

Prostorové modelování, prostorová statistika (STP005)

Obsah

Obsah	1
1. Úvod	2
2. Bodové procesy	2
2.1 Základní definice a tvrzení	2
2.2 Poissonův bodový proces	3
2.3 Momentové míry	4
2.4 Palmovo rozdělení	5
2.5 Charakteristiky bodových procesů	6
2.6 Kótované bodové procesy	8
2.7 Modely bodových procesů	8
2.8 Konečné bodové procesy s hustotou	11
2.9 Nekonečné gibbovské bodové procesy	14
2.10 Statistika bodových procesů	16
3. Geostatistika	20
3.1 Náhodná pole	20
3.2 Variogram a kovarianční funkce	21
3.3 Krigování	25
3.4 Vliv odhadů kovariančních parametrů	27
3.5 Bayesovský přístup	28
3.6 Další témata	29
4. Prostorové modely na mřížích	30
4.1 Markovská náhodná pole	30
4.2 Gaussovské modely	35
4.3 Statistická analýza	36
4.4 Rekonstrukce obrázků	39
Literatura	41

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 korelována. 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 epicentra zemětřesení, hnízda ptáků v krajině, poloha stromů v lese 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 uspořádání bodů ovlivňuje velikosti kót.
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 (vektoru), odhad prostorové závislosti (odhad tzv. variogramu) nebo prostorová predikce (tzv. krigování).
3. regionální data: $D \subseteq \mathbb{R}^d$ je pevná (nenáhodná) diskrétní (sjednocení konečně nebo spočetně mnoha bodů) množina. 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 za dané pole, pozorování spojené s pixely 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.

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 doc. 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: $\mathfrak{N} = \sigma\{\{\varphi \in \mathcal{N} : \varphi(B) = m\}, m \in \mathbb{N}_0, B \in \mathcal{B}_0^d\}$.

Bodový proces můžeme definovat jako náhodnou lokálně konečnou bodovou konfiguraci (prvek \mathcal{N}).

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 $\Pi(U) = \mathbb{P}(\Phi \in U)$, $U \in \mathfrak{N}$. Řekneme, že bodový proces je *konečný (finite)*, jestliže $\Phi(\mathbb{R}^d) < \infty$ s.j.*

Pozn.: 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.

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

Důkaz: Viz cvičení. □

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

Tvrzení 2. Rozdělení bodového procesu Φ je určeno prázdnými pravděpodobnostmi.

Důkaz: [11], Důsledek 4.2 nebo [9], Theorem B.1. □

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 .

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

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

Existuje-li hustota λ míry Λ vzhledem k Lebesgueově míře ($\Lambda(B) = \int_B \lambda(x) dx$, $B \in \mathcal{B}^d$), potom λ se nazývá *funkce intenzity (intensity function)*.

Pozn.: Míra intenzity je borelovská míra, σ -aditivita plyne z Leviho věty o monotónní konvergenci.

Lemma 3. Je-li Φ stacionární bodový proces s lokálně konečnou mírou intenzity Λ , pak Λ je 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 $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}^d)$. □

Definice 5. Z předchozího lemmatu víme, že pro stacionární bodový proces je míra intenzity násobkem Lebesgueovy míry. Funkce intenzity je konstantní a rovna tomuto násobku, kterému se říká *intenzita (intensity)* stacionárního bodového procesu.

2.2 Poissonův bodový proces

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

Definice 6. Nechť ν je difúzní 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:

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

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

Pozn.: Měřitelnost $\Phi^{(n)}$ plyne z věty 1, protože $\Phi^{(n)}(A) = \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{[X_i \in A]}$ je náhodná veličina.

Pozn.: Knihovna spatstat [2] v R [12] umožňuje generování realizací binomického bodového procesu pomocí funkcí runifpoint, runifdisc a rpoint.

Poissonův proces představuje základní model bodových procesů. Jde o model úplné nezávislosti bodů.

Definice 7. Nechť Λ je difúzní lokálně konečná míra na \mathbb{R}^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*; *rpoispp*) s mírou intenzity Λ . Pokud existuje funkce intenzity λ a je konstantní, pak Φ je *homogenní* (*homogeneous*) *Poissonův proces* s intenzitou λ . *Pozn.*: Homogenní Poissonův proces je stacionární a izotropní (viz cvičení). Intenzita homogenního Poissonova procesu splývá s intenzitou z definice 5.

Věta 4. *Poissonův bodový proces existuje a jednoznačně určen mírou intenzity.*

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

Věta 5. *Nechť 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 tvrzení 2. \square

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 počítá pouze přes n -tice navzájem různých bodů X_1, \dots, X_n .

Pozn.: 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:

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

Podobně faktoriální momentová míra souvisí s faktoriálním momentem počtu bodů v dané oblasti (viz cvičení).

Definice 9. Nechť 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*).

Pozn.: Součinnová hustota prvního řádu je funkce intenzity. Budeme psát $\lambda^{(1)} = \lambda$.

Věta 6. (*Campbellova věta*) *Pro bodový proces Φ a libovolnou nezápornou měřitelnou funkci h platí:*

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

a

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

Důkaz: Pro indikátory plynou vztahy z definice 8. Zbytek důkazu probíhá standardním postupem teorie míry. \square

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

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

Pozn.: Campbellova míra je též určena vztahem

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

Povšimněme si, že $\Lambda(\cdot) = C(\cdot \times \mathcal{N})$. Pro každé $B \in \mathcal{B}^d$ a $U \in \mathfrak{N}$ platí, že pokud $\Lambda(B) = 0$, pak $C(\cdot \times U) = 0$. To znamená, že míra $C(\cdot \times U)$ 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 $P_x(U)$, neboli platí

$$C(B \times U) = \int_B P_x(U) \Lambda(dx).$$

Dá se ukázat, že existuje regulární verze $P_x(U)$. Tedy je to markovské (pravděpodobnostní) jádro:

- (i) pro každé $U \in \mathfrak{N}$ je $P_x(U)$ nezáporná měřitelná funkce na \mathbb{R}^d ,
- (ii) pro každé $x \in \mathbb{R}^d$ je $P_x(\cdot)$ pravděpodobnostní míra.

Detaily lze nalézt v [11], kap. 7 nebo [6], kap. 12.

Definice 11. Rozdělení P_x 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

$$C^!(B \times U) = \int_B P_x^!(U) \Lambda(dx).$$

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

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

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.

Věta 7. (*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: Pomocí standardních argumentů teorie míry (standard measure theory argument). □

V případě stacionárních bodových procesů je celý soubor Palmových rozdělení ($P_x, x \in \mathbb{R}^d$) určen Palmovým rozdělením P_o v počátku: $P_x(\cdot) = P_o(\cdot - x)$. Campbellova-Meckeho věta má pak následující tvar.

Věta 8. 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

$$\mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} h(X, \Phi \setminus \{X\}) = \lambda \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi) P_x^1(d\varphi) dx = \lambda \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi + x) P_o^1(d\varphi) dx,$$

kde $\varphi + x = \{y + x : y \in \varphi\}$.

2.5 Charakteristiky bodových procesů

Definice 12. 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

$$\lambda \mathcal{K}(B) = \int \varphi(B \setminus \{o\}) P_o(d\varphi) = \int \varphi(B) P_o^1(d\varphi), \quad B \in \mathcal{B}^d.$$

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

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

Pozn.: 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

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

kde $B \in \mathcal{B}_0^d$ je libovolná s kladnou Lebesgueovou mírou ($|B| > 0$). Důkaz (1) byl na cvičení. Obecněji platí

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

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

Definice K -funkce lze zobecnit na obecné (ne nutně stacionární) bodové procesy pomocí zobecnění vztahu (1).

Definice 13. Nechť Φ je bodový proces s funkcí intenzity λ . Definujeme

$$K_{inhom}(r) = \mathbb{E} \sum_{X, Y \in \Phi}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{[X \in B, \|X - Y\| \leq r]}}{\lambda(X)\lambda(Y)|B|}, \quad r \geq 0,$$

pokud pravá strana nezávisí na volbě $B \in \mathcal{B}_0^d$ s $|B| > 0$.

Definice 14. Za předpokladu, že existuje součinná hustota druhého řádu $\lambda^{(2)}$ bodového procesu Φ , 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 vzdáleností x a y .

Pozn.: Párová korelační funkce může nabývat hodnot v intervalu $[0, \infty)$. Označení „korelační funkce“ je proto poněkud zavádějící. Pro Poissonův bodový proces je $g(x, y) = 1$ (viz cvičení) a $K(r) = \omega_d r^d$, kde $\omega_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1 + d/2)}$ je objem d -rozměrné jednotkové koule. Pro stacionární a izotropní procesy odpovídají

hodnoty párové korelační funkce $g(r)$ větší než 1 tomu, že vzdálenosti r mezi body jsou typičtější než u modelu s úplnou prostorovou nezávislostí mezi body.

