

Andrzej Muciek

Wyznaczanie modeli matematycznych  
z danych eksperymentalnych

2012



*Moim Synom,  
Pawłowi i Bogdanowi*



## Spis treści

Wstęp .....	9
Rozdział 1. Modele matematyczne .....	13
1.1. Notacja .....	13
1.2. Ogólna charakterystyka modeli matematycznych .....	15
1.3. Klasyfikacja modeli matematycznych .....	17
1.4. Modele statystyczne .....	18
1.5. Modele regresji .....	19
Rozdział 2. Wyniki pomiarów – obserwacje .....	23
2.1. Addytywny model wyników pomiaru .....	23
2.2. Przedziałowa analiza wyników pomiarów .....	27
2.3. Wyznaczanie błędów granicznych w pomiarach pośrednich .....	29
Rozdział 3. Zmienne losowe – model wyników pomiarów .....	35
3.1. Podstawowe definicje i oznaczenia .....	35
3.2. Charakterystyki liczbowe zmiennych losowych .....	38
3.2.1. Podstawowe parametry zmiennych losowych .....	38
3.2.2. Momenty zmiennych losowych .....	40
3.2.3. Statystyki opisowe .....	42
3.3. Wektory losowe .....	44
3.4. Wyznaczanie rozkładu zmiennej losowej .....	47
3.4.1. Test zgodności $\chi^2$ .....	48
3.5. Testowanie normalności rozkładów .....	51
3.6. Transformacja funkcji gęstości w przekształceniach zmiennych losowych ..	55
3.7. Funkcje dwóch zmiennych losowych .....	59
3.7.1. Suma dwóch zmiennych losowych – splot rozkładów .....	59
3.7.2. Iloczyn i iloraz dwóch zmiennych losowych .....	64
3.8. Przekształcenia zmiennych losowych o rozkładzie normalnym .....	65
3.8.1. Transformacje liniowe wektorów losowych o rozkładzie normalnym .....	65
3.8.2. Ocena wariancji w nieliniowych przekształceniach zmiennych losowych .....	67
Rozdział 4. Podstawy estymacji punktowej .....	69
4.1. Podstawowe pojęcia i definicje .....	69

4.2.	Własności estymatorów . . . . .	70
4.2.1.	Nieobciążoność estymatorów . . . . .	70
4.2.2.	Zgodność estymatorów . . . . .	72
4.2.3.	Efektywność estymatorów . . . . .	73
4.3.	Metody wyznaczania estymatorów . . . . .	77
4.3.1.	Metoda momentów . . . . .	77
4.3.2.	Metoda największej wiarygodności . . . . .	78
4.3.3.	Metoda najmniejszych kwadratów . . . . .	81
Rozdział 5.	Wstępna analiza bezpośrednich obserwacji . . . . .	83
5.1.	Odstające obserwacje . . . . .	83
5.2.	Badanie trendu systematycznego . . . . .	86
Rozdział 6.	Modele regresji . . . . .	91
6.1.	Linie regresji I rodzaju . . . . .	91
6.2.	Proste regresji II rodzaju . . . . .	93
6.3.	Opisowy model regresji . . . . .	94
Rozdział 7.	Regresja liniowa . . . . .	99
7.1.	Model regresji liniowej . . . . .	99
7.2.	Estymacja parametrów liniowego modelu regresji metodą NW . . . . .	101
7.3.	Estymacja parametrów liniowego modelu regresji metodą NK . . . . .	102
7.3.1.	Rozwiązanie algebraiczne . . . . .	102
7.3.2.	Rozwiązanie geometryczne . . . . .	103
7.3.3.	Wyrównane oceny odpowiedzi i reszty . . . . .	105
7.4.	Estymacja parametrów linii prostej . . . . .	108
7.5.	Przykłady zastosowań regresji liniowej . . . . .	109
7.6.	Wyznaczenie modelu matematycznego baterii elektrycznej . . . . .	113
7.7.	Własności estymatora parametrów i wyrównanych ocen . . . . .	116
7.8.	Estymacja wariancji $\sigma^2$ pojedynczej obserwacji . . . . .	119
7.9.	Funkcje gęstości estymatorów . . . . .	120
7.10.	Planowanie optymalnego eksperymentu . . . . .	120
7.11.	Estymacja parametrów dla ortogonalnej struktury macierzy eksperymentu . . . . .	124
7.12.	Optymalny plan w regresji liniowej prostej . . . . .	128
7.13.	Regresja grzbietowa . . . . .	131
7.14.	Algorytmy obliczeniowe analizy regresji . . . . .	133
7.14.1.	Obliczenia oparte na operatorze wymiatania . . . . .	134
7.14.2.	Obliczenia oparte na dekompozycji SVD . . . . .	134
Rozdział 8.	Uogólniona metoda najmniejszych kwadratów . . . . .	137
8.1.	Estymacja parametrów modelu liniowego dla skorelowanych obserwacji . . . . .	137
8.2.	Pomiary skorelowane jednakowej dokładności . . . . .	141
8.3.	Ważona metoda najmniejszych kwadratów . . . . .	144
8.4.	Szacowanie wag z niepewności pomiarów . . . . .	147

Rozdział 9. Regresja nieliniowa . . . . .	151
9.1. Model regresji nieliniowej . . . . .	151
9.2. Funkcje transformowalne do modelu liniowego . . . . .	152
9.3. Estymacja parametrów modelu nieliniowego . . . . .	154
9.3.1. Sformułowanie problemu . . . . .	154
9.3.2. Metody iteracyjne wyznaczania minimum . . . . .	155
9.3.3. Metoda Gaussa–Newtona . . . . .	157
9.3.4. Metoda Newtona . . . . .	161
9.3.5. Uwagi o wyborze metod minimalizacji funkcji w metodzie NK . . . . .	165
Rozdział 10. Ocena parametrów modeli w obecności liniowych ograniczeń . . . . .	169
10.1. Model liniowy z ograniczeniami . . . . .	169
10.2. Wyznaczenie estymatorów metodą redukcji zmiennych . . . . .	170
10.3. Wyznaczenie estymatorów metodą mnożników Lagrange’a . . . . .	176
10.4. Własności estymatorów z ograniczeniami . . . . .	179
Rozdział 11. Testowanie hipotezy o wartościach parametrów modelu . . . . .	183
11.1. Test Fishera . . . . .	183
11.1.1. Podstawy matematyczne testu . . . . .	183
11.1.2. Własności testu $F$ . . . . .	186
11.2. Testowanie hipotezy o zadanej wartości parametru . . . . .	192
11.2.1. Testowanie hipotezy – nachylenie prostej o zadanej wartości . . . . .	194
11.3. Wieloparametrowy współczynnik regresji . . . . .	196
Rozdział 12. Regresja wielomianowa . . . . .	199
12.1. Wielomiany jednej zmiennej . . . . .	200
12.1.1. Problem obliczeniowy . . . . .	200
12.1.2. Wybór stopnia wielomianu . . . . .	201
12.2. Wielomiany ortogonalne . . . . .	202
12.2.1. Podstawowe własności wielomianów ortogonalnych . . . . .	202
12.2.2. Wyznaczanie ortogonalnych wielomianów . . . . .	205
12.3. Funkcje sklepane z odcinków, splajny . . . . .	205
12.3.1. Problemy z dopasowaniem wielomianu do danych . . . . .	205
12.3.2. Splajny . . . . .	207
12.4. Wielomiany wielu zmiennych . . . . .	210
12.4.1. Podstawowe definicje . . . . .	210
12.4.2. Powierzchnie kwadratowe dwóch zmiennych . . . . .	212
12.5. Analiza odpowiedzi badanego obiektu – wyznaczanie punktów ekstremalnych . . . . .	214
12.5.1. Aproksymacja odpowiedzi modelem liniowym (afinicznym) . . . . .	215
12.5.2. Aproksymacja odpowiedzi modelem kwadratowym wielu zmiennych . . . . .	217
Rozdział 13. Wybrane klasy modeli matematycznych . . . . .	219
13.1. Modele wzrostu . . . . .	219
13.2. Analiza szeregów czasowych – modele autoregresji . . . . .	221

13.3. Modele kompartmentowe . . . . .	223
13.4. Funkcje wymiarowe . . . . .	224
Rozdział 14. Badanie założeń wyjściowych i analiza różnic . . . . .	229
14.1. Własności macierzy kapeluszowej . . . . .	229
14.2. Ocena wpływu pojedynczej obserwacji . . . . .	233
14.3. Analiza różnic . . . . .	236
14.3.1. Własności różnic . . . . .	236
14.3.2. Skalowane, standaryzowane i studentyzowane różnice . . . . .	237
14.3.3. Wykresy różnic . . . . .	240
Rozdział 15. Estymatory odporne w analizie regresji . . . . .	245
15.1. Odporność estymatorów na odstające obserwacje . . . . .	246
15.2. M-estymatory . . . . .	247
15.3. Iteracyjna metoda NK z doregulowaniem wag . . . . .	250
15.4. Estymatory medianowe . . . . .	251
Dodatek A. Wybrane wiadomości z podstaw matematyki . . . . .	255
A.1. Algebra macierzy . . . . .	255
A.1.1. Wektory własne i wartości własne . . . . .	255
A.1.2. Ślad i rząd macierzy . . . . .	256
A.1.3. Macierze ortogonalne . . . . .	257
A.1.4. Macierze idempotentne . . . . .	257
A.1.5. Macierze blokowe . . . . .	257
A.1.6. Faktoryzacja macierzy . . . . .	258
A.1.7. Operator wymiatania . . . . .	258
A.1.8. Dekompozycja Cholesky'ego . . . . .	259
A.1.9. Rozkład względem wartości osobliwych . . . . .	260
A.2. Optymalizacja . . . . .	262
A.2.1. Reguły obliczania pochodnych wektorowych . . . . .	262
A.2.2. Wyznaczanie minimum warunkowego metodą mnożników Lagrange'a . . . . .	263
Dodatek B. Wybrane elementy rachunku prawdopodobieństwa . . . . .	265
B.1. Operator wartości oczekiwanej i operator kowariancji . . . . .	265
B.2. Średnie i wariancje form kwadratowych . . . . .	266
B.3. Wielowymiarowy rozkład normalny . . . . .	267
Bibliografia . . . . .	269
Skorowidz . . . . .	275



## Wstęp

Wyznaczanie modeli matematycznych obiektów (zjawisk fizycznych, procesów ekonomicznych, procesów technologicznych, obiektów biologicznych, obiektów technicznych ...) jest ważnym obszarem działalności badawczej. Przez pojęcie model matematyczny rozumie się relacje ilościowe między wielkościami związanymi z badanym obiektem. Mogą wystąpić różne sytuacje praktyczne i w konsekwencji różne modele matematyczne. Modele matematyczne znajdują wiele zastosowań — pozwalają na analizę mechanizmów (praw) rządzących badanym obiektem, dobieranie optymalnych warunków pracy, prognozę, rozwiązanie zadania odwrotnego (ocena pobudzenia obiektu na podstawie odpowiedzi) itd.

Proces wyznaczania modeli matematycznych z danych eksperymentalnych jest zwykle złożonym zadaniem zależnym od wiedzy a priori o obiekcie i własności wyników pomiarów (obserwacji). W najprostszej sytuacji model jest znany przed doświadczeniem z dokładnością do parametrów i wtedy wyznaczanie modelu polega na estymowaniu wartości tych parametrów, określeniu ich dokładności i obszaru stosowania modelu. Na drugim biegunie znajduje się sytuacja, w której nie ma żadnych przesłanek umożliwiających określenie klasy użytecznych funkcji i należy ją wyznaczyć na podstawie analizy danych eksperymentalnych. Stawia się wtedy hipotezę, że model jest określony za pomocą pewnej rodziny funkcji numerowanych parametrami, następnie estymuje się te parametry i testuje hipotezę o poprawności przyjętego modelu. W wielu zagadnieniach praktycznych, na przykład w optymalizacji, celem modelu jest wyznaczenie „optymalnego punktu” i wtedy wystarczy wyznaczyć lokalny model obiektu odpowiedni dla najbliższego otoczenia punktu optymalnego. W takiej sytuacji odpowiednią klasą funkcji są zwykle wielomiany.

W monografii przedstawiono metody wyznaczania modeli matematycznych różnych klas obiektów przystosowane do uwzględnienia szerokiej gamy sytuacji praktycznych. Podstawowym narzędziem stosowanym w konstruowaniu modeli matematycznych jest statystyka matematyczna, a zwłaszcza jej dział — analiza

regresji. Ważną rolę odgrywa również sposób reprezentacji wyników pomiarów. Omówiono dwa podejścia: analizę przedziałową i analizę probabilistyczną. Efektywne konstruowanie modeli matematycznych wymaga odpowiedniego połączenia metod reprezentacji wyników pomiarów z metodami estymacji parametrów modeli. Założono, że Czytelnik jest zaznajomiony z podstawami matematyki na poziomie wykładanym w wyższych szkołach technicznych i przyrodniczych. Materiał ten obejmuje analizę matematyczną, algebrę liniową, rachunek prawdopodobieństwa i statystykę matematyczną. Elementy matematyki, które wykraczają poza standardowe kursy przedstawiono w dodatku.

