a kovarianční funkcí $C_\theta(h)$. Na základě dat $Z = (Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$ chceme odhadnout neznámé parametry μ a θ. Metoda maximální věrohodnosti (ML – maximum likelihood) vede k negativnímu vychýlení při odhadu kovariančních parametrů. Proto se často preferuje metoda reziduální maximální věrohodnosti (REML – restricted maximum likelihood, residual maximum likelihood).

Nejznámějším příkladem je situace, kdy Z je tvořeno nezávislými náhodnými veličinami s $N(\mu, \sigma^2)$. Potom maximálně věrohodný odhad σ^2 je

$$\hat{\sigma}^2_{ML} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n (Z(x_i) - \bar{Z})^2,$$

kde $\bar{Z} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n Z(x_i)$ je maximálně věrohodný odhad μ. Vychýlení $\hat{\sigma}^2_{ML}$ je $-\sigma^2/n$. Oproti tomu REML odhad rozptylu σ^2 je nestranný:

$$\hat{\sigma}^2_{REML} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^n (Z(x_i) - \bar{Z})^2.$$

Vychýlení maximálně věrohodného odhadu je dáno tím, že metoda nepostihuje ztrátu stupně volnosti způsobenou odhadem střední hodnoty.

Podstata reziduální maximální věrohodnosti je v odhadu kovariančních parametrů maximalizaci věrohodnosti vektoru KZ místo původního Z. Matice K je zvolena tak, že $\mathbb{E}KZ = 0$. Nazývá se *matice kontrastu (matrix of error constrast).* V našem konkrétním případě gaussovského pole s konstantní střední hodnotou můžeme použít matici řádu $(n-1) \times n$:

$$K = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ -\frac{1}{n} & 1 - \frac{1}{n} & \ddots & -\frac{1}{n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & 1 - \frac{1}{n} & -\frac{1}{n} \end{pmatrix}.$$

Potom $KZ = (Z(x_1) - \bar{Z}, \dots, Z(x_{n-1}) - \bar{Z})^T$ a maximalizací reziduální věrohodnosti obdržíme $\hat{\theta}_{REML}$. Protože jsme transformovali rozdělení tak, že nezávisí na střední hodnotě, nemůžeme dostat REML odhad střední hodnoty μ.

Když budeme předpokládat pro střední hodnotu regresní model

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

pak lze volit K řádu $(n-p-1) \times n$. V případě nekorelovaných veličin s konstantním rozptylem σ^2 je maximálně věrohodný odhad reziduálního rozptylu

$$\hat{\sigma}^2_{ML} = \frac{1}{n}(Z - F\hat{\beta})^T (Z - F\hat{\beta}),$$

zatímco REML odhad je nestranný:

$$\hat{\sigma}^2_{REML} = \frac{1}{n-p-1}(Z - F\hat{\beta})^T (Z - F\hat{\beta}).$$