Věta 9. *Pro stacionární a izotropní proces 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 definici K -funkce případně vztah (1) podle věty 8 a definice 9, dostaneme

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

S využitím stacionarity a izotropie tak máme

$$\begin{aligned} K(r) &= \int \int g(\|x-y\|) \frac{\mathbf{1}_{[x \in B, \|x-y\| \leq r]}}{|B|} dx dy = \frac{1}{|B|} \int_B \int_B \mathbf{1}_{[\|u\| \leq r]} g(\|u\|) du dx \\ &= \int_{b(o,r)} g(\|u\|) du = \int_0^r \sigma_d s^{d-1} g(s) ds. \end{aligned}$$

Použili jsme substituci $u = x - y$ a polární dekompozici Lebesgueovy míry (sférické souřadnice). □

Pozn.: 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 je homogenní Poissonův proces a proces z článku [1]. V balíčku `spatstat` jeho realizace generuje funkce `rcell`. Proto se uvažují i další charakteristiky. Mezi nejdůležitější patří funkce založené na vzájemných vzdálenostech mezi body.

Definice 15. Nechť Φ je stacionární bodový proces. *Kontaktní distribuční funkce (spherical contact distribution function, empty space function, point-to-nearest-event distribution function)* je dána předpisem

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

Distribuční funkce vzdálenosti nejbližšího souseda (nearest neighbour distribution function, event-to-event distribution function) je definována jako

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

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

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

Pozn.: Tyto funkce lze definovat i pro nestacionární bodové procesy. Potom ovšem závisí na poloze, do které umístíme počátek. Rovněž místo koulí $b(o, r)$ v definici F a G lze uvažovat obecnější množiny.

U funkce G nás zajímá vzdálenost od bodu procesu k nejbližšímu bodu procesu, zatímco u funkce F se díváme na vzdálenost od daného bodu v prostoru k nejbližšímu bodu procesu. V případě homogenního Poissonova procesu si jsou obě funkce rovny (plyne z následujícího tvrzení) a platí $G(r) = F(r) = 1 - e^{-\lambda \omega_a r^d}$, tudíž je $J(r) = 1$. Hodnoty funkce J menší než 1 indikují shlukování bodů, zatímco funkce J větší než 1 indikují odpuzování bodů.

Tvrzení 10. (*Slivnyakova věta*) Pro Poissonův proces s rozdělením Π platí $P_x^1 = \Pi$ pro každé $x \in \mathbb{R}^d$.

Důkaz: [11], věta 7.3. □

2.6 Kótované bodové procesy

Kótovaný bodový proces dostaneme z bodového procesu, pokud každému bodu přiřadíme určitou veličinu (kótu).

Definice 16. Uvažujme separabilní úplný metrický prostor \mathcal{M} , kterému budeme říkat *prostor kót* (*mark space*). *Kótovaný bodový proces* (*marked point process*) je náhodná posloupnost $\Phi_m = \{(X_n, M_n)\}$ taková, že $\Phi = \cup_n X_n$ tvoří bodový proces na \mathbb{R}^d a M_n jsou náhodné elementy s hodnotami v \mathcal{M} . Speciálním případem je \mathcal{M} konečná (bez újmy na obecnosti $\mathcal{M} = \{1, \dots, k\}$), pak dostáváme *vícerozměrný bodový proces* (*multitype point process, multivariate point process*) $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_k)$, který je ekvivalentní k -tici bodových procesů Φ_1, \dots, Φ_k odpovídajícím k různým druhům bodů.

Stacionární kótované bodové procesy jsou takové, jejichž rozdělení je invariantní vůči transformacím, které posunou body procesu, ale zanechají kóty nezměněny. Tedy $\Phi_m + y = \{(X_n + y, M_n)\}$ má stejné rozdělení jako Φ_m pro každé $y \in \mathbb{R}^d$. Podobně jako pro nekótované bodové procesy lze pro kótované bodové procesy zavést míru intenzity, momentové míry vyšších řádů nebo Palmovo rozdělení. Analogicky platí Campbellova a Campbellova-Meckeova věta. Zájemce o podrobnosti může nahlédnout např. do [15].

Pro vícerozměrné bodové procesy se definují tzv. křížové momentové míry a křížové sumární statistiky. Například křížová K -funkce $K_{ij}(r)$ pro stacionární vícerozměrný bodový proces $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_k)$ s intenzitami $(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ je definována tak, že $\lambda_j K_{ij}(r)$ vyjadřuje střední počet bodů procesu Φ_j v kouli $b(o, r)$ za předpokladu, že v o je bod procesu Φ_i . Podobně lze zavést křížovou párovou korelační funkci nebo křížovou G -funkci, viz např. [9], kap. 4.4.

2.7 Modely bodových procesů

Coxovy procesy

Definice 17. Nechť Λ je náhodná σ -konečná difúzní míra na \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*.

Míra intenzity Coxova procesu je $\mathbb{E}\Phi(B) = \mathbb{E}[\mathbb{E}(\Phi(B) \mid \Lambda)] = \mathbb{E}\Lambda(B)$. Podobně se ukáže, že pro faktoriální momentovou míru druhého řádu platí $\alpha^{(2)}(B_1 \times B_2) = \mathbb{E}\Lambda(B_1)\Lambda(B_2)$. Využíváme toho, že pro Poissonův bodový proces je $\alpha^{(2)}(B_1 \times B_2) = \Lambda(B_1)\Lambda(B_2)$, viz cvičení. Pokud existuje náhodné pole $\tilde{\lambda}$, které je hustotou míry Λ vzhledem k Lebesgueově míře, tak součinná hustota (pokud existuje) Coxova procesu má tvar $\lambda^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \mathbb{E}\tilde{\lambda}(x_1) \cdots \tilde{\lambda}(x_n)$. Plyne to z vlastností Poissonova procesu a z Fubiniho věty pro nezáporné funkce (viz cvičení). Prázdné pravděpodobnosti Coxova procesu jsou

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

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

Pozn.: Smíšený Poissonův proces je stacionární proces s intenzitou $\mathbb{E}Y$. Platí totiž $\mathbb{E}\Phi(B) = \mathbb{E}\Lambda(B) = |B|\mathbb{E}Y$.

Shlukové procesy

Definice 19. Mějme bodový proces Φ_p (tzv. rodičovský proces) a pro každé $X \in \Phi_p$ necht Ψ_X je konečný bodový proces (dceřinný proces). Potom

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

se nazývá *shlukový bodový proces (cluster point process)*.

Definice 20. Necht Φ je shlukový proces takový, že Φ_p je Poissonův bodový proces a podmíněně při Φ_p jsou Ψ_X nezávislé bodové procesy. Potom Φ se nazývá *Poissonův shlukový bodový proces*.

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

Věta 11. Necht Φ je Poissonův shlukový proces a podmíněně při Φ_p je Ψ_X Poissonův proces s mírou intenzity Λ_X tak, 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 tvrzení 2. □

Definice 21. Necht Φ je Poissonův shlukový proces takový, že rodičovský proces Φ_p je nezávislý s centrovanými dceřinnými procesy $\Psi_X - X$. Necht body procesů $\Psi_X - X$ jsou nezávisle stejně rozdělené s hustotou p na \mathbb{R}^d a celkové počty bodů $\Psi_X(\mathbb{R}^d)$ dceřinných procesů jsou nezávisle stejně rozdělené náhodné veličiny. Pak Φ se nazývá *Neymanův-Scottův proces (Neyman-Scott process; rNeymanScott)*. Pokud navíc $\Psi_X(\mathbb{R}^d)$ mají Poissonovo rozdělení s intenzitou λ_c , jde o *Neymanův-Scottův Poissonův proces*. V tom případě podmíněně při Φ_p jsou Ψ_X nezávislé Poissonovy procesy s funkcí intenzity $\lambda_c p(\cdot - X)$.

Věta 12. Mějme Neymanův-Scottův 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 11 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 6

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

Podobně užitím věty 6 a vlastností Poissonova procesu dostaneme pro faktoriální momentovou míru druhého řádu procesu Φ

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\Lambda(B_1)\Lambda(B_2) &= \mathbb{E} \sum_{X,Y \in \Phi_p} \Lambda_X(B_1)\Lambda_Y(B_2) = \mathbb{E} \sum_{X,Y \in \Phi_p}^{\neq} \Lambda_X(B_1)\Lambda_Y(B_2) + \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi_p} \Lambda_X(B_1)\Lambda_X(B_2) \\ &= \lambda_p^2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \Lambda_x(B_1)\Lambda_y(B_2) dy dx + \lambda_p \int_{\mathbb{R}^d} \Lambda_x(B_1)\Lambda_x(B_2) dx \\ &= \lambda_p^2 \lambda_c^2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{B_1} \int_{B_2} p(u-x)p(v-y) dv du dy dx \\ &\quad + \lambda_p \lambda_c^2 \int_{\mathbb{R}^d} \int_{B_1} \int_{B_2} p(u-x)p(v-x) dv du dx \\ &= \lambda^2 \cdot |B_1| \cdot |B_2| + \lambda \lambda_c \int_{B_1} \int_{B_2} \int_{\mathbb{R}^d} p(u-x)p(v-x) dx dv du. \end{aligned}$$

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

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

Nyní stačí využít stacionarity: $g(u, v) = g(u-v, o) = g(u-v)$. □

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

- a) *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,
- b) *Matérnův shlukový proces*: p je hustota rovnoměrného rozdělení na kouli $b(o, R)$.