Problematyka prezentowana w monografii ma bogatą literaturę. Zagadnienia są reprezentowane na różnych poziomach ścisłości matematycznej od teoretycznych opracowań, takich jak Rao [89], Seber [98] czy Searle [97], po bardziej praktyczne opracowania Sprenta [104], Drapera i Smitha [21] czy Brandta [12]. Wybór odpowiedniego wariantu metody oraz jej przystosowanie do konkretnej sytuacji praktycznej wymaga dobrej znajomości metod wyznaczania modeli. Dlatego w niniejszej monografii podjęto próbę przedstawienia problematyki w sposób przystępny dla reprezentantów różnych dziedzin nauki, z zachowaniem właściwego poziomu abstrakcji matematycznej, która pozwoli na odpowiednie stosowanie różnych metod wyznaczania modeli matematycznych.

Podstawowym problemem dla badaczy wyznaczających model matematyczny obiektu jest przystosowanie opracowanych metod matematycznych do konkretnej sytuacji praktycznej, zwykle jest ona bardziej złożona niż te, dla których opracowano metody matematyczne. Rozwiązanie konkretnego zadania praktycznego zazwyczaj związane jest z przyjęciem określonych uproszczeń, a to z kolei wymaga dobrej znajomości metod matematycznych oraz własności badanego obiektu, a zwłaszcza odpowiedniego sprecyzowania założeń wyjściowych dotyczących obserwacji (wyników pomiarów). W celu zilustrowania różnych sposobów postępowania zamieszczono wiele przykładów praktycznych.

Podstawowym narzędziem wyznaczania modeli matematycznych jest statystyka matematyczna, a zwłaszcza regresja liniowa. Dlatego w pierwszej części monografii omówiono podstawy statystyczne analizy danych eksperymentalnych, natomiast w drugiej części analizę regresji, począwszy od najprostszego przypadku pomiarów jednakowej dokładności i nieskorelowanych po bardziej złożone sytuacje. W zamieszczonym dodatku podano informacje z algebry macierzy i rachunku prawdopodobieństwa, które wykraczają poza standardowe kursy na wydziałach inżynierskich i przyrodniczych.

---

W rozdziale 1 omówiono klasy modeli matematycznych stosowanych w różnych dziedzinach nauki i przedstawiono ich klasyfikację. W rozdziale 2 przedstawiono różne sposoby modelowania obserwacji, dzieląc je na dwie podstawowe grupy: „przedziałowy model obserwacji” stosowany przede wszystkim w fizyce i zagadnieniach technicznych, gdy analizowane są pojedyncze pomiary oraz „probabilistyczny model obserwacji”, stosowany gdy wykonywane są wielokrotne pomiary. Rozdział 3 zawiera podstawy zmiennych losowych i ich zastosowanie do zapisu obserwacji. W rozdziale 4 omówiono podstawy estymacji punktowej. Rozdział 5 dotyczy dwóch metod: wstępnej analizy bezpośrednich obserwacji, wykrywaniu „odstających obserwacji” i detekcji trendu systematycznego w pomiarach. W rozdziale 6 przedstawiono ogólną koncepcję analizy regresji i podział modeli regresji. Rozdział 7 zawiera regresję liniową, która jest podstawowym narzędziem wyznaczania modeli eksperymentalnych. Poświęcono w nim wiele miejsca różnym aspektom, zwłaszcza planowaniu eksperymentów optymalnych. W rozdziale 8 omawiana jest ogólna metoda najmniejszych kwadratów, natomiast w rozdziale 9 regresja nieliniowa. Opis modeli regresji z liniowymi ograniczeniami zawiera rozdział 10. Omówione tu metody wykorzystano w rozdziale 11 do testowania poprawności wyznaczonego modelu. Rozdział 12 dotyczy regresji wielomianowej. W rozdziale 13 omówiono wybrane modele matematyczne a zwłaszcza te, które można za pomocą prostych przekształceń sprowadzić do modeli liniowych. W rozdziale 14 przedstawiono metody kontroli czy spełnione są założenia wejściowe modelu i własności obserwacji, które są formułowane na wstępie analizy; natomiast w rozdziale 15 omówiono klasy tak zwanych estymatorów odpornych, odpowiednich do sytuacji, gdy gęstości obserwacji znacznie odbiegają od normalnych. Pracę kończy dodatek zawierający niezbędne informacje z algebry liniowej oraz rachunku prawdopodobieństwa.

Wrocław, lipiec 2011



## Rozdział 1

# Modele matematyczne

### 1.1. Notacja

Macierze oznaczone są dużymi literami i pisane pogrubioną kursywą  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{X}$ , wektory małymi literami, pisane pogrubioną kursywą  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{x}$ , natomiast skalary zwykłą kursywą  $a$ ,  $b$ ,  $x$ . Jeśli  $\mathbf{a}$  jest wektorem o elementach  $a_1, \dots, a_n$  to zapisuje się go jako wektor kolumnowy  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_n]^T$ , gdzie  $T$  oznacza transpozycję. Norma („długość”) wektora  $\mathbf{a}$  oznaczana jest symbolem  $\|\mathbf{a}\|$  (w pracy używana jest norma euklidesowa nazywana krótko normą), więc

$$\|\mathbf{a}\| = (\mathbf{a}, \mathbf{a})^{1/2} = (\mathbf{a}^T \mathbf{a})^{1/2} = (a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2)^{1/2},$$

gdzie  $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \mathbf{a}^T \mathbf{a}$  jest iloczynem skalarnym wektora  $\mathbf{a}$  przez siebie.

Jeśli macierz  $\mathbf{A}$  o wymiarze  $n \times m$  ma elementy  $a_{ij}$ , to  $\mathbf{A} = [(a_{ij})]$ . Sumę  $a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$  diagonalnych elementów macierzy kwadratowej  $\mathbf{A}$  o wymiarze  $n \times n$  nazywa się *śladem macierzy* (ang. *trace*) i oznacza symbolem  $\text{tr} \mathbf{A}$ .

*Rząd macierzy*  $\mathbf{A}$  definiowany jest jako maksymalna liczba liniowo niezależnych kolumn lub, co jest równoważne, jako maksymalna liczba liniowo niezależnych wierszy i oznacza symbolem  $\text{rank} \mathbf{A}$ . Symbolem  $\mathbf{A}^T$  oznaczana jest macierz transponowana macierzy  $\mathbf{A}$ , więc  $\mathbf{A}^T = [(a_{ji})]$ . Macierz transponowana  $\mathbf{A}^T$  powstaje z macierzy  $\mathbf{A}$  poprzez zamianę wierszy z kolumnami. Wyznacznik macierzy kwadratowej  $\mathbf{A}$  jest zapisywany symbolem  $|\mathbf{A}|$ . Jeśli  $\mathbf{A}$  jest macierzą nieosobliwą ( $|\mathbf{A}| \neq 0$ ), to istnieje macierz odwrotna, którą oznacza się symbolem  $\mathbf{A}^{-1}$ . Każda macierz  $\mathbf{A}^-$ , która spełnia równanie  $\mathbf{A} \mathbf{A}^- \mathbf{A} = \mathbf{A}$  nazywa się *uogólnioną odwrotnością* lub *pseudoodwrotnością* macierzy  $\mathbf{A}$ . Macierz  $\mathbf{A} = [(a_{ij})]$  o wymiarze  $n \times n$  i elementach leżących na głównej przekątnej  $d_1, \dots, d_n$ ,  $d_i = a_{ii}$  oraz pozostałych elementach równych zeru nazywana jest *macierzą diagonalną* i oznaczana symbolem  $\text{diag}[d_1, \dots, d_n]$ . Macierz diagonalna, której wszystkie elementy

leżące na głównej przekątnej są równe jedności nazywana jest *macierzą jednostkową* i oznaczana symbolem  $\mathbf{I}_n$ . Ponadto macierz kwadratowa o wymiarze  $n \times n$ , której elementami są jedynki oznaczana jest symbolem  $\mathbf{U}_n$ , natomiast macierz składająca się z samych zer symbolem  $\mathbf{0}$ .

Symbol  $\mathbb{R}^n$  reprezentuje  $n$ -wymiarową przestrzeń euklidesową. Co oznacza, że jeśli  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ , to  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ , gdzie  $x_i \in \mathbb{R}$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

Macierz jednokolumnowa, o wymiarze  $n \times 1$ , złożona z jedynek, oznaczana jest symbolem  $\mathbf{J}_n$ . Między macierzami  $\mathbf{U}_n$  oraz  $\mathbf{J}_n$  zachodzi następujący związek:  $\mathbf{U}_n = \mathbf{J}_n \mathbf{J}_n^T$ . Jeśli wymiar macierzy jest jednoznacznie określony, to indeks  $n$  jest pomijany; na przykład, piszemy  $\mathbf{U}$  zamiast  $\mathbf{U}_n$ .

Pewnym problemem są oznaczenia zmiennych losowych i ich realizacji. W rachunku prawdopodobieństwa i statystyce matematycznej zmienne losowe oznaczane są zwykle dużymi literami,  $X, Y$ , a ich realizacje małymi, odpowiednio  $x, y$ . Jednak, taki system oznaczeń stwarza pewne trudności w analizie regresji, szczególnie w zastosowaniu do modeli wielu zmiennych, dlatego wielu autorów zajmujących się analizą regresji (np. Hocking [50]) stosuje te same oznaczenia zarówno do zmiennych losowych, jak i do ich realizacji. Ten system został przyjęty w pracy, więc zarówno zmienne losowe, jak i ich realizacje oznaczane są małymi literami, pisane kursywą,  $x, y, \varepsilon$ , a z treści wynika jednoznacznie aktualne znaczenie symbolu. Wyjątkowo, gdy występują „obok siebie” zarówno zmienna losowa, jak i jej realizacja, a stosowanie jednakowych oznaczeń mogłoby stwarzać wątpliwości, to zmienne losowe oznaczane są pełnym symbolem, np.  $x(\omega)$ , a ich realizacja, bez zmian, więc  $x$ . Wektory i macierze losowe oznaczane są tak samo jak wektory i macierze o elementach skalarnych, tj. odpowiednio  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{x}, \mathbf{y}$  oraz  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}$ .

Symbole  $E[x]$  i  $D^2[x] = \sigma^2$ , wartość oczekiwana i wariancja zmiennej losowej  $x$ ;  $\text{cov}[x, y] = \sigma_{xy}$  i  $\text{corr}[x, y] = \rho_{xy}$ , oznaczają odpowiednio kowariancję i współczynnik korelacji zmiennych losowych  $x$  i  $y$ ; natomiast  $E[x|y]$  warunkową wartość oczekiwaną zmiennej losowej  $x$  względem zmiennej losowej  $y$  (zgodnie z podaną uwagą o oznaczeniach zmiennych losowych, w przypadku, gdyby mogły powstać wątpliwości, stosuje się pełne oznaczenie, więc zamiast  $E[x|y]$ , będzie  $E[x(\omega)|y(\omega) = y]$ ).

Niech  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_k]^T$  będzie  $k$ -wymiarowym wektorem losowym. Kowariancje

$$\text{cov}[x_i, x_j], \quad i, j = 1, \dots, k$$

oznacza się również symbolem  $\sigma_{ij}$ , więc  $\text{cov}[x_i, x_j] = \sigma_{ij}$ .

Przyjęto, że  $\sigma_{ii} = \sigma_i^2$ ,  $i = 1, \dots, k$ , co oznacza, że elementy leżące na przekątnej są wariancjami kolejnych zmiennych losowych. Odpowiednikiem wartości oczeki-

wanej zmiennej losowej jest dla wektora losowego  $\mathbf{x}$  wektor wartości oczekiwanych

$$\mathcal{E}[\mathbf{x}] = [E[x_1], \dots, E[x_k]]^T,$$

natomiast odpowiednikiem wariancji jest macierz kowariancji  $\mathcal{D}[\mathbf{x}]$  (nazywana również macierzą wariancyjno-kowariancyjną) zdefiniowana wzorem

$$\mathcal{D}[\mathbf{x}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1k} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \dots & \sigma_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{k1} & \sigma_{k2} & \dots & \sigma_{kk} \end{bmatrix},$$

gdzie  $\sigma_{ij} = \text{cov}[x_i, x_j]$ ,  $i, j = 1, \dots, k$ .

Jeśli wektor losowy  $\mathbf{x}$  ma jedną składową  $x$ ,  $\mathbf{x} = [x]$ , to macierz kowariancji  $\mathcal{D}[\mathbf{x}]$  składa się z jednego elementu, którym jest wariancja zmiennej losowej  $x$ , a więc  $\mathcal{D}[\mathbf{x}] = D^2[x]$ .

Zmienną losową  $x$  o rozkładzie normalnym i parametrach: wartość oczekiwaną  $E[x] = \theta$  i wariancję  $D^2[x] = \sigma^2$  oznacza się symbolem  $x \sim N(\theta, \sigma^2)$ . Jeśli  $\mathbf{x}$  jest  $k$ -wymiarowym wektorem losowym o łącznym rozkładzie normalnym, wektorze wartości oczekiwanych  $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \dots, \theta_k]^T$  i macierzy kowariancji  $\boldsymbol{\Sigma} = [\sigma_{ij}]$ ,  $i, j = 1, \dots, k$ , to oznacza się go symbolem  $\mathbf{x} \sim N_k(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma})$ . Rozkład Studenta z  $k$  stopniami swobody oznacza się symbolem  $t_k$ , rozkład chi-kwadrat z  $k$  stopniami swobody symbolem  $\chi_k^2$ , natomiast Fishera–Snedecora z  $m$  i  $n$  stopniami swobody symbolem  $F_{m,n}$ .