Knihovna `spatstat` umožňuje generování realizací těchto modelů pomocí funkcí `rThomas` a `rMatClust`.

Procesy s pevným jádrem

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 vyjít z Poissonova bodového procesu a některé body z něho vypustit. Takovéto operaci se říká *ztenčení* (*thinning*). Nejprve uvažujme případ tzv. *nezávislého ztenčení* (*independent thinning*), kdy odebrání daného bodu nezávisí na ostatních bodech.

Věta 13. *Nechť Φ je Poissonův bodový proces s mírou intenzity Λ , $B \in \mathcal{B}^d$ pevně daná množina, $p : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, 1]$ měřitelná funkce a $\{U_i\}$ nezávislé náhodné veličiny s rovnoměrným rozdělením na $(0, 1)$ a nezávislé na Φ . Položme $\Phi_{th} = \{X_i \in \Phi \cap B : U_i < p(X_i)\}$. Potom Φ_{th} je Poissonův bodový proces s mírou intenzity*

$$\Lambda_{th}(A) = \int_A p(y) \Lambda(dy), \quad A \subseteq B, A \in \mathcal{B}_0^d.$$

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 tvrzení 2. Pro $A \subseteq B$, $A \in \mathcal{B}_0^d$ je

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\Phi_{th}(A) = 0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}(\Phi(A) = n) \mathbb{P}(\Phi_{th}(A) = 0 \mid \Phi(A) = n) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Lambda(A)^n}{n!} e^{-\Lambda(A)} \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(U_i \geq p(X_i)) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Lambda(A)^n}{n!} e^{-\Lambda(A)} \left[\int_0^1 \int_A \mathbf{1}_{[u \geq p(x)]} \frac{\Lambda(dx)}{\Lambda(A)} du \right]^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\Lambda(A)}}{n!} \left[\int_A (1 - p(x)) \Lambda(dx) \right]^n \\ &= e^{-\Lambda(A)} \exp\left\{ \int_A (1 - p(x)) \Lambda(dx) \right\} = e^{-\int_A p(x) \Lambda(dx)}. \end{aligned}$$

Při výpočtu jsme využili větu 5. □

V definici následujících dvou procesů s pevným jádrem se využívá tzv. *závislé ztenčení* (*dependent thinning*).

Definice 22. 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 *Matérnův proces s pevným jádrem typ I* (*Matérn hard-core process I*; `rMaternI`). Bodový proces

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

kde $\{U(Y), Y \in \Phi\}$ jsou navzájem nezávislé náhodné veličiny, nezávislé na Φ a rovnoměrně rozdělené na intervalu $(0, 1)$, se nazývá *Matérnův proces s pevným jádrem typ II* (*Matérn hard-core process II*; $r\text{MaternII}$).

Věta 14. *Nechť Φ je homogenní Poissonův bodový proces s intenzitou λ . Bodové procesy Φ_I a Φ_{II} z definice 22 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

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

kde $\Phi_{th}^{(u)} = \{Y \in \Phi : U(Y) < u\}$ je nezávisle ztenčený Poissonův bodový proces. Podle věty 13 tak dostaneme

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

□

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

Definice 23. 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 $B \subseteq \cup_{i=1}^n b(X_i, r)$.

Pozn.: 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 blíže 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 $r\text{SSI}$.

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.

2.8 Konečné bodové procesy s hustotou

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

$$\begin{aligned} \Pi(U) &= \mathbb{P}(\Phi_P \in U) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}(\Phi_P(\mathbb{R}^d) = n) \mathbb{P}(\Phi_P \in U \mid \Phi_P(\mathbb{R}^d) = n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Lambda(\mathbb{R}^d)^n}{n!} e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_{\{\{x_1, \dots, x_n\} \in U\}} \frac{\Lambda(dx_1)}{\Lambda(\mathbb{R}^d)} \cdots \frac{\Lambda(dx_n)}{\Lambda(\mathbb{R}^d)} \\ &= e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \left[\mathbf{1}_{\{\emptyset \in U\}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_{\{\{x_1, \dots, x_n\} \in U\}} \Lambda(dx_1) \cdots \Lambda(dx_n) \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Budeme vyšetřovat bodové procesy Φ s hustotou p vzhledem k Π , tj. platí

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\Phi \in U) &= \int_U p(\varphi) \Pi(d\varphi) \\ &= e^{-\Lambda(\mathbb{R}^d)} \left[\mathbf{1}_{[\emptyset \in U]} p(\emptyset) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_{\{\{x_1, \dots, x_n\} \in U\}} p(\{x_1, \dots, x_n\}) \Lambda(dx_1) \cdots \Lambda(dx_n) \right] \\ &= \mathbb{E}p(\Phi_P) \mathbf{1}_U(\Phi_P),\end{aligned}$$

kde Φ_P je Poissonův proces s rozdělením Π . Takový proces Φ 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 homogennímu Poissonovu procesu s jednotkovou intenzitou na B .

Systém konečných bodových konfigurací budeme značit

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

Definice 24. Řekneme, že měřitelná funkce $h : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ je *lokálně stabilní (locally stable)*, jestliže existuje konstanta $K > 0$ tak, že pro každé $\varphi \in \mathcal{N}_f$ a každé $x \in \mathbb{R}^d$ platí $h(\varphi \cup \{x\}) \leq Kh(\varphi)$. Funkce h je *stabilní ve smyslu Ruelleho (Ruelle stable)*, jestliže existují konstanty $K > 0$ a $c > 0$ tak, že $h(\varphi) \leq cK^{\varphi(\mathbb{R}^d)}$ pro každé $\varphi \in \mathcal{N}_f$.

Definice 25. 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 15.

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

Důkaz: a) Existuje $K > 0$ tak, že $h(\varphi \cup \{x\}) \leq Kh(\varphi) \quad \forall \varphi \in \mathcal{N}_f, x \in \mathbb{R}^d$. Položme $c = h(\emptyset)$. Tvrzení se lehce dokáže indukci podle $n = \varphi(\mathbb{R}^d)$. Pro $n = 0$ je zřejmé $h(\varphi) = cK^n$. Pokud tvrzení platí pro n , pak $h(\varphi \cup \{x\}) \leq Kh(\varphi) \leq KcK^n = cK^{n+1}$.

b)

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

První rovnost plyne z (2) standardním postupem teorie míry.

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

Definice 26. Pro bodový proces Φ s hustotou p je *Papangelouova podmíněná intenzita (Papangelou conditional intensity)* definována jako

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

Definice 27. V mnoha aplikacích se vyskytují *bodové procesy s párovými interakcemi (pairwise interaction point processes)*, které mají hustotu vzhledem k rozdělení Poissonova procesu tvaru

$$p(\varphi) = \alpha \prod_{x \in \varphi} g(\{x\}) \prod_{\{x, y\} \subseteq \varphi} g(\{x, y\}), \quad (3)$$

kde g je tzv. *interakční funkce* (*interaction function*), tedy nezáporná funkce taková, že pravá strana v (3) je 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.

Funkce (3) je zřejmě dědičná a pokud $g(\{x\}) \leq K$ a $g(\{x, y\}) \leq 1$, tak je i lokálně stabilní (Papangelouova podmíněná intenzita je omezená). Papangelouova podmíněná intenzita má tvar

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

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 28. Mějme reálné parametry $\beta > 0$, $0 \leq \gamma \leq 1$ a $R > 0$. *Straussův proces* (*Strauss process*) je bodový proces Φ s hustotou $p(\varphi) = \alpha \beta^{|\varphi|} \gamma^{S_R(\varphi)}$, 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 $\alpha = \left(\int_{\mathcal{N}_f} \beta^{|\varphi|} \gamma^{S_R(\varphi)} \Pi(d\varphi) \right)^{-1}$ 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 $S(\varphi) = 0$ (pokládáme $0^0 = 1$) a výsledkem je bodový proces s pevným jádrem, tj. žádné dva body procesu nemůžou být blíže než R .

Strauss nazval tento proces modelem shlukování [16], to by odpovídalo případu $\gamma > 1$, pro který však $p(\varphi)$ není integrovatelná. Pro $0 \leq \gamma \leq 1$ plyne 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 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.

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

Markovské bodové procesy

Definice 29. 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 30. 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 31. Necht 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.

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

Definice 32. 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 16. (*Hammersleyho-Cliffordova-Ripleyho-Kellyho věta*) Měřitelná funkce $h : \mathcal{N}_f \rightarrow \mathbb{R}^+$ je markovská právě tehdy, když existuje interakční funkce g taková, že

$$h(\varphi) = \prod_{\psi \subseteq \varphi} g(\psi), \quad \varphi \in \mathcal{N}_f. \quad (4)$$

Důkaz: Jedná implikace je zřejmá. Funkce h dána vztahem (4) 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 φ je klika. Přitom pokládáme $0/0 = 1$. Je-li $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) = 0$, potom existuje $\psi \subsetneq \varphi$ tak, že $g(\psi) = 0$, a proto $h(\psi) = 0$, což z dědičnosti implikuje $h(\varphi) = 0$. Funkce g je tak korektně definována a je to interakční funkce. Abychom ukázali, že platí (4) rozlišíme tři případy.