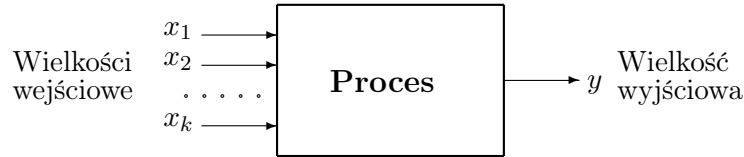
## 1.2. Ogólna charakterystyka modeli matematycznych

Termin „model matematyczny” stosowany jest w różnych dziedzinach nauki i nie ma jednej uniwersalnej definicji. Ogólnie można powiedzieć, że *model matematyczny* jest opisem „objektu”<sup>1</sup> (systemu) za pomocą języka matematyki. W naukach ścisłych przyjmuje się często następującą definicję zaproponowaną przez Eykhoffa [26]:

*Modelem matematycznym* nazywany jest opis istotnych aspektów istniejącego systemu (objektu), który reprezentuje użyteczną wiedzę o tym systemie.

Definicja ta jest ogólna i dla naszych celów przyjmujemy następującą definicję:

<sup>1</sup> Słowo *obiekt* używane jest tu w szerszym znaczeniu niż to wynika z jego znaczenia semantycznego; oznacza również zjawisko fizyczne, biologiczne, ekonomiczne itd.



Rys. 1.1. Schemat modelu matematycznego procesu z  $k$ -wielkościami wejściowymi  $x_1, \dots, x_k$  i jedną wielkością wyjściową  $y$

*Modelem matematycznym* obiektu lub krótko *modelem* obiektu nazywa się dowolne relacje matematyczne, jeśli takie istnieją między elementami zbioru zmiennych związanych z badanym obiektem.

Relacje takie reprezentowane są zwykle za pomocą: funkcji wyrażających zależności między zmiennymi, operatorów algebraicznych działających na tych zmiennych, operatorów różniczkowych, itd. a przedmiotem analizy jest wyznaczanie *identyfikacji* tych relacji. Często jedna ze zmiennych (lub więcej) jest szczególnym przedmiotem zainteresowania i poszukuje się zależności tej zmiennej od pozostałych zmiennych. Tę wyróżnioną zmienną nazywa się *odpowiedzią obiektu* lub *wielkością wyjściową*, natomiast pozostałe zmienne *wielkościami pobudzającymi* lub *wielkościami wejściowymi*. Obiekt z  $k$ -wejściami i jednym wyjściem przedstawiono schematycznie na rysunku 1.1.

Jeśli analiza związków między zmiennymi, np. oparta na danych pomiarowych, wskazuje na istnienie relacji między wielkością wyjściową  $y$  a wielkościami wejściowymi  $x_1, \dots, x_k$ , to możemy się spodziewać istnienia pewnej zależności matematycznej wyrażonej funkcją  $f$ , co zapisujemy

$$y \approx f(x_1, \dots, x_k). \quad (1.1)$$

Na rysunku 1.1 pokazano graficzną reprezentację relacji (1.1). Użyto tu znaku przybliżonej równości, gdyż zależność taka zwykle nie jest dokładna.

**Przykład 1.1.** Okres  $T$  wahadła matematycznego wyznaczany jest za pomocą funkcji

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{L}{G}}, \quad (1.2)$$

gdzie:  $L$  – długość wahadła,  $G$  – przyspieszenie ziemskie.

Dokładniejsza analiza praw rządzących wahadłem matematycznym wykazuje, że okres  $T$  zależy również od maksymalnego kąta odchylenia  $\alpha_m$  wahadła od pionu i jest równy [27]



$$T = 4\sqrt{\frac{L}{G}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}} = 4\sqrt{\frac{L}{G}} K(\kappa), \quad (1.3)$$

gdzie  $\kappa = \sin \frac{1}{2} \alpha_m$ .

Jeśli maksymalny kąt  $\alpha_m \rightarrow 0$ , to współczynnik  $\kappa \rightarrow 0$  i całka eliptyczna  $K(\kappa)$  dąży do wartości  $\pi/2$ ,  $K(\kappa) \rightarrow \pi/2$ . Otrzymuje się wtedy wzór (1.2). Wynika stąd, że wyrażenie (1.2) jest przybliżonym modelem wahadła matematycznego odpowiednim dla małych kątów odchylenia od pionu. Ponadto, w rzeczywistym wahadle na okres wpływa kilka dodatkowych czynników, takich jak na przykład opór powietrza. To powoduje, że zamiast znaku równości użytego we wzorze (1.2), jak jest zwykle przyjęte, bardziej odpowiedni jest znak  $\approx$  przybliżonej równości użyty w wyrażeniu (1.1).  $\square$

### 1.3. Klasyfikacja modeli matematycznych

Modele matematyczne można klasyfikować według różnych kryteriów:

**Liniowe i nieliniowe modele.** Model analizowanego obiektu nazywa się *modelem liniowym*, jeśli wszystkie operatory użyte w modelu, takie jak: operacje algebraiczne, zależności funkcyjne, operatory różniczkowe itd. są liniowe na analizowanym zbiorze wartości. Jeżeli przynajmniej jeden operator nie spełnia warunku liniowości, to mówi się o *modelu nieliniowym*.

Zakwalifikowanie modelu do określonej grupy, liniowe czy nieliniowe, zależy od kontekstu. W typowych sytuacjach dotyczy zbioru wielkości wejściowych, natomiast w analizie regresji (omawianej w dalszych rozdziałach) określenie model liniowy oznacza liniowość modelu względem jego parametrów, natomiast odpowiedź układu  $y$  może być nieliniową funkcją zmiennych wejściowych.

**Modele deterministyczne i stochastyczne (probabilistyczne).** Jeśli dla każdego zbioru wartości wielkości wejściowych odpowiedź jest jednoznacznie określona, to jest to *model deterministyczny*. Jeśli natomiast, odpowiedź (określona przez model) ma charakter losowy – jest to *model stochastyczny*. Relacja (1.2) – przykład modelu deterministycznego, natomiast zależność  $y = ax + \varepsilon$  jest przykładem modelu stochastycznego, gdzie  $a$  i  $x$  – wielkości deterministyczne, a  $\varepsilon$  – zmienna losowa. Wybrane klasy modeli stochastycznych będą przedmiotem dalszej analizy.

**Statyczne i dynamiczne modele.** Model matematyczny nazywa się *modelem dynamicznym*, jeśli zależny jest od czasu – czas występuje jako wielkość

wejściowa, w przeciwnym razie model nazywa się *modelem statycznym*. Często modele dynamiczne są reprezentowane przez równania różniczkowe.

**Modele o parametrach skupionych i parametrach rozłożonych.** Jeśli parametry modelu zmieniają się w funkcji pewnych wielkości, to taki model nazywany jest *modelem o parametrach rozłożonych*, a jeśli są stałe, to model nazywany jest *modelem o parametrach skupionych*. Na przykład, jeśli pojemność między dwoma przewodami elektrycznymi i ich rezystancją traktuje się jako wielkości rozłożone wzdłuż przewodów, to jest to model o parametrach rozłożonych, a jeśli skupi się pojemność i rezystancję w jednym punkcie, to ma się do czynienia z modelem o parametrach skupionych. Modele o parametrach rozłożonych są zwykle reprezentowane przez równania różniczkowe.

Jeśli modele wyznaczane są na podstawie wyników obserwacji, to ze względu na błędy pomiarów, zawsze występuje czynnik losowy. W dalszej części monografii ograniczono się do szczególnego rodzaju modeli stochastycznych, a mianowicie modeli statystycznych.

#### 1.4. Modele statystyczne

Pojedynczą zmienną losową  $y$  lub skończony ciąg,  $y_1, \dots, y_n$ , zmiennych losowych, które są przedmiotem badań, nazywa się *wynikiem eksperymentu*, *wynikiem pomiaru* lub *obserwacją*, a wyznaczony w eksperymencie ciąg wartości badanych zmiennych losowych (realizacji) nazywa się *wartościami zaobserwowanymi* lub krótko *obserwacjami*. Tak więc, termin obserwacja stosowany jest zarówno do zmiennej losowej opisującej analizowaną wielkość, jak i do zaobserwowanej w eksperymencie wartości tej zmiennej losowej. Nie prowadzi to do niejednoznaczności, gdyż z tekstu wynika zwykle jednoznacznie aktualne znaczenie tego terminu. Zbiór realizacji  $y_1, \dots, y_n$  zmiennej losowej  $y$  nazywa się *przestrzenią próby* i oznacza symbolem  $\mathcal{Y}$ .

Niech  $\{f_\theta\}$  będzie rodziną rozkładów prawdopodobieństwa określoną na przestrzeni próby  $\mathcal{Y}$  indeksowaną parametrem  $\theta$  przebiegającym zbiór  $\Theta$ . Przestrzeń próby  $\mathcal{Y}$  wraz z rodziną rozkładów  $\{f_\theta\}$  nazywa się *modelem statystycznym*, natomiast odwzorowanie  $\mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}^k$  *statystyką* [121].

**Przykład 1.2.** Wykonano pomiar pewnej wielkości  $\mu \in \mathbb{R}$ . Wynik pomiaru  $y$  jest obciążony błędem addytywnym  $\varepsilon$ , co można zapisać równaniem  $y = \mu + \varepsilon$ ,

a serię  $n$  pomiarów  $y_i = \mu + \varepsilon_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Założono, że  $\varepsilon$  jest zmienną losową o rozkładzie normalnym – rozkład zmiennej losowej  $y$  określony jest więc wzorem

$$f_{\mu,\sigma}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(y - \mu)^2\right\}.$$

Dla rozkładu normalnego obserwacje  $\{y_1, \dots, y_n\}$  mogą przyjmować dowolne wartości rzeczywiste, więc przestrzeń próby  $\mathcal{Y} = \mathbb{R}^n$  i mamy tu do czynienia z następującym modelem statystycznym

$$(\mathbb{R}^n, \{f_{\mu,\sigma}(y_1, \dots, y_n) = (\sqrt{2\pi}\sigma)^{-n} \exp[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - \mu)^2 / 2\sigma^2] : \mu \in \mathbb{R}^1, \sigma > 0\}).$$

Przykładem statystyki może tu być średnia arytmetyczna  $\bar{y}$  obserwacji – odwzorowanie  $\mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$  (estymator mierzonej wielkości parametru  $\mu$ ). Zmienna losowa  $y$  ma rozkład będący elementem rodziny  $\{f_{\mu,\sigma}(y)\}$  – rozkład normalny  $N(\mu, \sigma^2)$ . Na podstawie obserwacji wyznacza się element z rodziny rozkładów, który jest reprezentantem oceny; element ten zwykle wyznacza się przez estymację wartości parametrów  $\mu$  oraz  $\sigma$  indeksujących rodzinę. Wyznaczanie modelu statystycznego polega na tym, żeby na podstawie obserwacji  $y_1, \dots, y_n$  zidentyfikować ten rozkład – tu wyznaczyć oceny parametrów  $\mu$  oraz  $\sigma$ .  $\square$

## 1.5. Modele regresji

Szczególnymi modelami statystycznymi, znajdującymi duże zastosowanie w różnych działach nauki, są modele regresji, które omówiono w dalszych rozdziałach. Przedstawimy jedynie ich krótką charakterystykę i podział.

Podana definicja modelu statystycznego jest oparta na znajomości funkcji gęstości rozkładu obserwowanych zmiennych losowych. Model taki pozwala na pełne określenie związków probabilistycznych między analizowanymi wielkościami. Jednak, w przypadku zmiennych losowych, ważna jest również znajomość ich parametrów, a przede wszystkim średnich zmian (tendencji) losowej wielkości wyjściowej  $y$  w funkcji wielkości wejściowych, zarówno losowych, jak i deterministycznych. Takiej informacji dostarczają modele regresji. Opracowane zostały dwa podstawowe, klasyczne modele regresji: *linie regresji* I rodzaju i proste regresji II rodzaju oraz tak zwany *opisowy model regresji* – nazywany również krótko *modelem regresji*.

*Linia regresji I rodzaju* zmiennej losowej  $y(\omega)$ <sup>2</sup> względem zmiennej losowej  $x(\omega)$  jest funkcją  $m(x)$  zdefiniowaną wzorem  $m(x) = E(y(\omega)|x(\omega) = x) = E(y|x)$ . Określa więc wartości średnie zmiennej losowej  $y(\omega)$ , gdy zmienna losowa  $x(\omega)$  przyjmuje założone wartości  $x$ .

*Prostą regresji II rodzaju* zmiennej losowej  $y(\omega)$  względem zmiennej losowej  $x(\omega)$  nazywamy linię o równaniu  $y = ax + b$ , która minimalizuje odchylenie średniokwadratowe zmiennej losowej  $y(\omega)$  od zmiennej losowej  $ax(\omega) + b$ . Dla dwuwymiarowej zmiennej losowej o rozkładzie normalnym prosta regresji II rodzaju pokrywa się z linią regresji I rodzaju.

Wyznaczenie zarówno linii regresji, jak i prostej funkcji wymaga znajomości łącznej funkcji gęstości wektora losowego  $[x, y]^T$  (por. [65]), co rzadko zdarza się w praktyce. Ponadto, w rzeczywistych sytuacjach, obok zmiennych losowych występują również zmienne deterministyczne. Odpowiednim narzędziem do analizy takich sytuacji jest *opisowy model regresji* nazywany krótko *modelem regresji*.