1. φ je klika: $h(\varphi) = \prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi)$.
2. $h(\varphi) = 0$ a φ není klika: existují $x, y \in \varphi$ tak, že $x \not\sim y$. Pokud $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) = 0$, pak $h(\varphi) = 0 = \prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi)$. Je-li $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) > 0$, tak z lokální markovské vlastnosti $\frac{h(\varphi)}{h(\varphi \setminus \{x\})}$ nezávisí na y , a proto

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

Je-li $\varphi \setminus \{y\}$ klika, je $g(\varphi \setminus \{y\}) = 0$, což je spor s tím, že $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) > 0$. Pokud $\varphi \setminus \{y\}$ není klika, můžeme úvahu opakovat, dokud nedojdeme ke klice a tím dostaneme spor s $\prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi) > 0$. Odtud tak plyne $h(\varphi) = 0 = \prod_{\psi \subsetneq \varphi} g(\psi)$.

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 $h(\psi) > 0$. Vztah ukážeme 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. 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 28. Papangelouova podmíněná intenzita $\lambda^*(\varphi, x) = \beta \gamma^{\varphi(\partial\{x\})}$ závisí pouze na x a $\varphi \cap \partial\{x\}$.

Podle věty 16 má 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*) $Z = 1/g(\emptyset)$.

2.9 Nekonečné gibbsovské bodové procesy

Rozšíření konečných markovských (gibbsovských) bodových procesů na nekonečné procesy je možné provést několika ekvivalentními způsoby. První způsob je založen na lokálních specifikacích, druhý na integrální charakterizaci a třetí na diferenciální charakterizaci. Zde uvedeme pouze základní přehled, ve kterém nebudeme zabíhat do technických detailů této teorie.

Nechť Φ je markovský bodový proces s hustotou p vzhledem k rozdělení Π Poissonova procesu s konečnou mírou intenzity. Pro $A \in \mathcal{B}_0^d$ budeme značit $\Phi_A = \Phi \cap A$ restrikcí procesu Φ na množinu A . Potom

$$\begin{aligned} p(\varphi) &= \prod_{\psi \subseteq \varphi} g(\psi) = \prod_{\psi \subseteq \partial A \cap \varphi} g(\psi) \prod_{\psi \subseteq A^c \cap \varphi} g(\psi) \left(\prod_{\psi \subseteq (\partial A \setminus A) \cap \varphi} g(\psi) \right)^{-1} \\ &= p(\varphi_{A^c}) \frac{p(\varphi_{\partial A \setminus A} \cup \varphi_A)}{p(\varphi_{\partial A \setminus A})} = p(\varphi_{A^c}) \lambda^*(\varphi_{\partial A \setminus A}, \varphi_A), \end{aligned}$$

kde $\lambda^*(\varphi_{\partial A \setminus A}, \varphi_A)$ je zobecnění Papangelouovy podmíněné intenzity.

Označme Π_A normovanou restrikcí míry Π na množinu A , podobně p_A normovanou restrikcí hustoty p na množinu A , $\mathcal{N}_A = \{\varphi_A : \varphi \in \mathcal{N}\}$ bodové konfigurace na A a $\mathfrak{N}_A = \{U_A : U \in \mathfrak{N}\}$, kde $U_A = \{\varphi_A : \varphi \in U\}$, stopu σ -algebry \mathfrak{N} . Pokud $p(\varphi_{A^c}) > 0$, tak podmíněná hustota Φ_A za podmínky $\Phi_{A^c} = \varphi_{A^c}$ je

$$\begin{aligned} p_A(\varphi_A | \varphi_{A^c}) &= \frac{p(\varphi_A \cup \varphi_{A^c})}{\int p(\psi_A \cup \varphi_{A^c}) \Pi_A(d\psi_A)} = \frac{p(\varphi_{A^c}) \lambda^*(\varphi_{\partial A \setminus A}, \varphi_A)}{p(\varphi_{A^c}) \int \lambda^*(\varphi_{\partial A \setminus A}, \psi_A) \Pi_A(d\psi_A)} \\ &= c_A(\varphi_{\partial A \setminus A}) \lambda^*(\varphi_{\partial A \setminus A}, \varphi_A) \end{aligned}$$

a nezávisí na $\varphi_{A^c \setminus \partial A}$.

Definice 33. *Lokální specifikací (local specification)* k hustotě p vzhledem k rozdělení Π Poissonova procesu s lokálně konečnou mírou intenzity rozumíme systém podmíněných hustot $p_A(\varphi_A | \varphi_{\partial A \setminus A}) = c_A(\varphi_{\partial A \setminus A}) \lambda^*(\varphi_{\partial A \setminus A}, \varphi_A)$, $A \in \mathcal{B}_0^d$, $\varphi_A \in \mathcal{N}_A$, $\varphi_{\partial A \setminus A} \in \mathcal{N}_{\partial A \setminus A}$ s vlastností $p(\varphi_{\partial A \setminus A}) > 0$.

Definice 34. Bodový proces Φ je *Gibbsův*, jestliže jeho podmíněná rozdělení souhlasí s lokální specifikací, tj.

$$\mathbb{P}(\Phi_A \in U_A | \Phi_{A^c} = \varphi_{A^c}) = \int_{U_A} p_A(\varphi_A | \varphi_{\partial A \setminus A}) \Pi_A(d\varphi_A), \quad A \in \mathcal{B}_0^d, U_A \in \mathfrak{N}_A.$$

Příklad: Nechť $p_A(\varphi_A | \varphi_{\partial A \setminus A}) = 1$ pro všechny hustoty lokální specifikace. To znamená, že $\mathbb{P}(\Phi_A \in U_A | \Phi_{A^c} = \varphi_{A^c}) = \Pi_A(U_A)$. Pokud Φ je Poissonův bodový proces s rozdělením Π , tak $\mathbb{P}(\Phi_A \in U_A | \Phi_{A^c} = \varphi_{A^c}) = \mathbb{P}(\Phi_A \in U_A) = \Pi_A(U_A)$. Tedy Poissonův bodový proces je Gibbsův.

Definice 35. Nechť Λ je lokálně konečná míra na \mathbb{R}^d a Φ je bodový proces s rozdělením Π . Pokud existuje měřitelná funkce $\lambda^* : \mathcal{N} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^+$ tak, že pro libovolnou měřitelnou $h : \mathbb{R}^d \times \mathcal{N} \rightarrow \mathbb{R}^+$ platí

$$\mathbb{E} \int_{\mathbb{R}^d} \lambda^*(\Phi, x) h(x, \Phi) \Lambda(dx) = \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} h(X, \Phi \setminus \{X\}), \quad (5)$$

potom Φ je *Gibbsův bodový proces (Gibbs point process)* vzhledem k Λ .

Pozn.: Funkce λ^* je podmíněná intenzita. Podmínka z definice je ekvivalentní rovnosti:

$$\int_U \int_B \lambda^*(\varphi, x) \Lambda(dx) \Pi(d\varphi) = C^1(B \times U), \quad B \in \mathcal{B}^d, U \in \mathfrak{N}.$$

Podmíněná intenzita je tak Radonova-Nikodymova derivace míry C^1 vzhledem k míře $\Lambda \times \Pi$.

Použijeme-li na pravou stranu Campbellovu-Meckeho větu (věta 7), můžeme (5) přepsat jako

$$\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} \lambda^*(\varphi, x) h(x, \varphi) \Pi(d\varphi) \Lambda(dx) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathcal{N}} h(x, \varphi) P_x^1(d\varphi) \Lambda(dx). \quad (6)$$

Podmíněná intenzita λ^* tak souvisí s Radonovou-Nikodymovou derivací (pokud existuje) redukovaného Palmova rozdělení P_x^1 vzhledem k rozdělení Π bodového procesu s lokálně konečnou mírou intenzity Λ . Na tomto vztahu je založena třetí možnost, jak definovat Gibbsův bodový proces. Pokud má proces s rozdělením Π funkci intenzity λ (λ je hustota Λ), tak platí

$$\frac{dP_x^1}{d\Pi}(\varphi) = \frac{\lambda^*(\varphi, x)}{\lambda(x)},$$

neboli

$$\int h(x, \varphi) P_x^!(d\varphi) = \int \frac{\lambda^*(\varphi, x)}{\lambda(x)} h(x, \varphi) \Pi(d\varphi)$$

pro libovolnou nezápornou měřitelnou funkcí $h : \mathbb{R}^d \times \mathcal{N} \rightarrow \mathbb{R}^+$.

Příklad: Pro $\lambda^* = 1$ je (5) i (6) splněno pro Poissonův bodový proces s mírou intenzity Λ . Plyne to z tvrzení 10.

Příklad: Necht Φ je konečný markovský s hustotou p vzhledem k rozdělení Π Poissonova bodového procesu Φ_P s mírou intenzity Λ . Pokud λ^* je Papangelouova podmíněná intenzita Φ , tak platí (5). Pravá strana (5) je

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi} h(X, \Phi \setminus \{X\}) &= \int_{\mathcal{N}} \sum_{x \in \varphi} h(x, \varphi \setminus \{x\}) p(\varphi) \Pi(d\varphi) = \mathbb{E} \sum_{X \in \Phi_P} h'(X, \Phi_P \setminus \{X\}) \\ &= \int_{\mathcal{N}} \int_{\mathbb{R}^d} h'(x, \varphi) \Lambda(dx) \Pi(d\varphi). \end{aligned}$$

Označili jsme $h'(x, \varphi \setminus \{x\}) = h(x, \varphi \setminus \{x\})p(\varphi)$ a v poslední rovnosti využili větu 7 a tvrzení 10. Levá strana (5) se dá upravit následovně:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \int_{\mathbb{R}^d} \lambda^*(\Phi, x) h(x, \Phi) \Lambda(dx) &= \int_{\mathcal{N}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{p(\varphi \cup \{x\})}{p(\varphi)} h(x, \varphi) p(\varphi) \Lambda(dx) \Pi(d\varphi) \\ &= \int_{\mathcal{N}} \int_{\mathbb{R}^d} h'(x, \varphi) \Lambda(dx) \Pi(d\varphi). \end{aligned}$$

2.10 Statistika bodových procesů

Předpokládejme, že máme realizaci φ bodového procesu Φ na množině $W \in \mathcal{B}_0^d$, tzv. *okno pozorování (observation window)*. V minulé podkapitole jsme viděli různé modely nekonečných bodových procesů, okno W v tom případě představuje omezenou oblast, ve které je realizace procesu pozorována. Oproti tomu konečné bodové procesy s hustotou vzhledem k homogennímu Poissonovu procesu na omezené množině lze modelovat přímo na množině W . Rovnou z definice tak nepřipouštíme, že by proces mohl mít body mimo W .

Cílem je odhadnout charakteristiky 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 doktorandské přednášce *Prostorové modelování, prostorová statistika 1*.

Odhad funkce intenzity

Necht Φ je stacionární bodový proces s intenzitou λ . Přímou 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)*

$$\hat{\lambda}(x) = \sum_{y \in \varphi} \frac{k_b(x-y)}{c_{W,b}(y)}, \quad x \in W,$$

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

$$c_{W,b}(y) = \int_W k_b(x-y) dx$$

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*:

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

Všimněme si, že odhad je nestranný v tom smyslu, že platí

$$\int_W \hat{\lambda}(x) dx = \varphi(W).$$

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 (1) 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 . 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), 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)*. 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 Campbellovy věty (věta 6).

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. Jedna možnost je 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 6). 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"`, `correction="Ripley"`: Jiný korekční faktor navrhl B. Ripley:

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

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:

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

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.

Pro nestacionární procesy lze analogicky odhadovat funkci K_{inhom} z definice 13 (Kinhom).

Odhad párové korelační funkce

Podle věty 9 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 `splinu`). 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`.

1. *nekorigovaný odhad (uncorrected estimator)*, `raw`: 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 x k nejbližšímu sousedu. Z Campbellovy-Meckeho věty (věta 7) 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 $x \in \Phi \cap W$. Pokud nahradíme $e(x)$ vzdáleností $e^*(x) = d(x, (\Phi \setminus \{x\}) \cap W)$, kterou jsme schopni pozorovat, dostáváme následující naivní odhad

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

2. *minusový odhad (border corrected estimate)*, rs: Přejdeme-li opět k erodovanému oknu $W_{\ominus r}$, dostaneme podílově nestranný odhad

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

3. *Kaplanův-Meierův odhad (Kaplan-Meier estimate)*, km: Okrajové efekty lze chápat jako druh cenzorování. Můžeme zavést odhad Kaplanova-Meierova typu:

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

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 .

4. *odhad rizikové funkce (estimate of hazard function)*, hazard: Pokud máme absolutně spojitou distribuční funkci $H(t)$ s hustotou $h(t)$, tak riziková funkce 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.

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. Kaplan-Meierův odhad je vydatnější než minusový odhad.

Odhad kontaktní distribuční funkce

K výpočtu následujících odhadů kontaktní distribuční funkce lze použít Fest.

1. *nekorigovaný odhad (uncorrected estimator)*, raw: Zvolme v okně W mříž I_r a pro každý bod mříže najděme nejbližší bod procesu, ten ovšem může ležet mimo okno. Pokud budeme naivně uvažovat pouze body $\Phi \cap W$, dostaneme

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

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.

2. *minusový odhad (border corrected estimate)*, rs: Zvolme v okně $W_{\ominus r}$ mříž I_r . Označme $d(x) = d(x, \Phi)$ vzdálenost x od nejbližšího bodu procesu. Potom

$$\hat{F}_b(r) = \frac{1}{\#I_r} \sum_{x \in I_r} \mathbf{1}_{[d(x) \leq r]}$$

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

3. Kaplanův-Meierův odhad (Kaplan-Meier estimate), km:

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

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

4. odhad rizikové funkce (estimate of hazard function), hazard: Kontaktní distribuční funkce $F(r)$ stacionárního procesu je absolutně spojitá a riziková funkce $\lambda_h(r)$ existuje. Odhad je založen na Kaplan-Meierově odhadu $\hat{F}_{KM}(r)$.

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, un)*, *minusový (border corrected, rs)*, *Kaplanův-Meierův (Kaplan-Meier, km)*.

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 dva odhady jsou mírně vychýlené (podíl dvou přibližně nestranných odhadů). Logaritmus Kaplanova-Meierova odhadu je nestranný odhad J .

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

3. Geostatistika

3.1 Náhodná pole

Při modelování geostatistických dat je základním pojmem náhodné pole.

Definice 36. Nechtě 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 pravděpodobnostním prostorem $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$.

Nejvíce studována jsou gaussovská náhodná pole.

Definice 37. 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.

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

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 38. Náhodné pole $\{Z(x) : x \in D\}$ je *striktně stacionární (strictly stationary, strongly 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 (weakly 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*).

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

Definice 39. 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 $x - y$.

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

$$\text{var}(Z(x + h) - Z(x)) = \text{var} Z(x + h) + \text{var} Z(x) - 2 \text{cov}(Z(x), Z(x + h)) = 2(C(o) - C(h)). \quad (7)$$

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 40. 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 $x \in D$.

Pozn.: Uvědomte si, že L_2 -spojitost neznamená spojitost realizací náhodného pole.

O hladkosti náhodného pole vypovídá jeho diferencovatelnost.

Definice 41. 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 42. 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.

Pozn.: Pro kovariančně stacionární náhodná pole je z (7) vidět vztah mezi variogramem 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*).

Definice 43. 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

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

Pozn.: Zbytkový rozptyl znamená, že opakovaná měření ve stejném místě dávají rozdílné hodnoty. Vyskytuje 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: $C(h) = C(-h)$, $C(o) = \text{var } Z(x) \geq 0$, $|C(h)| \leq C(o)$ a $C(h)$ je 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 17. *Pro kovariančně stacionární náhodné pole Z 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 $n \in \mathbb{N}$, $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ a $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta_1, \dots, \beta_n \in \mathbb{R}$.

Pro vnitřně stacionární náhodné pole Z 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 $n \in \mathbb{N}$, $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ 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 kovariancí 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 identity

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

která 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 44. Funkce $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ se nazývá *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 $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ je *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 18. Kovarianční funkce kovariančně stacionárního náhodného pole je pozitivně semidefinitní. Variogram vnitřně stacionárního náhodného pole je podmíněně negativně definitní.

Důkaz: Z lemmatu 17 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

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

□

Pozn.: Platí dokonce, že třída všech kovariogramů kovariančně stacionárních náhodných polí splývá s třídou pozitivně semidefinitních funkcí, tj. ke každé pozitivně semidefinitní funkci C existuje náhodné pole takové, že C je jeho kovarianční funkce.

Spektrální rozklad

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

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

kde S je tzv. *spektrální distribuční funkce* (spectral distribution function). Pokud existuje hustota $s(\omega)$ funkce $S(\omega)$, nazývá se *spektrální hustota* (spectral density). Inverzní formule pro spektrální hustotu má tvar

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

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

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

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 cvičení). Funkce $H(u)$ je neklesající na \mathbb{R}^+ s konečnou limitou pro $u \rightarrow \infty$ a souvisí se spektrální distribuční funkcí vztahem $H(u) = \int_{b(o,u)} dS(\omega)$. 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 $\lim_{d \rightarrow \infty} \Omega_d(t) = e^{-t^2}$.