Ogólna postać opisowego (parametrycznego) modelu regresji, dla  $k$  wielkości wejściowych, oraz  $p$  parametrów określona jest wzorem

$$y = f(x_1, \dots, x_k; a_1, \dots, a_p) + \varepsilon = f(\mathbf{x}; \mathbf{a}) + \varepsilon, \quad (1.4)$$

w którym  $x_j$  są deterministycznymi zmiennymi ( $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_k]^T$ ),  $a_j$  parametrami ( $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$ ), natomiast  $\varepsilon$  jest składową losową nazywaną *czynnikiem losowym* lub *błędem pomiaru*.

Parametry  $a_1, \dots, a_p$  są liczbami stałymi nieznanymi przed eksperymentem.

Przykładem modelu regresji może być zależność ceny jednostkowej,  $y$ , działki budowlanej, w funkcji jej odległości od centrum miasta,  $x_1$ , jej powierzchni,  $x_2$ , oraz odległości od mediów,  $x_3$ . Relacja między takimi wielkościami, model (1.4), nie może być nigdy idealnie dokładna, ponieważ zawsze występują fluktuacje o nieznanych przyczynach i nieodłączne błędy pomiarów. W opisowym modelu regresji przyjmuje się, że wielkość wyjściowa  $y$  ma charakter losowy, natomiast wielkości wejściowe (zmienne objaśniające) mogą mieć zarówno charakter deterministyczny, jak i losowy.

Modele regresji (1.4) w zależności od postaci funkcji  $f$  dzielone są na dwie podstawowe grupy: *liniowe modele regresji*, w którym funkcja  $f$  jest liniową funkcją parametrów  $a_j$ , co oznacza, że

<sup>2</sup> Wyjątkowo użyto tu pełnych symboli  $x(\omega)$  i  $y(\omega)$  na oznaczenie zmiennych losowych zamiast uproszczonych symboli  $x$  i  $y$ , jak to jest w innych miejscach, gdyż oba znaczenia zmienne losowe i ich wartości występują w otaczającym tekście obok siebie – a nawet w jednym wzorze.

$$y = f(\mathbf{x}; \mathbf{a}) + \varepsilon = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_px_p + \varepsilon \quad (1.5)$$

oraz *nieliniowe modele regresji*, w których  $f$  nie jest liniową funkcją parametrów.

Modele liniowe mają wiele zalet: estymacja parametrów modeli liniowych jest relatywnie prosta numerycznie, można do nich bezpośrednio stosować testy statystyczne itd. Liniowe modele stanowią podstawę analizy regresji i będą omawiane dokładniej w dalszych rozdziałach. W wielu wypadkach celowe jest stosowanie nieliniowych modeli regresji i poświęcono im kolejne rozdziały.

W zależności od sposobu wyznaczania funkcji  $f$  reprezentującej model (1.4) modele regresji dzielone są na dwie podstawowe grupy: „modele empiryczne” i „modele mechanistyczne”. *Model empiryczny* jest reprezentowany przez rodzinę funkcji (zwykle parametryczną), która jest wyznaczana na podstawie danych eksperymentalnych. Postuluje się, aby rodzina ta była wystarczająco „elastyczna” i aby występowała w niej funkcja odpowiednio dobrze dopasowana do analizowanych danych.

*Model mechanistyczny* jest reprezentowany przez rodzinę funkcji wyprowadzoną z matematycznego opisu „mechanizmu” generującego dane. W rzeczywistych sytuacjach różnice między tymi modelami się zacierają. Modele mechanistyczne są często wyprowadzane przy tak dużych uproszczeniach, że niewiele odbiegają od modeli empirycznych, a mimo to są niesłusznie uważane za modele w pełni mechanistyczne. W wielu sytuacjach praktycznych model mechanistyczny otrzymuje się z rozwiązania równań różniczkowych. Zilustrowano ten proces na przykładzie.

**Przykład 1.3.** W nieodwracalnej reakcji chemicznej substancja  $A$  transformuje się w substancję  $B$ , a następnie w substancję  $C$ . Oznaczono wielkości tych substancji w czasie  $t$  odpowiednio symbolami  $A(t)$ ,  $B(t)$  oraz  $C(t)$ . Równania różniczkowe rządzące tymi transformacjami są następujące

$$\begin{aligned} \frac{dA(t)}{dt} &= -\alpha_1 A(t), \\ \frac{dB(t)}{dt} &= \alpha_1 A(t) - \alpha_2 B(t), \\ \frac{dC(t)}{dt} &= \alpha_2 B(t), \end{aligned}$$

gdzie  $\alpha_1$  oraz  $\alpha_2$  są nieznanymi stałymi. Zakładając, że  $A(0) = 1$ , rozwiązanie względem  $B(t)$  jest następujące

$$B(t) = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 - \alpha_2} [\exp(-\alpha_2 t) - \exp(-\alpha_1 t)]. \quad (1.6)$$

Model przedstawiony w powyższym przykładzie jest tak zwanym „modelem kompartmentowym” (ang. *compartmental model*).  $\square$

Wybrane klasy modeli matematycznych rozwijanych w różnych dziedzinach nauki przedstawiono w rozdziale 13.

## Rozdział 2

# Wyniki pomiarów – obserwacje

Przedmiotem analizy danych są liczby wyznaczone w eksperymentach, nazywane w naukach technicznych wartościami zmierzonymi, wartościami zaobserwowanymi lub ogólnie *obserwacjami*. Przez to pojęcie rozumie się zarówno wyniki pomiarów wielkości fizycznych, takich jak prędkość rozchodzenia się fali elektromagnetycznej w próżni, jak i zaobserwowane wartości zmiennej losowej, na przykład liczbę oczek otrzymaną w rzucie kostką do gry. W rozdziale tym przedstawiono ogólną koncepcję modelowania obserwacji oraz dwa podstawowe sposoby ich reprezentacji: przedziały liczbowe i zmienne losowe. Pierwszy sposób prowadzi do „przedziałowej analizy” wyników pomiarów, a drugi do analizy probabilistycznej. Rozważania rozpoczęto od ogólnej dyskusji nad sposobami modelowania wyników pomiarów, a następnie przedstawiono krótko przedziałowy model wyniku pomiaru. Model probabilistyczny przedstawiono w kolejnym rozdziale.

### 2.1. Addytywny model wyników pomiaru

Będziemy stosowali addytywny model wyniku pomiaru, w którym liczba otrzymana w eksperymencie nazywana ogólnie *obserwacją* lub w pomiarach fizycznych *wartością zmierzoną* jest sumą dwóch składowych: wartości obiektu nazywanej *wartością mierzoną* i błędem pomiaru, co przedstawiono schematycznie za pomocą równania

$$\text{obserwacja} = \text{wartość mierzona} + \text{błąd pomiaru}. \quad (2.1)$$

W zależności od tego, jaki model reprezentuje wartość mierzona rozróżnia się trzy przypadki:

- a) wartość mierzona jest ustaloną wartością liczbową nazywaną „wartością prawdziwą” lub „rzeczywistą”,
- b) wartość mierzona jest wartością przypadkową, która jest realizacją pewnej zmiennej losowej,
- c) wartość mierzona jest funkcją pewnej wielkości.

W przypadku a) założono, że obiekt mierzony jest opisany ustaloną wartością liczbową nazywaną „wartością prawdziwą” lub „rzeczywistą”, definiowaną za pomocą skal pomiarowych, które omówiono w tym punkcie. Model ten stosowany jest w pojedynczych pomiarach. W drugim przypadku, b), obiekt przyjmuje wartości losowe i opisany jest za pomocą zmiennych losowych, które będą omówione w następnym rozdziale. W trzecim przypadku, c), obiekt opisano za pomocą funkcji zwykle parametrycznej. Celem pomiarów jest wyznaczenie tej funkcji lub/i weryfikacja hipotezy, że założona funkcja (model) opisuje badany obiekt. Problemowi temu poświęcone są dalsze rozdziały.

**Skale pomiarowe.** Przedmiotem zainteresowania w pomiarach wielkości fizycznych jest „wartość” badanej wielkości. Przez to pojęcie rozumie się wyróżnioną cechę badanego „obektu”  $\omega$ , o którym zakłada się, że jest elementem zbioru  $\Omega$  obiektów mających tę cechę. W teorii pomiaru wartość wielkości definiuje się za pomocą *skal pomiarowych* [2].

Przedstawimy teraz zarys koncepcji określania skal pomiarowych. W tym celu na zbiorze  $\Omega$  (scharakteryzowanym przez badaną własność) definiuje się relacje i operacje empiryczne, tworząc empiryczny system algebraiczny, natomiast zbiór liczbowy, na którym zdefiniowane są binarne relacje i operacje nazywa się liczbowym systemem algebraicznym [72]. W skalach pomiarowych najczęściej wykorzystywana jest relacja liniowego porządku  $\prec$  oraz operacja łączenia elementów  $\circ$ .

Dwuargumentowa relacja  $\prec$  określona na zbiorze  $\Omega$  nazywana jest *relacją liniowego porządku* [90], jeśli jest zwrotna, przechodnia, antysymetryczna i spójna. Jeśli  $\omega_1 \prec \omega_2$ , to mówimy, że  $\omega_2$  nie poprzedza  $\omega_1$ . Przykładem relacji liniowego porządku na zbiorze  $\mathbb{R}$  jest słaba nierówność  $\leq$ .

Operacja *łączenia* dwóch elementów,  $\omega_1, \omega_2 \in \Omega$  polega na tworzeniu z nich trzeciego elementu  $\omega_3 \in \Omega$ , co zapisuje się  $\omega_1 \circ \omega_2 = \omega_3$ . Przykładem łączenia dwóch mas jest ich połączenie w jedną masę.

*Skalą pomiarową* nazywa się przekształcenie (homomorfizm)  $m : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$  ( $m$  przekształca zbiór  $\Omega$  w zbiór liczb nieujemnych) empirycznego systemu algebraicznego w liczbowy system algebraiczny, który zachowuje relacje i operacje.

Zachowanie relacji oznacza tu, że jeśli  $\omega_1 \prec \omega_2$ , to  $m(\omega_1) \leq m(\omega_2)$ , a zachowanie operacji  $\circ$  oznacza, że

$$m(\omega_1 \circ \omega_2) = m(\omega_1) + m(\omega_2).$$

W zależności od zastosowanych relacji i operacji w homomorfizmie otrzymuje się różne skale pomiarowe. W przypadku *skali ilorazowej* wykorzystuje się głównie relację porządku  $\prec$  oraz operację łączenia elementów  $\circ$ .



Własności przekształcenia nie ustalają dokładnie skali pomiarowej. Dlatego dla jednoznacznego określenia funkcji  $m$  potrzebne są dodatkowe założenia. W przypadku skali ilorazowej wystarczy zdefiniować wartość odwzorowania dla wybranego elementu, powiedzmy  $\omega_0$ . Element ten nazywany jest *wzorcem podstawowym* wielkości zbioru  $\Omega$ . W przypadku skali przyrostowej należy zdefiniować wartość funkcji  $m$  dla dwóch punktów, natomiast dla skali porządkowej należy podać funkcję monotoniczną – zdefiniować skalę w nieskończonej liczbie punktów.

Na przykład masa definiowana jest za pomocą skali ilorazowej, a wzorcem podstawowym jest wzorec kilograma,  $\omega_0$ , dla którego przyjęto z definicji  $m(\omega_0) = 1$ . W ten sposób wszystkie obiekty o określonej masie mają wartość  $m(\omega)$ , którą nazywa się *wartością rzeczywistą* lub *wartością prawdziwą* elementu  $\omega$  i oznacza początkowymi literami alfabetu  $a, b, \dots$ . Skala pomiarowa definiuje wartość rzeczywistą każdego obiektu  $\omega$ , ale nie jest ona znana (z wyjątkiem wzorca podstawowego). Aby ją wyznaczyć, należy przeprowadzić eksperyment – *zmierzyć*  $m(\omega)$ ; polega on na porównaniu mierzonego elementu  $\omega$  z wzorcem podstawowym  $\omega_0$  poprzez odpowiednie wykorzystanie relacji i operacji definiujących skalę pomiarową. Otrzymaną w pomiarze ocenę  $y$  wartości rzeczywistej  $m(\omega) = a$  nazywa się *wartością zmierzoną*. Ze względu na niedoskonałość narzędzi pomiarowych wartość zmierzona jest na ogół różna od wartości rzeczywistej,  $y \neq a = m(\omega)$ , co oznacza, że pomiar obarczony jest błędem.

Addytywne równanie pomiarowe (2.1) w przypadku wyznaczania wartości prawdziwej  $a$  przyjmuje postać

$$y = a + \varepsilon, \quad (2.2)$$

gdzie  $\varepsilon$  jest *rzeczywistym błędem pomiaru*.

W wielu przypadkach praktycznych pojęcie wartości prawdziwej nie jest jednoznacznie określone. Na przykład w pomiarze średnicy wałka zakłada się zwykle, że ma on przekrój kołowy, o takiej samej średnicy na całej długości. Tymczasem przekrój rzeczywistego wałka może znacznie odbiegać od koła i być różny w każdym przekroju poprzecznym. Co jest zatem średnicą rzeczywistego wałka – „średnia” wszystkich średnic, „maksymalna średnica”, ...? Należy postawić pytanie, czy przekrój poprzeczny wałka można, odpowiednio dokładnie, aproksymować za pomocą regularnego konturu na przykład elipsy?