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 (7) 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. V tom případě se odhady vyhlazují tím, že se uvažují dvojice bodů, jejichž vzdálenost je přibližně h . Jiná možnost je použít vyhlazení pomocí jádrových funkcí:

$$2\hat{\gamma}(h) = \frac{\sum_{i,j=1}^n (Z(x_i) - Z(x_j))^2 k_b(\|x_i - x_j\| - \|h\|)}{\sum_{i,j=1}^n k_b(\|x_i - x_j\| - \|h\|)}.$$

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 $c_s \geq 0$, $\varrho > 0$. Práh 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):

$$2\gamma(h) = c_0 \mathbf{1}_{[h \neq 0]} + c_e (1 - \exp\{-(\|h\|/a)^\nu\}),$$

kde $c_e \geq 0$, $a > 0$ a $0 < \nu \leq 2$. Práh 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: $C(h) = \sigma^2 \frac{|b(\sigma, \theta) \cap b(h, \theta)|}{|b(\sigma, \theta)|}$ nebo zobecněný exponenciální: $C(h) = \sigma^2 \exp\{-(\|h\|/a)^\nu\}$. 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 cvičení). 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 izotropního 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 $z = (z(x_1), \dots, z(x_n))^T$ tento tvar:

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

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

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

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)*, viz cvičení.

3.3 Krigování

Naším cílem je nalezení predikce $\hat{Z}(x_0)$ hodnoty $Z(x_0)$ na základě vektoru $Z = (Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$. Pro metody prostorové predikce založené na minimalizaci střední kvadratické chyby se používá název *krigování (kriging)*. Ten je odvozen od D. G. Krigeho [8], jehož práce zabývající se odhadem zásob rudy je v geostatistice považována za průkopnickou.

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 $\mathbb{E}[Z(x_0) | Z]$ a chyba predikce je $\mathbb{E}[Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)]^2 = \mathbb{E} \text{var}[Z(x_0) | Z]$. V praxi však bývá obtížné podmíněnou střední hodnotu určit. Pro jednoduchost proto uvažujme lineární predikci $\hat{Z}(x_0) = \alpha + \beta^T Z$. Chceme odhadnout α a β tak, aby střední kvadratická chyba byla minimální. Z teorie lineárních modelů víme, že řešením je

$$\beta_0 = C_n^{-1} c_n, \quad \alpha_0 = \mu(x_0) - \mu_n^T \beta_0,$$

kde $\mu_n = (\mu(x_1), \dots, \mu(x_n))^T$ je vektor středních hodnot 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 kovarianční matice a $c_n = (C(x_0, x_1), \dots, C(x_0, x_n))^T$. Tedy

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

a chyba predikce je

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

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

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

Důkaz: Sdružené rozdělení $(Z(x_0), Z)^T$ 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 $Z(x_0) | Z$ normální se střední hodnotou $\mu(x_0) + c_n^T C_n^{-1} (Z - \mu_n)$ a rozptylem $\text{var } Z(x_0) - c_n^T C_n^{-1} c_n$. Nejlepší (ne nutně lineární) predikce $Z(x_0)$ je podmíněná střední hodnota $\mathbb{E}[Z(x_0) | Z]$. □

Problém je, že μ_n , $\mu(x_0)$, 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.

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

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

Prostorová predikce za těchto předpokladů se označuje jako *obyčejné krigování (ordinary kriging)*. Pro vnitřně stacionární náhodné pole je podle lemmatu 17

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

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

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

kde $\gamma_n = (\gamma(x_0 - x_1), \dots, \gamma(x_0 - x_n))^T$ 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 $z = (z(x_1), \dots, z(x_n))^T$ má tvar $\lambda_1 z(x_1) + \dots + \lambda_n z(x_n)$, kde λ_i jsou složky vektoru $\lambda = \left(\gamma_n + \mathbf{1} \frac{1 - \mathbf{1}^T \Gamma_n^{-1} \gamma_n}{\mathbf{1}^T \Gamma_n^{-1} \mathbf{1}} \right)^T \Gamma_n^{-1}$ 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.

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 $f = (f_0(x_0), \dots, f_p(x_0))^T$ 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

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

mluvíme o *univerzálním krigování* (*universal kriging*). Tato predikce je nestranná, neboť

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

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

$$\lambda = (\gamma_n + F(F^T\Gamma_n^{-1}F)^{-1}(f - F^T\Gamma_n^{-1}\gamma_n))^T \Gamma_n^{-1}.$$

Chyba predikce je

$$\gamma_n^T \Gamma_n^{-1} \gamma_n + (f - F^T \Gamma_n^{-1} \gamma_n)^T (F^T \Gamma_n^{-1} F)^{-1} (f - F^T \Gamma_n^{-1} \gamma_n).$$

Pomocí kovariancí lze predikční váhy přepsat jako

$$\lambda = (c_n + F(F^T C_n^{-1} F)^{-1} (f - F^T C_n^{-1} c_n))^T C_n^{-1},$$

chybu predikce jako

$$C(o) - c_n^T C_n^{-1} c_n + (f - F^T C_n^{-1} c_n)^T (F^T C_n^{-1} F)^{-1} (f - F^T C_n^{-1} c_n).$$

Pomocí zobecněných nejmenších čtverců lze pak odhadnout i parametr β :

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

Predikce se tak dá zapsat ve tvaru

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

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 obvyčejného krigování plug-in predikce

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

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

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

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 $Z(x) = F(x)\beta + e(x)$, kde $\{e(x) : x \in D\}$ 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 β známé, pak $e(x) = Z(x) - F(x)\beta$ a z hodnot $e = (e(x_1), \dots, e(x_n))^T$ bychom mohli odhadnout θ . Jenže parametr β je neznámý. Pokud je pole $\{e(x) : x \in D\}$ slabě stacionární s kovarianční funkcí $C_\theta(h)$, tak dostaneme odhad β pomocí metody zobecněných nejmenších čtverců

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

Tento odhad však vyžaduje znalost parametru θ . Znamená to, že nemůžeme rozumně odhadnout θ bez znalostí β a na druhou stranu k odhadu β 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 β nezávisle na θ , např. metodou obyčejných nejmenších čtverců: $\hat{\beta} = (F^T F)^{-1} F^T Z$,
2. spočteme rezidua $r = Z - F\hat{\beta}$,
3. odhadneme parametrický model variogramu nebo kovariogramu reziduí a dostaneme $\hat{\theta}$,
4. spočteme nový odhad $\hat{\beta}$ jako $\hat{\beta} = (F^T C_n(\hat{\theta})^{-1} F)^{-1} F^T C_n(\hat{\theta})^{-1} Z$,
5. opakujeme kroky 2.-4., až dokud relativní změny v odhadech β 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 β a θ současně.

3.5 Bayesovský přístup

Na základě pozorovaných dat z je v klasickém přístupu nejlepší predikce $\mathbb{E}[Z(x_0) | Z = z]$ a její chyba je rovna $\text{var}[Z(x_0) | Z = z]$. Často nás však spíše než střední hodnota nebo rozptyl zajímá celé podmíněné rozdělení $Z(x_0)$ za podmínky $Z = z$, tzv. *predikční rozdělení* (*predictive distribution*). V bayesovském přístupu je predikční 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 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 Z při daném θ hustotu $f(z | \theta)$, tak *aposteriorní* (*posterior*) *rozdělení* θ za podmínky $Z = z$ je dáno Bayesovou větou

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

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

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

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

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

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

Příklad: Uvažujme lineární model

$$Z(x) = F(x)\beta + e(x),$$

kde $F(x) = (f_0(x), \dots, f_p(x))^T$ je vektor vysvětlujících proměnných, $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)^T$ 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 $Z = (Z(x_1), \dots, Z(x_n))^T$. 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 $\beta | Z$ 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 $(Z, Z(x_0))^T$ je mnohorozměrné normální $N_{n+1}(F_{n0}^T \beta, C_{n0})$, kde

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

a

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

$c_n = (C(x_0 - x_1), \dots, C(x_0 - x_n))^T$. Predikční hustotu dostaneme z vyjádření

$$f(z_0 | z) = \int f(z_0 | z, \beta) p(\beta | z) d\beta,$$

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

$$(F(x_0)^T - c_n^T C_n^{-1} F) Q^* Q^{-1} m + [c_n^T C_n^{-1} + (F(x_0)^T - c_n^T C_n^{-1} F) Q^* F^T C_n^{-1}] Z$$

a rozptylem

$$C(o) - c_n^T C_n^{-1} c_n + (F(x_0)^T - c_n^T C_n^{-1} F) Q^* (F(x_0)^T - c_n^T C_n^{-1} F)^T.$$

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

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

kde $c_B = (\text{cov}(Z(B), Z(x_1)), \dots, \text{cov}(Z(B), Z(x_n)))^T$. 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 $\mathbb{P}(Z(x_0) \leq y \mid Z)$, 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, pokud $i \sim j$. Opět budeme používat označení klika (viz definice 32) 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 $Z_A = \{Z_j, j \in A\}$. Označme $p(z)$ hustotu náhodného pole $\{Z_i, i \in L\}$ vzhledem k σ -konečné míře ν na S^L . Proměnná $z = (z_i, i \in L)$ je prvek prostoru S^L . Opět budeme zkráceně psát $z_A = (z_i, i \in A)$ a dále $z_A w_B$ 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 45. Náhodné pole $\{Z_i, i \in L\}$ se nazývá *markovské* vzhledem k relaci \sim , jestliže podmíněné rozdělení $Z_i \mid Z_{-i}$ je stejné jako podmíněné rozdělení $Z_i \mid Z_{\partial i}$. V řeči podmíněných hustot to znamená, že $p(z_i \mid z_{-i}) = p(z_i \mid z_{\partial i})$ pro ν -s.v. $z = (z_i, i \in L) \in S^L$ splňující $p(z) > 0$. Hustoty $p(z_i \mid z_{\partial i})$ se nazývají *lokální charakteristiky* (*local characteristics*).

Pozn.: 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 20. (*Hammersleyho-Cliffordova věta*) Náhodné pole s hustotou splňující $p(z) > 0$ pro každé $z \in S^L$ je markovské právě tehdy, když existují funkce $g_C : S^C \rightarrow \mathbb{R}^+$ takové, že

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

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

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

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

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

$$\Psi_A(z_A) = -\log p(z_A w_{L \setminus A}) \quad \text{a} \quad \Phi_A(z_A) = \sum_{B \subseteq A} (-1)^{|A|-|B|} \Psi_B(z_B).$$

Z lemmatu 21 plyne, že $\Psi_A(z_A) = \sum_{B \subseteq A} \Phi_B(z_B)$. Pro hustotu $p(z)$ dostáváme

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

kde $g_B(z_B) = \exp(-\Phi_B(z_B))$. Zbývá tak ukázat, že pokud B není klika, tak $g_B = 1$, neboli $\Phi_B = 0$. Pokud B není klika, tak existují $i, j \in B$, $i \neq j$. 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

$$\begin{aligned} \Phi_B(z_B) &= \sum_{A \subseteq B} (-1)^{|B|-|A|} \Psi_A(z_A) \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} (\Psi_A(z_A) - \Psi_{A_1}(z_{A_1}) - \Psi_{A_2}(z_{A_2}) + \Psi_{A_3}(z_{A_3})) \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} \log \frac{p(z_{A_1} w_{L \setminus A_1}) p(z_{A_2} w_{L \setminus A_2})}{p(z_{A_3} w_{L \setminus A_3}) p(z_A w_{L \setminus A})} \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} \log \frac{p(z_i | z_A w_{L \setminus A_1}) p(w_i | z_{A_2} w_{L \setminus A_3})}{p(z_i | z_{A_2} w_{L \setminus A_3}) p(w_i | z_A w_{L \setminus A_1})} \\ &= \sum_{A \subseteq B \setminus \{i, j\}} (-1)^{|B|-|A|} \log \frac{p(z_i | z_A w_{L \setminus A_3}) p(w_i | z_{A_2} w_{L \setminus A_3})}{p(z_i | z_{A_2} w_{L \setminus A_3}) p(w_i | z_A w_{L \setminus A_3})} = 0. \end{aligned}$$

Využili jsme vztahu $p(z_i | z_A w_{L \setminus A_1}) = p(z_i | z_A w_{L \setminus A_3}) = p(z_i | z_{A_2} w_{L \setminus A_3})$, který plyne z markovské vlastnosti plyne a toho, že $i \neq j$.

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

Lemma 21. (*Möbiova inverzní formule*) *Nechť Φ, Ψ jsou reálné funkce definované na potenční množině množiny L . Pak platí*

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

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 $A \setminus D = \emptyset$.

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

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

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

Pozn.: Hammersleyho-Cliffordova věta říká, že každé náhodné pole s všude kladnou hustotou má Gibbsovo rozdělení. Místo abychom specifikovali podmíněná rozdělení přímo, lze je zkonstruovat pomocí volby potenciálových funkcí Φ_C . Protože vyjádření

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

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

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

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 $C \neq \emptyset$)

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

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

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

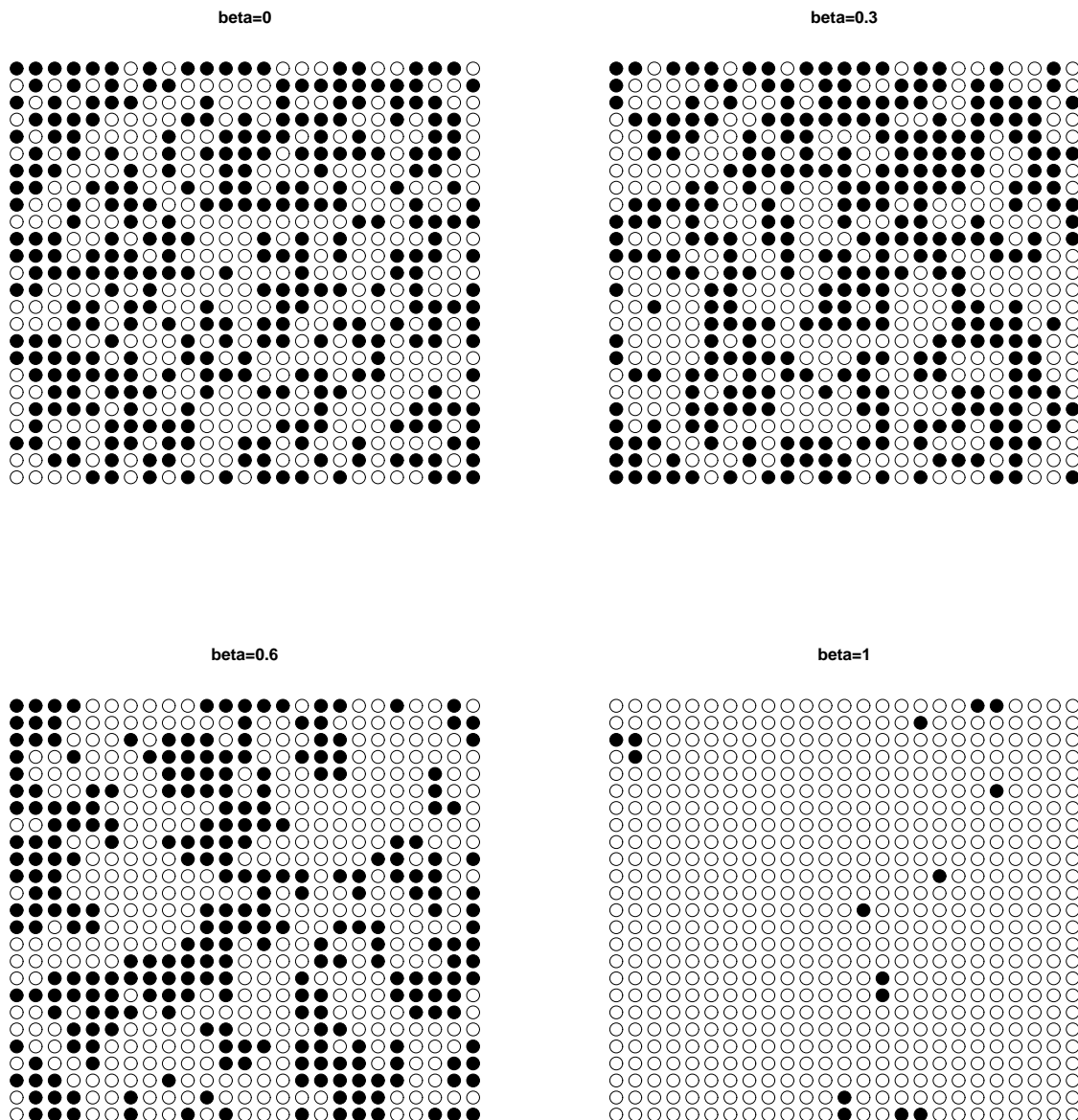
kde

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

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

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

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 následujících obrázcích jsou 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*) [7]. 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, 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 $p(z) = \exp(-E/T) = \exp(-\beta E)$. 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

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

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

$$p(z_i \mid z_{\partial i}) = \binom{n_c}{z_i} \pi(z_{\partial i})^{z_i} (1 - \pi(z_{\partial i}))^{n_c - z_i} = \binom{n_c}{z_i} (1 - \pi(z_{\partial i}))^{n_c} \exp\left\{z_i \log\left(\frac{\pi(z_{\partial i})}{1 - \pi(z_{\partial i})}\right)\right\},$$

tedy $Z_i \mid Z_{\partial i} = z_{\partial i}$ má binomické rozdělení s parametry n_c a $\pi(z_{\partial i})$. Předpokládejme, že $\pi(z_{\partial i})$ splňují

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

Potom dostáváme markovské náhodné pole s potenciály $\Phi_{\{i\}}(z_i) = \beta_i z_i - \log \binom{n_c}{z_i}$, $\Phi_{\{i,j\}}(z_i z_j) = \beta_{ij} z_i z_j$ a $\Phi_C(z_C) = 0$ 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 závislou na počtech v okolních místech:

$$p(z_i \mid z_{\partial i}) = \exp(-\lambda(z_{\partial i})) \frac{\lambda(z_{\partial i})^{z_i}}{z_i!} = \exp(-\lambda(z_{\partial i}) + z_i \log \lambda(z_{\partial i}) - \log z_i!).$$

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

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

Musíme však ještě zajistit konečnost normující konstanty

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

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 47. Necht $Z = \{Z_i, i \in L\}$ má n -rozměrné normální rozdělení se střední hodnotou μ a regulární kovarianční 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 Z je *gaussovské markovské náhodné pole* (*Gaussian Markov random field*), jestliže je markovské vzhledem k relaci \sim .