Ogólnie wartość mierzona może być funkcją parametryczną zależną od pewnej liczby wielkości wejściowych. W przypadku modelowania przekroju poprzecznego wałka za pomocą elipsy wielkością wejściową jest kąt pomiaru bieżącej średni-

cy względem punktu odniesienia, natomiast parametrami maksymalna średnica i minimalna średnica. Równanie (2.2) w tym przypadku przyjmuje ogólną postać

$$y = f(x_1, \dots, x_k; a_1, \dots, a_p) + \varepsilon, \quad (2.3)$$

gdzie  $x_1, \dots, x_k$  są wielkościami wejściowymi, a  $a_1, \dots, a_p$  parametrami.

Wzór (2.3) przedstawia „opisowe równanie regresji”, które będzie przedmiotem analizy w dalszych rozdziałach.

W omówionych modelach wielkości mierzone miały charakter deterministyczny, tymczasem spotyka się obiekty, w których wielkości mierzone mają charakter losowy. Taka sytuacja występuje, gdy mierzymy średnicę drutu, która zmienia się wzdłuż osi, a więc wynik zależy od miejsca pomiaru. Podobna sytuacja występuje, gdy wykonuje się pomiar średnicy wałka, którego przekrój nie jest kołem, a miejsce pomiaru jest przypadkowo dobrane. Innym przykładem może być określenie masy ziarna pszenicy pewnego plonu. Wartości mas poszczególnych ziaren różnią się między sobą, a celem eksperymentu, w tym drugim przypadku, może być wyznaczenie rozkładu prawdopodobieństwa mas ziaren pszenicy. Często upraszcza się zadanie, wyznaczając najważniejsze parametry rozkładu; przede wszystkim „wartość średnią”, wokół której grupują się masy poszczególnych ziaren oraz miarę rozrzutu mas względem wartości średniej – odchylenie standardowe. W takich przypadkach wartość zaobserwowana,  $y$ , obciążona jest dwoma czynnikami losowymi, rozrzutem wartości mierzonej oraz rozrzutem błędu pomiaru  $\varepsilon$  spowodowanym niedoskonałością narzędzi pomiarowych, a równanie pomiarowe (2.2) przyjmuje teraz postać

$$y = x_a + \varepsilon, \quad (2.4)$$

gdzie  $x_a$  jest zmienną losową charakteryzującą mierzony obiekt, natomiast  $\varepsilon$  jest losowym błędem obserwacji.

Przyjmując wariancję za miarę rozrzutu losowego, można wyróżnić trzy przypadki, w zależności od relacji między miarami rozrzutu wielkości mierzonej i błędu pomiaru:

$$\text{a) } D^2[x_a] \ll D^2[\varepsilon], \quad \text{b) } D^2[x_a] \gg D^2[\varepsilon], \quad \text{c) } D^2[x_a] \approx D^2[\varepsilon].$$

W przypadku a) miara „rozrzutu” (np. odchylenie standardowe) wielkości mierzonej  $x_a$  jest pomijalnie mała w porównaniu z rozrzutem błędu  $\varepsilon$  narzędzia pomiarowego i można ją zaniedbać, przyjmując, że wielkość  $x_a$  ma ustaloną wartość – rozpatrywane tu zagadnienie odpowiada przypadkowi, gdzie wykonuje się pomiar wartości prawdziwej.

W przypadku b) rozrzut błędu  $\varepsilon$  narzędzia pomiarowego można zaniedbać w porównaniu z rozrzutem wielkości mierzonej, przyjmując, że  $\varepsilon = \text{const}$ . Ozna-

cza to, że otrzymujemy w eksperymencie dokładne aktualne wartości wielkości mierzonej zakłócone co najwyżej przez stałe obciążenie systematyczne  $E[\varepsilon]$ .

Obserwacje (wyniki pomiarów) analizuje się w obu przypadkach, a) oraz b), takimi samymi metodami. Jednak interpretacja jest inna. W przypadku a) miary rozrzutu obserwowanych wartości dotyczą narzędzia pomiarowego, natomiast w przypadku b) wielkości mierzonej. Dla ustalenia uwagi w dalszej części skupiono się na rozpatrzeniu przypadków a) oraz b). Przypadek c) wymaga określenia relacji między wariancjami wielkości mierzonej  $x_a$  oraz błędu narzędzia pomiarowego  $\varepsilon$ .

Jak wynika z podanych rozważań, podstawowym narzędziem analizy obserwacji są zmienne losowe. Wyznaczenie ich opisu, jakim jest dystrybucja lub gęstość, wymaga jednak wielokrotnego powtarzania pomiarów, tymczasem w praktyce często ograniczono się do pojedynczych eksperymentów. W takiej sytuacji brak jest odpowiedniej informacji umożliwiającej modelowanie obserwacji za pomocą zmiennych losowych i stosujemy w tym przypadku analizę przedziałową.

## 2.2. Przedziałowa analiza wyników pomiarów

Założmy, że wartość prawdziwa  $a$  jest określona za pomocą skali pomiarowej, ale nie jest znana. W celu jej wyznaczenia przeprowadza się eksperyment, w wyniku którego otrzymuje się *wartość zmierzona*  $\underline{x}$ <sup>1</sup>, która jest oceną wartości prawdziwej  $a$ . W pomiarach bezpośrednich wartość zmierzona  $\underline{x}$  jest liczbą „wskazywaną” przez narzędzie pomiarowe (w metrologii stosowane są również inne określenia: wartość wskazywana lub wynik pomiaru, natomiast w statystyce matematycznej wartość zaobserwowana lub krótko obserwacja).

Jak już wspomniano, pomiary związane są z nieodłącznymi błędami, stąd zwykle wartość zmierzona różni się od wartości prawdziwej,  $\underline{x} \neq a$ . Wynik pomiaru powinien, oprócz wartości zmierzonej, zawierać oszacowanie różnicy między wartością prawdziwą  $a$  a wartością zmierzona  $\underline{x}$ . Taką ocenę w analizie przedziałowej, określa się przez podanie górnego ograniczenia modułu błędu rzeczywistego (definicja 2.1)

**Definicja 2.1.** Jeśli  $\underline{x}$  jest wartością zmierzona wartości prawdziwej  $a$ , to każdą liczbę  $\Delta x$  spełniającą warunek

$$|\underline{x} - a| \leq \Delta x \tag{2.5}$$

nazywa się *błędem granicznym (bezwzględnym)* wartości  $\underline{x}$ .

<sup>1</sup> W rozdziale tym wyjątkowo oznaczono wartość zmierzona symbolem  $\underline{x}$ , dla odróżnienia od bieżącego argumentu mierzonej wielkości oznaczonego symbolem  $x$ .

Błąd graniczny jest, zgodnie z definicją podaną w [42], przykładem niepewności pomiaru.

Z definicji błędu granicznego wynika bezpośrednio, że jeśli pewna dodatnia liczba  $\Delta x$  jest błędem granicznym wartości zmierzonej  $\underline{x}$ , to każda liczba większa od  $\Delta x$  jest również błędem granicznym tej wartości zmierzonej. Oznacza to, że *błędy graniczne można zaokrągląć w górę*. Należy jednak pamiętać, że każde zaokrąglanie prowadzi do zmniejszenia informacji o wartości prawdziwej  $a$ , jaką ma wartość zmierzona  $\underline{x}$ . Zaokrąglanie błędów granicznych należy przeprowadzać w „minimalnym” stopniu.

Z nierówności (2.5) wynika, że wartość rzeczywista należy do przedziału liczbowego, którego środek jest równy wartości zaobserwowanej  $\underline{x}$ , a szerokość jest dwukrotnie większa od błędu granicznego

$$a \in \langle \underline{x} - \Delta x; \underline{x} + \Delta x \rangle. \quad (2.6)$$

Obie liczby, wartość zmierzona oraz błąd graniczny, niosą informację o wartości prawdziwej.

**Definicja 2.2.** Przedział liczbowy  $\langle \underline{x} - \Delta x; \underline{x} + \Delta x \rangle$  zawierający wartość prawdziwą  $a$  (spełniający warunek (2.6)), nazywamy *wynikiem pomiaru* wartości prawdziwej  $a$  i oznaczamy symbolem  $\underline{x} \pm \Delta x$ .

Z definicji tej bezpośrednio wynika, że wynik pomiaru  $\underline{x} \pm \Delta x$  jest przedziałem liczbowym  $\langle \underline{x} - \Delta x; \underline{x} + \Delta x \rangle$  określonym przez parę liczb  $(\underline{x}, \Delta x)$ , w której pierwszy element jest wartością zmierzoną, a drugi błędem granicznym pomiaru wartości prawdziwej  $a$ .

Odróżnia się tu pojęcie wyniku pomiaru (przedziału liczbowego) od pojęcia wartości zmierzonej (liczby). W wielu opracowaniach, jak również w mowie potocznej, oba te pojęcia są utożsamiane — wartość zmierzona nazywana jest wynikiem pomiaru, co jest nieściśle i może prowadzić do sprzeczności.

Tak więc pomiar w analizie przedziałowej polega na wyznaczeniu dwóch liczb  $\underline{x}$  oraz  $\Delta x$ . Pierwszą z nich, wartość zaobserwowaną  $\underline{x}$ , odczytuje się zwykle bezpośrednio z narzędzia pomiarowego (ewentualnie koryguje się odczyt, uwzględniając zmianę warunków pomiaru w stosunku do nominalnych warunków pracy narzędzia pomiarowego), natomiast drugą, błąd graniczny, wyznacza się na podstawie informacji podanej przez producenta narzędzia pomiarowego. W przypadku typowych narzędzi pomiarowych sposób określenia błędu granicznego jest znormalizowany lub określony zwyczajowo. Wielozakresowe woltomierze i amperomierze analogowe wartość błędu granicznego mają podaną przez tzw. klasę  $kl$ , którą definiuje się następująco:

**Definicja 2.3.** Klasą  $kl$  analogowego narzędzia pomiarowego o zakresie  $x_z$  nazywamy najmniejszą nieujemną liczbę  $kl$  z założonego szeregu spełniającą nierówność

$$\frac{\Delta x_{\max}}{x_z} 100\% \leqslant kl, \quad (2.7)$$

gdzie  $\Delta x_{\max} = \max_{x \in \langle 0; x_z \rangle} |x - a|$  jest maksymalnym błędem bezwzględnym w zakresie  $x_z$  ( $a$  jest prawdziwą wartością mierzonej wielkości)<sup>2</sup>.

Zwykle przyjmuje się następujący szereg: ... 0,1; 0,2; 0,5; 1; 1,5; 2; 2,5; 5.

Z nierówności (2.7) wynika, że jeśli znana jest klasa  $kl$ , to względny błąd graniczny  $\delta x$  spełnia nierówność

$$\delta x \leqslant kl \frac{x_z}{\underline{x}}, \quad (2.8)$$

gdzie  $x_z$  jest zakresem narzędzia pomiarowego, na którym wykonano pomiar. W przyrządach analogowych wartość klasy jest podawana w procentach (bez używania znaku %), wtedy błąd  $\delta x$  jest również w procentach. Nierówność (2.8) jest zwykle wykorzystywana do wyznaczenia względnego granicznego błędu pomiaru.

### 2.3. Wyznaczanie błędów granicznych w pomiarach pośrednich

Jeśli pewna wielkość fizyczna  $y$  jest związana z innymi wielkościami  $x_1, \dots, x_n$  za pomocą znanej ciągłej funkcji

$$y = f(x_1, \dots, x_n),$$

to wykonując pomiary wielkości  $x_1, \dots, x_n$  można wyznaczyć  $y$ , korzystając ze znajomości funkcji  $f$ , którą nazywamy *funkcją przekształcającą*. Ten sposób wyznaczania wielkości fizycznych nazywany jest  *pomiarem pośrednim* wielkości  $y$ . Na przykład, moc  $p$  wydzielającą się w rezystorze, przez który płynie prąd stały  $i$ , można wyznaczyć, ze wzoru  $p = ir^2$ , mierząc rezystancję  $r$  i prąd  $i$ .

Przejdziemy teraz do zdefiniowania wyniku pomiaru pośredniego w języku przedziałowej analizy wyników pomiarów.

**Definicja 2.4.** Niech  $\underline{x}_1 \pm \Delta x_1, \dots, \underline{x}_n \pm \Delta x_n$  będą wynikami pomiarów wartości prawdziwych, odpowiednio  $a_1, \dots, a_n$ . Wynikiem pomiaru  $\underline{y} \pm \Delta y$  wartości prawdziwej  $b = f(a_1, \dots, a_n)$  nazywa się najmniejszy przedział liczbowy

<sup>2</sup> Są pewne przyrządy, w których  $x_z$  nie jest zakresem, lecz innym punktem na skali.

$\langle \underline{y} - \Delta y; \underline{y} + \Delta y \rangle = \underline{y} \pm \Delta y$  zawierający wartość prawdziwą  $b$ , jeśli  $a_i \in \underline{x}_i \pm \Delta x_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

Zgodnie z założeniem funkcja przekształcająca  $f$  jest ciągła, więc taki przedział liczbowy  $\langle \underline{y} - \Delta y; \underline{y} + \Delta y \rangle$  istnieje. Z definicji wynika, że wartość prawdziwa  $b$  wielkości  $y$  jest nie większa niż

$$M = \max_{a_i \in \underline{x}_i \pm \Delta x_i, i=1, \dots, n} f(a_1, \dots, a_n) \quad (2.9)$$

i nie mniejsza niż

$$m = \min_{a_i \in \underline{x}_i \pm \Delta x_i, i=1, \dots, n} f(a_1, \dots, a_n), \quad (2.10)$$

więc  $b \in \langle m; M \rangle$ , przy tym jest to najmniejszy przedział liczbowy o tej własności. Na mocy definicji 2.2 wartość zmierzona  $\underline{y}$ , odpowiadająca wartości prawdziwej  $b$ , jest środkiem tego przedziału

$$\underline{y} = \frac{M + m}{2}, \quad (2.11)$$

natomiast błąd graniczny jego połową

$$\Delta y = \frac{M - m}{2}. \quad (2.12)$$

Wynik pomiaru wartości prawdziwej  $b$  wielkości  $y$  określony jest więc wzorem  $\underline{y} \pm \Delta y$ , gdzie  $\underline{y}$  oblicza się ze wzoru (2.11), natomiast błąd graniczny  $\Delta y$  ze wzoru (2.12).

**Przykład 2.1.** Przewodność elektryczną  $g$  wyznacza się, wykonując pomiar rezystancji  $r$  i korzystając z zależności  $g = 1/r$ . Rozwiążemy to zadanie na ogólnych symbolach, kładąc  $y = g$  oraz  $x = r$ , więc  $y = f(x) = 1/x$  jest tu funkcją przekształcającą. Załóżmy, że wynik pomiaru wartości prawdziwej  $a$  wielkości  $x$  wynosi  $\underline{x} \pm \Delta x$ , przy czym wielkość  $x$  jest dodatnia (co wynika z własności rezystancji  $r$ ). Wyznamy z definicji wynik pomiaru  $\underline{y} \pm \Delta y$  wartości prawdziwej  $b = f(a) = 1/a$ . Przy tych założeniach maksimum  $M$  oraz minimum  $m$  są odpowiednio równe

$$M = \frac{1}{\underline{x} - \Delta x}, \quad m = \frac{1}{\underline{x} + \Delta x}.$$

Po podstawieniu tych zależności do (2.11) otrzymuje się wartość zmierzoną

$$\underline{y} = \frac{\underline{x}}{\underline{x}^2 - \Delta x^2} = \frac{1}{\underline{x}} \frac{1}{1 - \delta x^2}, \quad (2.13)$$

a do (2.12) błąd graniczny

$$\Delta y = \frac{\Delta x}{\underline{x}^2(1 - \delta x^2)}, \quad (2.14)$$

pomiaru przewodności  $g$ , przy czym, co łatwo sprawdzić,  $\delta y = \delta x$ . Ze wzoru (2.13) wynika, że otrzymana z definicji wartość zmierzona  $\underline{y}$  różni się od wartości  $f(\underline{x}) = 1/\underline{x}$  otrzymanej przez podstawienie wartości zmierzonej w miejsce argumentu funkcji przekształcającej  $f$  – jak to się zwykle robi. Więc zależność  $\underline{y} = 1/\underline{x}$  jest tylko przybliżoną oceną wartości zmierzonej  $y$ . Błąd tego przybliżenia dąży do zera, gdy błąd względny pomiaru  $\delta x \rightarrow 0$ . Jednak przy dużych błędach pomiaru, na poziomie kilkadziesiąt procent, przybliżenie  $\underline{y} = 1/\underline{x}$  może być zbyt duże i należy stosować dokładny wzór (2.13).  $\square$

### Wartość zmierzona i błąd pomiaru dla funkcji liniowej<sup>3</sup>

$$y = f(x_1, \dots, x_n) = \mu_0 + \mu_1 x_1 + \dots + \mu_n x_n, \quad \mu_i \in \mathbb{R}, \quad i = 0, 1, \dots, n. \quad (2.15)$$

Jeśli wartości prawdziwe  $a_1, \dots, a_n$  wielkości  $x_1, \dots, x_n$  są dodatnie, to na mocy wzoru (2.9) otrzymuje się

$$M = \mu_0 + \mu_1(\underline{x}_1 + \text{sign}(\mu_1)\Delta x_1) + \dots + \mu_n(\underline{x}_n + \text{sign}(\mu_n)\Delta x_n), \quad (2.16)$$

a na mocy (2.9)

$$m = \mu_0 + \mu_1(\underline{x}_1 - \text{sign}(\mu_1)\Delta x_1) + \dots + \mu_n(\underline{x}_n - \text{sign}(\mu_n)\Delta x_n), \quad (2.17)$$

gdzie  $\text{sign}(\mu) = 1$  dla  $\mu > 0$ ,  $\text{sign}(\mu) = -1$  dla  $\mu < 0$  oraz  $\text{sign}(0) = 0$ . Na mocy (2.11) wartość zmierzona  $\underline{y}$  jest równa

$$\underline{y} = \mu_0 + \mu_1 \underline{x}_1 + \dots + \mu_n \underline{x}_n = f(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n). \quad (2.18)$$

Ze wzoru (2.18) wynika ważny wniosek, że dla funkcji liniowej wartość zmierzona  $\underline{y}$  jest obrazem wartości zmierzonych  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n$  funkcji przekształcającej  $f$ .

Po podstawieniu (2.16) i (2.17) do (2.10) otrzymuje się następujący wzór na błąd graniczny funkcji liniowej

$$\Delta y = |\mu_1|\Delta x_1 + |\mu_2|\Delta x_2 + \dots + |\mu_n|\Delta x_n. \quad (2.19)$$

<sup>3</sup> W algebrze liniowej zależność (2.15) nazywana jest funkcją afiniczną.

Wyrażenia (2.18) i (2.19) określające transformacje wyników pomiarów są bardzo proste. Dlatego w praktyce wykorzystuje się je do przybliżonego wyznaczenia wyników pomiarów w pomiarach pośrednich, również dla nieliniowych funkcji przekształcających. Można to uzasadnić tym, że zwykle wyniki pomiarów określają „wąskie” przedziały liczbowe, a funkcje przekształcające,  $f$ , są „regularne” i w obszarze określonym przez błędy pomiaru można je aproksymować funkcją liniową rozwijając w szereg Taylora w punkcie  $(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n)$ , stąd

$$y = f(x_1, \dots, x_n) \approx f(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1 - \underline{x}_1) + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(x_n - \underline{x}_n), \quad (2.20)$$

gdzie pochodne są obliczane dla  $x_i = \underline{x}_i$ .

Współczynniki funkcji (2.15) określone są wzorem

$$\mu_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.21)$$

Na mocy (2.18) otrzymuje się wzór określający wartość zmierzoną  $\underline{y}$  wielkości  $y$

$$\underline{y} \approx f(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n), \quad (2.22)$$

natomiast ze wzorów (2.19) oraz (2.21) błąd graniczny wyznaczenia  $\underline{y}$

$$\Delta y \approx \left| \frac{\partial f}{\partial x_1} \right| \Delta x_1 + \left| \frac{\partial f}{\partial x_2} \right| \Delta x_2 + \dots + \left| \frac{\partial f}{\partial x_n} \right| \Delta x_n. \quad (2.23)$$

Zwyczajowo w wyrażeniach (2.22) i (2.23) stosuje się znak równości.

Wzory (2.22) i (2.23) są podstawą obliczania wyników pomiarów tak zwaną metodą *różniczki zupełnej*. Metoda ta jest znacznie prostsza rachunkowo niż obliczanie wyników pomiarów bezpośrednio z definicji (poprzez obliczanie maksimum  $M$  oraz minimum  $m$ ) i dlatego jest powszechnie stosowana. Jednak, należy pamiętać, że

*metoda różniczki zupełnej jest metodą przybliżoną, odpowiednio dokładną jedynie, gdy funkcja transformująca  $f$  jest w obszarze określonym przez wyniki pomiarów w przybliżeniu liniowa.*

**Przykład 2.2.** Obliczmy wynik pomiaru (wartość zmierzona i błąd graniczny) metodą różniczki zupełnej dla funkcji przekształcającej,  $y = f(x) = 1/x$  z przykładu 2.1. Wartość zmierzona metodą różniczki zupełnej (2.22) wynosi  $\underline{y} = 1/\underline{x}$ , więc jest różna od wartości (2.13) otrzymanej z definicji. Różnica ta zależy od błędu względnego  $\delta x$  i jest tym mniejsza, im mniejszy jest błąd pomiaru.



Błąd bezwzględny (graniczny) obliczony metodą różniczki zupełnej (2.23) wynosi

$$\Delta y = \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| \Delta x = \frac{\Delta x}{x^2}$$

i jest również różny od wartości (2.14) tego błędu otrzymanego z definicji. Różnica ta jest tym mniejsza, im błąd pomiaru  $\delta x$  jest mniejszy.  $\square$

Metoda różniczki zupełnej jest podstawowym narzędziem analizy pojedynczych wyników pomiarów. Omówienie własności tej metody oraz przykłady zastosowania można znaleźć w podręcznikach metrologii. Podstawy matematyczne oparte na analizie przedziałowej podał Muciek [79]. Przejdziemy teraz do modelowania wyników pomiarów za pomocą zmiennych losowych.



## Rozdział 3

# Zmienne losowe – model wyników pomiarów

Jeśli obserwowane w trakcie eksperymentu wartości wykazują znaczący charakter losowy, to naturalnym narzędziem analizy takich danych jest rachunek prawdopodobieństwa, a właściwym modelem takich obserwacji jest zmienna losowa. Pozwala to na wykorzystanie bogatego dorobku rachunku prawdopodobieństwa i statystyki matematycznej. W rozdziale tym omówiono podstawy matematyczne zmiennych losowych, ich własności oraz sposób wykorzystania do modelowania wyników pomiarów. Przedstawione zostaną również elementy *statystyki opisowej* – metody wstępnego opracowania danych eksperymentalnych, bez posługiwania się rachunkiem prawdopodobieństwa.

### 3.1. Podstawowe definicje i oznaczenia

Niech  $\{\Omega, \mathcal{A}, P\}$  będzie przestrzenią probabilistyczną, w której  $\Omega$  jest zbiorem zdarzeń elementarnych,  $\mathcal{A}$  zbiorem zdarzeń losowych (rodziną podzbiorów zbioru zdarzeń elementarnych,  $\mathcal{A} \subset 2^\Omega$ ), natomiast  $P$  miarą probabilistyczną.

**Definicja 3.1.** Każdą funkcję  $x(\omega) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ , określoną na zbiorze zdarzeń elementarnych  $\Omega$  o wartościach w zbiorze liczb rzeczywistych  $\mathbb{R}$ , spełniającą następujący warunek: dla dowolnej liczby  $x \in \mathbb{R}$  zbiór tych zdarzeń elementarnych, które spełniają nierówność  $x(\omega) < x$  jest zdarzeniem losowym, co można zapisać krótko  $\{\omega : x(\omega) < x\} \in \mathcal{A}$  – nazywa się *zmienną losową*.

Dla uproszczenia zapisu, jeśli nie powoduje to niejednoznaczności, zmienną losową  $x(\omega)$  zapisuje się krótko symbolem  $x$ , pomijając argument  $\omega$ . Symbol  $x$  oznacza zarówno zmienną losową (funkcję  $x(\omega)$ ), jak i jej realizację (zaobserwowaną wartość). Aktualne znaczenie symbolu wynika bezpośrednio z tekstu.

W pomiarach wielkości fizycznych  $\Omega$  jest zbiorem stanów systemu pomiarowego. Zmienna losowa jest definiowana, w tym przypadku, w sposób naturalny jako funkcja  $x(\omega)$ , która określonemu stanowi  $\omega$  systemu pomiarowego przypo-

rządkowuje liczbę rzeczywistą, zwykle jest to wskazanie narzędzia pomiarowego. Liczbę tę nazywa się *wielkością zaobserwowaną* lub *obserwacją* (w metrologii używany jest również termin wartość zmierzona). Zmienna losowa, która opisuje prawdopodobieństwo pojawienia się określonych liczb w pomiarze wartości prawdziwej  $a$  jest matematycznym modelem wyniku pomiaru (obserwacji). W analizie probabilistycznej wynik pomiaru jest zmienną losową, podczas gdy w analizie przedziałowej wynik pomiaru jest przedziałem liczbowym zawierającym wartość prawdziwą.

Zmienną losową  $x(\omega)$  charakteryzuje się za pomocą *dystrybuanty*, którą jest funkcja  $F(x) : \mathbb{R} \rightarrow \langle 0; 1 \rangle$  zdefiniowana wzorem

$$F(x) = P\{x(\omega) < x\}. \quad (3.1)$$

Dystrybuanta jest funkcją niemalejącą; przyjmuje wartości z przedziału  $\langle 0; 1 \rangle$ ; ponadto  $F(-\infty) = 0$  oraz  $F(\infty) = 1$ .

Szczególną rolę w analizie danych pełnią *zmienne losowe absolutnie ciągłe*, tj. takie, dla których dystrybuanta  $F(x)$  ma pochodną w całym obszarze określoności, z wyjątkiem, co najwyżej przeliczalnej liczby punktów. Pochodną dystrybuanty

$$f(x) = F'(x) \quad (3.2)$$

nazywa się *funkcją gęstości* lub krótko *gęstością* zmiennej losowej  $x$ . Zmienna losowa jest określona, jeśli znana jest jej dystrybuanta lub gęstość. Gęstość określa następujące równanie

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1,$$

które wynika bezpośrednio z własności dystrybuanty,  $F(+\infty) - F(-\infty) = 1$ .

Dalej podano przykłady zmiennych losowych, które odgrywają ważną rolę w analizie danych eksperymentalnych.