Sdružená hustota má tvar

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

Označíme-li dále $r = \Sigma^{-1}\mu = Q\mu$, tak lokální charakteristiky $Z_i | Z_{\partial_i}$ mají normální rozdělení 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 22. Necht $Z = \{Z_i, i \in L\}$ je gaussovské markovské náhodné pole. Potom pro $i \neq j$ jsou Z_i a Z_j podmíněně nezávislé při $Z_{-\{i,j\}}$ právě tehdy, když $i \not\sim j$ (neboli $q_{ij} = 0$).

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

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

zjistíme, že

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

Pokud $q_{ij} = 0$, potom

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

kde první člen je až na normující konstantu $p(z_i | z_{-ij})$ a druhý $p(z_j | z_{-ij})$. Obráceně, pokud $p(z_i, z_j | z_{-ij}) = p(z_i | z_{-ij})p(z_j | z_{-ij})$, nevystupuje na pravé straně vyjádření $p(z_i, z_j | z_{-ij})$ 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 kovarianční 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 $\varepsilon = \{\varepsilon_i, i \in L\}$ 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. Definujme náhodné pole $Z = \{Z_i, i \in L\}$ předpisem

$$(I - B)(Z - \mu) = \varepsilon. \tag{17}$$

Zřejmě $\mathbb{E}Z = \mu$ a kovarianční matice Z je $\mathbb{E}(Z - \mu)(Z - \mu)^T = \sigma^2(I - B)^{-1}(I - B^T)^{-1}$. Protože Z je lineární kombinací ε , je rozdělení 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

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

Pro odhad parametrů μ , B a σ^2 se tak nabízí použití metody maximální věrohodnosti. Všimněme si, že $\text{cov}(\varepsilon, Z) = \sigma^2(I - B^T)^{-1}$, 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

Uvažujme nejprve binární náhodná pole. Množina stavů $S = \{0, 1\}$ je dvouprvková. Stavů 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.

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} , $i, j \in L$.

Definice 48. Nechť $Z = (Z_i, i \in L)$ je náhodné pole s množinou stavů $S = \{0, 1\}$. Definujeme *Moranův poměr* (*Moran's contiguity ratio*) jako

$$I = \frac{Z^T W Z}{Z^T Z} = \frac{\sum_{i \in L} \sum_{j \in L} w_{ij} Z_i Z_j}{\sum_{i \in L} Z_i^2}.$$

Dále definujeme tzv. *Black-Black join count statistic*

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

a *Black-White join count statistic*

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

Pozn.: 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.

Veličiny z předchozí definice se používají při testování hypotézy o existenci prostorových autokorelací v datech. Předpokládejme, že z n bodů mříže je jich m černých (náhodné pole nabývá hodnoty 1) a $n - m$ bílých. Za nulové hypotézy si můžeme představit, že černé a bílé hodnoty jsou bodům mříže přiřazeny zcela náhodně. 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 nekorelovanosti. Přitom střední hodnoty a rozptyly jsou odvozeny z konkrétního výběrového schématu. Nejpřirozenější jsou binomický a hypergeometrický výběrový model. Při binomickém předpokládáme, že $\mathbb{P}(Z_i = 1) = \pi = m/n$, potom počet černých vrcholů má (za nulové hypotézy) 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]).

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 49. 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

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

Označme M jednu z těchto testových statistik a M_{obs} testovou statistiku spočtenou z dat. Pro testování přítomnosti prostorové autokorelace se obvykle používá některý z následujících čtyřech přístupů.

1. *permutační test (permutation test):* Za nulové hypotézy si můžeme představit, 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).
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. Za nulové hypotézy je $\text{cov}(Z_i, Z_j) = 0$ pro $i \neq j$ je možné vyjádřit střední hodnotu a rozptyl M . Označme je $\mathbb{E}_g M$ a $\text{var}_g M$. Testová statistika

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

je potom porovnávána s kvantily normovaného normálního rozdělení.

4. *Asymptotický test založený na znáhodnění (asymptotic test under randomization)*: Označme $\mathbb{E}_r M$ a $\text{var}_r M$ střední hodnotu a rozptyl statistiky M získané z přístupu založeného na znáhodnění (jako v permutačním nebo Monte Carlo testu). Pro velká n má za nulové hypotézy testová statistika

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

přibližně normované normální rozdělení.

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. Hodnoty v blízkých místech mohou být podobné ne kvůli prostorové autokorelaci, ale proto, že se jedná o nezávislé realizace z rozdělení s podobnou střední hodnotou. Hodnoty v bodech, které jsou v prostoru vzdálené, se mohou jevit odlišné, protože se mění střední hodnota náhodného pole.

Odhad parametrů

Uvažujme markovské náhodné pole $\{Z_i : i \in L\}$ s hustotou $p_\theta(z)$ parametrizovanou konečně rozměrným vektorem θ . Pro diskrétní data je hustota $p_\theta(z)$ rovna sdružené pravděpodobnosti $\mathbb{P}(Z_i = z_i, i \in L)$, $z = (z_i, i \in L)$. 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 $z = (z_i, i \in L)$ hledáme hodnotu $\hat{\theta}$, která maximalizuje věrohodnostní funkci $L(\theta) = p_\theta(z)$.

Pro markovské náhodné pole s Gibbsovým rozdělením je

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

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)*

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

Tentokrát lze normující konstantu $c(z_{\partial i}, \theta)$ 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 $p_\theta(z_k | z_{-k})$, 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 $\varrho(Z, \theta)$. V klasické situaci maximální věrohodnosti pro posloupnost nezávislých stejně rozdělených náhodných veličin je

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

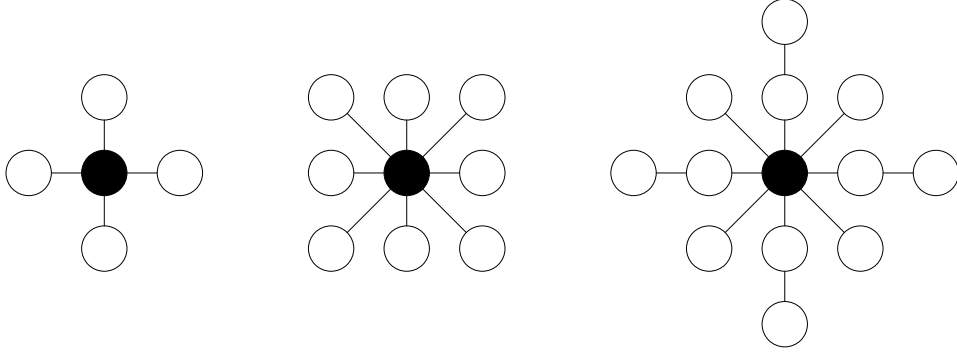
V našem případě je

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

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).



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

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

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

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

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

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

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

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 Z , které je dané hustotou $p(z)$. Z Bayesovy věty pak dostáváme aposteriorní rozdělení

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

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

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

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

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

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

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 $p(z)$.

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

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

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 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 $g(Z)$), můžeme aposteriorní střední hodnotu $\mathbb{E}[g(Z) | Y = y]$ 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

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

kde předpokládáme nezávislá apriorní rozdělení pro $(\beta_1, \beta_2, \delta)$ a σ_ε^2 . Z apriorní hustoty $p(z \mid \beta_1, \beta_2, \delta)$ se do vyjádření aposteriorní hustoty dostane normující konstanta závisající 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 Y žádnou informaci o Z . Apriorní rozdělení můžeme volit například jako markovské náhodné pole s hustotou (Isingův model)

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

Aposterioerní rozdělení tak je

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

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 $\hat{Z}_i = 0$.

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] N. A. C. CRESSIE (1993): *Statistics for Spatial Data*, Wiley, New York.
- [6] D. J. DALEY AND D. VERE-JONES (1988): *An Introduction to the Theory of Point Processes*, Springer-Verlag, New York.
- [7] E. ISING (1925): Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, *Z. Physik* **31**, 253–258.
- [8] 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.

- [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 (2004): 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] O. SCHABENBERGER AND C. A. GOTWAY (2005): *Statistical Methods for Spatial Data Analysis*, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton.
- [15] D. STOYAN, W. S. KENDALL AND J. MECKE (1995): *Stochastic Geometry and Its Applications*, 2nd edition, Wiley, New York.
- [16] D. J. STRAUSS (1975): A model for clustering, *Biometrika* **62**, 467–475.