**Rozkład jednostajny.** Zmienną losową, której gęstość jest stała w przedziale  $\langle c; d \rangle$ , a poza nim jest równa zero, nazywa się zmienną losową o *rozkładzie jednostajnym*. Zwykle, jako punkt wyjścia definiuje się rozkład jednostajny na odcinku  $\langle -0,5; 0,5 \rangle$ , którego gęstość jest równa

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } |x| \leq 0,5, \\ 0, & \text{gdy } |x| > 0,5. \end{cases} \quad (3.3)$$

**Rozkład normalny.** Zmienna losowa ma *rozkład normalny*, jeśli jej gęstość określona jest wzorem

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[ -\frac{1}{2} \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^2} \right]. \quad (3.4)$$

Tak więc zmienna losowa  $x$  o rozkładzie normalnym indeksowana jest dwoma parametrami  $\mu$  oraz  $\sigma$ , co zapisuje się krótko  $x \sim N(\mu, \sigma)$ . Parametry te mają ważne interpretacje, a zwłaszcza są „momentami” zmiennej losowej. Parametr  $\mu$  jest punktem, w którym gęstość  $f(x)$  osiąga maksimum, a ponadto jest ona symetryczna względem tego punktu. Parametr  $\sigma$  określa smukłość gęstości – czym parametr  $\sigma$  jest mniejszy, tym krzywa określona wzorem (3.4) jest smuklejsza, a to oznacza, że obserwowane wartości skupiają się bliżej wartości oczekiwanej  $\mu$ .

Rozkład normalny, którego parametry wynoszą  $\mu = 0$  oraz  $\sigma = 1$ , tj.  $x \sim N(0, 1)$  nazywamy *standaryzowanym rozkładem normalnym*.

Opracowano kilka modeli matematycznych, które uzasadniają występowanie rozkładu normalnego w praktycznych sytuacjach. Są to: model Moivera–Laplace’a [29], w którym rozkład normalny jest granicą rozkładu dwumianowego, model Herschela [89], w którym model normalny pojawia się jako rozkład strzałów do tarczy, model Hageny [89] opracowany dla teorii błędów. Ciekawą graficzną ilustracją uzasadniającą występowanie rozkładu normalnego jest tak zwana „tablica Galtona”, którą można uważać za ilustrację modelu Moivera–Laplace’a.

Ważną rolę odgrywają zmienne losowe, które są funkcjami zmiennych losowych o rozkładzie normalnym. Najważniejsze z nich to:

**Rozkład  $\chi^2$ .** Zmienna losowa ma *rozkład  $\chi_n^2$  z  $n$ -stopniami swobody*, jeśli jest sumą kwadratów  $n$  niezależnych standaryzowanych zmiennych losowych,  $x_1, \dots, x_n$ , o rozkładzie normalnym,  $x_i \sim N(0, 1)$ , więc

$$\chi_n^2 = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2. \quad (3.5)$$

**Rozkład Studenta.** Zmienna losowa  $t_n$  ma *rozkład  $t$  Studenta z  $n$ -stopniami swobody*, jeśli jest określona wzorem

$$t_n = \frac{x_0}{\sqrt{\frac{1}{n}\chi_n^2}}, \quad (3.6)$$

gdzie  $x_0$  oraz  $x_1, \dots, x_n$  są niezależnymi zmiennymi losowymi o standaryzowanym rozkładzie normalnym.

**Rozkład Snedecora.** Zmienna losowa  $F_{n,m}$  ma rozkład *Snedecora*<sup>1</sup> z  $(n, m)$  stopniami swobody, jeśli

$$F_{n,m} = \frac{\frac{1}{n}\chi_n^2}{\frac{1}{m}\chi_m^2}, \quad (3.7)$$

gdzie  $\chi_n^2$  oraz  $\chi_m^2$  są niezależnymi zmiennymi losowymi o rozkładzie  $\chi^2$ .

Rozkłady te będą wykorzystywane w dalszej części monografii.

### 3.2. Charakterystyki liczbowe zmiennych losowych

Gęstość jest dokładnym opisem zmiennej losowej, jednak do oceny jej własności bardzo przydatne są charakterystyki liczbowe, z których najczęściej spotykane to: momenty zwykłe, momenty centralne, wariancja, odchylenie standardowe, współczynniki korelacji, współczynnik asymetrii (skośność), współczynnik spłaszczenia (*curtosis*), wartość modalna, mediana, kwartyle, decyle, fraktyle; ponadto parametry statystyk opisowych: średnia arytmetyczna, średnia harmoniczna, średnia geometryczna, średnia trymowana (*trimmed mean*), moda dyskretna, mediana dyskretna. Omówimy wybrane parametry zmiennych losowych.

#### 3.2.1. Podstawowe parametry zmiennych losowych

Zacniemy od dwóch podstawowych parametrów zmiennych losowych, jakimi są: wartość oczekiwana i wariancja. *Wartość oczekiwana* zmiennej losowej  $x$ , nazywana również *wartością przeciętną*, zdefiniowana jest wzorem

$$E[x] = \mu = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx. \quad (3.8)$$

Wartość oczekiwana ma następujące własności:

$$\begin{aligned} E[c] &= c, \\ E[ax + b] &= aE[x] + b, \\ E[x + y] &= E[x] + E[y], \\ E[xy] &= E[x]E[y], \text{ gdy } x \text{ oraz } y \text{ są (losowo) niezależne,} \end{aligned}$$

gdzie  $a, b, c$  są stałymi liczbowymi.

<sup>1</sup> Nazywany również *rozkładem F Snedecora–Fishera*.

Wariancją  $D^2[x]$  zmiennej losowej  $x$  nazywa się wartość oczekiwaną kwadratu odchylenia zmiennej losowej od jej wartości oczekiwanej

$$D^2[x] = E[(x - \mu)^2]. \quad (3.9)$$

Wariancja jest miarą rozproszenia zmiennej losowej wokół jej wartości oczekiwanej. Pierwiastek z wariancji nazywany jest *odchyleniem standardowym* i oznaczany symbolem  $\sigma = D[x]$ . Wariancja ma następujące własności:

$$\begin{aligned} D^2[c] &= 0, \\ D^2[ax + b] &= a^2 D^2[x], \\ D^2[x \pm y] &= D^2[x] + D^2[y], \text{ gdy } x \text{ oraz } y \text{ są (losowo) niezależne,} \end{aligned}$$

gdzie  $a, b, c$  są stałymi liczbowymi.

Dla rozkładu normalnego  $N(\mu, \sigma)$ , wartość oczekiwana jest parametrem  $\mu$ ,  $E[x] = \mu$ , natomiast drugi parametr rozkładu jest wariancją  $D^2[x] = \sigma^2$  (lub odchyleniem standardowym  $\sigma$ ).

Dla rozkładu jednostajnego o gęstości (3.3) wartość oczekiwana i wariancja są równe odpowiednio

$$E[x] = 0, \quad D^2[x] = \frac{1}{12}; \quad (3.10)$$

dla rozkładu  $\chi_n^2$

$$E[x] = n, \quad D^2[x] = 2n; \quad (3.11)$$

natomiast dla rozkładu  $t_n$  Studenta o  $n$  stopniach swobody

$$\begin{aligned} E[x] &= 0, & \text{gdy } n > 1, \\ D^2[x] &= \frac{n}{n-2}, & \text{gdy } n > 2; \end{aligned} \quad (3.12)$$

dla  $n = 1$  wartość oczekiwana, a dla  $n \leq 2$  wariancja, nie są określone.

Wartość oczekiwana i odchylenie standardowe są wykorzystywane do opisu parametrów wyników pomiarów w metrologii. Jeśli zmienna losowa  $x$  reprezentuje wynik pomiaru wartości prawdziwej  $a$ , to różnicę

$$\Delta^s = E[x] - a, \quad (3.13)$$

nazywamy *błędem* lub *obciążeniem systematycznym* wyniku pomiaru. Zwykle wartość prawdziwa nie jest znana, więc nie można bezpośrednio wyznaczyć błędu systematycznego ze wzoru (3.13). Jeśli jednak można ocenić wartość prawdziwą

z dokładnością znacznie większą niż odchylenie standardowe  $\sigma = D[x]$ , na przykład wykorzystując odpowiednio dokładne narzędzie pomiarowe, to podstawiając we wzorze (3.13) tę ocenę zamiast  $a$ , można oszacować wartość błędu systematycznego. W metrologii odchylenie standardowe  $\sigma$  zmiennej losowej opisującej wynik pomiaru nazywane jest *niepewnością pomiaru*, natomiast wielokrotność odchylenia standardowego  $k\sigma$  *niepewnością rozszerzoną* (por. [42]).

### 3.2.2. Momenty zmiennych losowych

Uogólnieniem wartości oczekiwanej i wariancji są momenty zmiennych losowych.

*Momentem* (zwykłym) *rzędu*  $k$  ( $k = 0, 1, \dots$ ) zmiennej losowej  $x$  nazywa się liczbę

$$m_k = E[x^k] = \int_{-\infty}^{\infty} x^k f(x) dx. \quad (3.14)$$

Moment zwykły zerowego rzędu jest równy jeden,  $m_0 = 1$ , natomiast moment zwykły rzędu jeden jest wartością oczekiwaną zmiennej losowej,  $m_1 = E[x] = \mu$ .

Duże zastosowanie znajdują również momenty centralne określające odchylenie względem wartości oczekiwanej. *Momentem centralnym rzędu*  $k$  nazywa się liczbę

$$\mu_k = E[(x - \mu)^k] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^k f(x) dx, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.15)$$

Moment centralny zerowego rzędu jest równy jeden,  $\mu_0 = 1$ , moment centralny pierwszego rzędu jest równy zero,  $\mu_1 = 0$ , natomiast moment centralny drugiego rzędu jest wariancją  $\mu_2 = D^2[x]$ .

Dla rozkładu normalnego,  $x \sim N(0, \sigma)$ , o zerowej wartości oczekiwanej, momenty centralne są równe momentom zwykłym i przyjmują wartości [65]

$$\mu_k = m_k = \begin{cases} 1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (k-1)\sigma^k, & \text{gdy } k \text{ jest parzyste,} \\ 0, & \text{gdy } k \text{ jest nieparzyste.} \end{cases} \quad (3.16)$$

Tak więc wszystkie nieparzyste momenty centralne zmiennej losowej o rozkładzie normalnym są równe zero, natomiast momenty parzyste różne od zera. W szczególności trzeci moment  $\mu_3 = 0$ , a czwarty  $\mu_4 = 3\sigma^4$ . Wyniki te stanowią podstawę definicji dwóch miar określających „odległość” badanej zmiennej losowej od rozkładu normalnego, są to: „współczynnik asymetrii” oraz „współczynnik spłaszczenia”.

*Współczynnik asymetrii* (nazywany również *skośnością*) zdefiniowany jest wzorem

$$\gamma_1 = \frac{\mu_3}{\sigma^3}. \quad (3.17)$$



Dla rozkładów symetrycznych współczynnik asymetrii  $\gamma_1 = 0$ . Mianownik  $\sigma^3$  jest tu wprowadzony w celu normalizacji.

Drugi parametr, nazywany *współczynnikiem spłaszczenia* lub *kurtozą*, jest miarą spłaszczenia rozkładu względem rozkładu normalnego i zdefiniowany jest wzorem

$$\gamma_2 = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3, \quad (3.18)$$

gdzie  $\mu_4$  jest czwartym momentem centralnym, a  $\sigma$  odchyleniem standardowym rozkładu. Dla rozkładu normalnego kurtoza równa jest zeru; dla rozkładu bardziej „spiczastego” niż rozkład normalny kurtoza jest większa od zera, a dla bardziej „płaskiego” mniejsza od zera<sup>2</sup>.

Innym parametrem zmiennych losowych jest również *wartość modalna*, nazywana również *modą*. Jest to liczba, dla której gęstość  $f(x)$  osiąga maksimum.

**Fraktyle.** Użytecznymi parametrami zmiennych losowych znajdującymi zastosowanie w analizie danych eksperymentalnych są *fraktyle* (nazywane również *kwantylami*) definiowane następująco:

*Fraktylem* zmiennej losowej o dystrybuancie  $F(x)$  nazywa się liczbę  $x_q$  spełniającą równanie

$$F(x_q) = q, \quad q \in (0; 1). \quad (3.19)$$

Fraktyl  $x_q$  dzieli oś liczbową na dwa podprzedziały  $\langle -\infty; x_q \rangle$  oraz  $\langle x_q; \infty \rangle$  dla których prawdopodobieństwo, że wartość zmiennej losowej należy do pierwszego przedziału jest równe  $q$ , a do drugiego równe  $1 - q$ .

Przyjmując różne wartości liczby  $q$  we wzorze (3.19), otrzymuje się różne fraktyle, zwłaszcza dla  $q = 0,5$  otrzymuje się *medianę*

$$F(x_{0,5}) = 0,5, \quad (3.20)$$

która dzieli oś liczbową na dwa obszary o jednakowym prawdopodobieństwie. Mediana stanowi podstawę konstrukcji ważnej klasy „statystyk odpornych”.

Innymi fraktylami są *kwartyle* i *decyle*. Rozróżniamy: *kwartył dolny*  $x_{0,25}$  i *kwartył górny*  $x_{0,75}$  oraz *decyle*,  $x_{0,1}, x_{0,2}, \dots, x_{0,9}$ , które są fraktylami o wartościach  $q = 0,1; 0,2; \dots; 0,9$ . Fraktyle znajdują zastosowania do prezentacji graficznej zmian zmiennych losowych, np. szybkości wzrostu dzieci, roślin itd.

<sup>2</sup> Jeśli  $\gamma_2 = 0$ , to mówi się, że rozkład jest mezokurtyczny; jeśli  $\gamma_2 > 0$ , rozkładu leptokurtyczny; a jeśli  $\gamma_2 < 0$ , platokurtyczny.

### 3.2.3. Statystyki opisowe

Zanim przejdziemy do dalszej analizy zmiennych losowych przedstawimy wybrane elementy statystyki opisowej, która zajmuje się wstępną analizą danych bez bezpośredniego wykorzystania rachunku prawdopodobieństwa. Niektóre z nich mają związek z parametrami zmiennych losowych, np. są ocenami tych parametrów.

**Średnia arytmetyczna.** Średnią arytmetyczną ciągu  $x_1, \dots, x_n$  nazywamy liczbę

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (3.21)$$

Wykazano, że średnia arytmetyczna jest „najbliżej” położonym punktem od  $x_1, \dots, x_n$ , w sensie metryki euklidesowej. W tym celu wyznacza się taką ocenę  $\hat{a}$  parametru  $a$ , która minimalizuje różnicę kwadratów

$$Q(a) = \min_a \sum_{i=1}^n (x_i - a)^2.$$

Dodając i odejmując wartość średnią  $\bar{x}$  w nawiasie prawej strony powyższego równania otrzymuje się:

$$\begin{aligned} Q(a) &= \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}) + (\bar{x} - a)]^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 + 2(\bar{x} - a) \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) + n(\bar{x} - a)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 + n(\bar{x} - a)^2, \end{aligned} \quad (3.22)$$

gdzie przy przejściu od przedostatniego do ostatniego wyrażenia wykorzystano równość  $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) = 0$ .

Wyrażenie (3.22) osiąga minimum względem  $a$  dla  $a = \bar{x}$ , a więc wartość średnia minimalizuje sumę kwadratów różnic. Ta własność wartości średniej przemawia za stosowaniem metody najmniejszych kwadratów.

**Mediana próby.** Niech  $x_1, x_2, \dots, x_n$  będzie próbą prostą – ciągiem  $n$  niezależnych obserwacji zmiennej losowej o dystrybucji  $F(x)$ . Obserwacje te porządkuje się względem wzrastających wartości, tworząc ciąg

$$x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \dots \leq x_{(n)}. \quad (3.23)$$

Medianą  $x_m$  próby  $x_1, x_2, \dots, x_n$  nazywa się środkową liczbę w uporządkowanym ciągu obserwacji, gdy  $n$  jest liczbą nieparzystą albo średnią arytmetyczną dwóch środkowych liczb, gdy  $n$  jest liczbą parzystą, więc

$$x_m = \begin{cases} x_{(\frac{n+1}{2})}, & \text{gdy } n \text{ nieparzyste,} \\ \frac{1}{2}(x_{(n/2)} + x_{(n/2+1)}), & \text{gdy } n \text{ parzyste.} \end{cases} \quad (3.24)$$

Mediana próby  $x_m$ , wzór (3.24), jest oceną mediany  $x_{0,5}$ , wzór (3.20), zmiennej losowej  $x$ .

**Przykład 3.1.** Porównamy wartości średnie z wartościami mediany próby dla kilku ciągów obserwacji, co pozwoli na poznanie ich własności. Załóżmy, że dokonano pięciu pomiarów, które po uporządkowaniu tworzą zbiór  $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ . Wartość średnia i mediana próby wynoszą odpowiednio

$$\bar{x} = 3, \quad x_m = x_{(3)} = 3.$$

Tak więc wartość średnia jest równa medianie,  $\bar{x} = x_m$ .

Jeśli dołączy się nowy pomiar o wartości równej 0, to otrzyma się próbę złożoną z sześciu elementów,  $\{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$ , a jej wartość średnia oraz mediana, na mocy (3.24) wynoszą, odpowiednio

$$\bar{x} = 2,5, \quad x_m = 0,5(x_{(3)} + x_{(4)}) = 2,5.$$

Ponownie więc wartość średnia okazała się być równa medianie. Równość wartości średniej i mediany nie jest tu przypadkowa – wynika z symetrii obu prób.

Założmy teraz, że wykonano kolejny, siódmy, pomiar i otrzymano wynik  $x_{(7)} = 97$  – znacznie odbiegający od pozostałych; stąd zbiór pomiarów jest teraz równy  $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 97\}$ ; wartość średnia i mediana wynoszą odpowiednio

$$\bar{x} = 16, \quad x_m = 0,5(x_{(3)} + x_{(4)}) = 2,5.$$

Wartość średnia uległa znacznej zmianie, co wynika z dużej jej wrażliwości na „odstające obserwacje” – jest to cecha ocen najmniejszych kwadratów. Natomiast mediana nie zmieniła się. Zauważmy, że jeśli  $x_7 > \max\{x_1, \dots, x_6\}$ , to wartość  $x_7$  nie zmienia wartości mediany. Ten przykład pokazuje podstawową własność mediany jaką jest „odporność” na odstające obserwacje.  $\square$

Analogicznie do mediany próby można konstruować fraktylę próby, np. kwartył dolny próby. Pozostawiamy czytelnikowi wyprowadzenie wzorów.

Omówimy jeszcze dwie średnie znajdujące zastosowania w analizie danych, a mianowicie średnią geometryczną i średnią harmoniczną.

Średnią geometryczną  $\bar{g}$  dodatnich liczb  $x_1, \dots, x_n$  nazywa się liczbę

$$\bar{g} = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n x_i}. \quad (3.25)$$

Jeśli wszystkie  $x_i > 0$ , to  $\log \bar{g} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log x_i$ . Średnia geometryczna znajduje zastosowanie w ekonomii. Jeśli, na przykład w kolejnych czterech kwartałach wzrost pewnej kwoty pieniędzy wynosi: 1,09; 1,06; 1,05 i 1,06 w stosunku do kwoty z poprzedniego kwartału, to średni roczny wskaźnik wzrostu tej kwoty jest średnią geometryczną z kolejnych wzrostów.

Średnią harmoniczną  $\bar{h}$ , różnych od zera liczb  $x_1, \dots, x_n$  nazywa się odwrotność średniej arytmetycznej odwrotności tych liczb

$$\bar{h} = \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{x_i} \right)^{-1}. \quad (3.26)$$

**Przykład 3.2.** Samochód przebył drogę złożoną z trzech odcinków, z których każdy ma długość  $s$ . W kolejnych odcinkach poruszał się z prędkościami  $v_1, v_2$  i  $v_3$ . Jaka jest średnia prędkość pojazdu na odcinku  $3s$ ?

*Rozwiązanie.*

Czas potrzebny do przebycia  $i$ -tego odcinka wynosi  $t_i = s/v_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , więc czas potrzebny na przebycie całej drogi  $3s$  jest równy  $t = t_1 + t_2 + t_3$ . Średnia prędkość  $v_s$  na całej drodze jest równa stosunkowi całej drogi,  $3s$ , do całego czasu  $t$ , więc

$$v_s = \frac{3s}{t} = \frac{3s}{\frac{s}{v_1} + \frac{s}{v_2} + \frac{s}{v_3}} = \frac{1}{\frac{1}{3} \left( \frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} + \frac{1}{v_3} \right)},$$

gdzie przy przejściu od przedostatniego do ostatniego wyrażenia uproszczono drogę  $s$ . Ze wzoru tego wynika, że średnia prędkość  $v_s$  jest równa średniej harmonicznnej  $h$  prędkości w poszczególnych odcinkach drogi.  $\square$

### 3.3. Wektory losowe

Ciąg zmiennych losowych  $\{x_i\} = x_1, \dots, x_n$  określonych na tej samej przestrzeni probabilistycznej nazywa się *wektorem losowym* i oznaczany jest symbolem

$X = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ . Wartością oczekiwaną  $\mathcal{E}[X]$  wektora losowego  $X$  nazywa się wektor, którego elementami są wartości oczekiwane

$$\mathcal{E}[X] = [E[x_1], E[x_2], \dots, E[x_n]]^T$$

poszczególnych zmiennych losowych.

Miarą zależności losowej dwóch zmiennych losowych  $x$  oraz  $y$  jest *kowariancja* zdefiniowana wyrażeniem

$$\text{cov}[x, y] = \sigma_{xy} = E[(x - E[x])(y - E[y])], \quad (3.27)$$

natomiast unormowaną miarą zależności losowej jest *współczynnik korelacji*

$$\rho = \frac{\text{cov}[x, y]}{\sigma_x \sigma_y}, \quad (3.28)$$

gdzie  $\sigma_x$  oraz  $\sigma_y$  są odchyleniami standardowymi zmiennych losowych, odpowiednio  $x$  oraz  $y$ .

Współczynnik korelacji spełnia nierówność

$$-1 \leq \rho \leq 1.$$

Mówimy, że zmienne losowe  $x$  oraz  $y$  *nie są skorelowane*, gdy  $\rho = 0$ . Jeśli  $|\rho| = 1$ , to z prawdopodobieństwem 1 między zmiennymi losowymi  $x$  i  $y$  spełniona jest zależność

$$P\{y = ax + b\} = 1.$$

Zachodzi ważne twierdzenie.

**Twierdzenie 3.1.** Jeśli zmienne losowe  $x$  i  $y$  są losowo niezależne, to

$$\text{cov}[x, y] = \rho = 0.$$

Twierdzenie odwrotne nie jest prawdziwe – z tego, że współczynnik korelacji zmiennych losowych  $x$  i  $y$  równy jest zeru, nie wynika, że są one losowo niezależne. Jeśli jednak współczynnik korelacji  $\rho = 0$  oraz wektor losowy  $[x, y]^T$  ma rozkład łącznie normalny, to  $x$  i  $y$  są losowo niezależne [65]. Własność ta wskazuje na sposób badania niezależności losowej. Jeśli chcemy sprawdzić, czy zmienne losowe  $x$  i  $y$  są niezależne na podstawie ciągu obserwacji  $\{(x_i, y_i)\}$ , to należy w tym celu wyznaczyć współczynnik korelacji z próby i sprawdzić, czy można przyjąć

hipotezę, że jest on równy zero oraz zbadać hipotezę, że obserwacje  $\{x_i\}$  oraz  $\{y_i\}$  są realizacjami zmiennych losowych o rozkładzie normalnym. Pozytywny wynik obu testów wskazuje, że obserwacje są realizacjami dwóch niezależnych zmiennych losowych o rozkładach normalnych.

Odpowiednikiem wariancji zmiennej losowej jest dla wektora losowego  $X = [x_1, \dots, x_n]^T$  macierz kowariancji (nazywana również macierzą wariancyjno-kowariancyjną), która określona jest wzorem

$$\mathcal{D}[X] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_{nn} \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

gdzie  $\sigma_{ij} = \text{cov}[x_i, x_j]$  są kowariancjami zmiennych losowych  $x_i$  oraz  $x_j$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ . Zauważmy, że  $\sigma_{ii} = \sigma_i^2$ , co oznacza, że kowariancja zmiennej losowej względem siebie jest jej wariancją.

$n$ -wymiarowy wektor losowy  $X$  ma rozkład normalny, jeśli jego gęstość określona jest wzorem

$$f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{|\Sigma|}} \exp\left\{-\frac{1}{2}[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})]\right\}, \quad (3.30)$$

gdzie  $\boldsymbol{\mu} = \mathcal{E}[X]$  jest wektorem wartości oczekiwanych, a  $\Sigma = \mathcal{D}[X]$  jest macierzą kowariancji wektora losowego  $X$ .  $n$ -wymiarowy wektor losowy o rozkładzie normalnym oznaczany jest symbolem  $N_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ .

Szczególnie duże zastosowanie ma dwuwymiarowy rozkład normalny, którego funkcja (wzór (3.30) dla  $n = 2$ ) jest określona wzorem

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sqrt{1-\rho^2}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left[ \frac{(x-\mu_x)^2}{\sigma_x^2} - 2\rho \frac{(x-\mu_x)(y-\mu_y)}{\sigma_x\sigma_y} + \frac{(y-\mu_y)^2}{\sigma_y^2} \right]\right\}, \quad (3.31)$$

gdzie symbole  $x_1$  i  $x_2$  zostały zastąpione symbolami, odpowiednio  $x$  i  $y$ ;  $\mu_x$  i  $\mu_y$  są wartościami oczekiwanymi, a  $\sigma_x$  i  $\sigma_y$  odchyleniami standardowymi zmiennych losowych, odpowiednio  $x$  i  $y$ ; natomiast  $\rho$  jest współczynnikiem korelacji tych zmiennych. Gęstość  $f$  reprezentuje powierzchnię w przestrzeni  $\mathbb{R}^3$ , której maksimum jest w punkcie  $(\mu_x, \mu_y)$ , natomiast przekroje płaszczyzną poziomą, leżącą poniżej maksimum funkcji  $f$  są elipsami. Nachylenie osi elips zależy od współczynnika korelacji.

### 3.4. Wyznaczanie rozkładu zmiennej losowej

Przedstawimy procedurę wyznaczania rozkładu, funkcji gęstości  $f(x)$  lub dystrybuanty  $F(x)$ , badanej zmiennej losowej na podstawie zaobserwowanych jej wartości  $x_1, \dots, x_n$ . Stosowane są do tego celu testy zgodności [66]. *Testem zgodności* nazywany jest test do weryfikacji hipotezy dotyczącej zgodności zbioru realizacji  $x_1, \dots, x_n$  z rozkładem hipotetycznym. Procedurę wyznaczania rozkładu można podzielić na dwa kroki. W pierwszym określana jest rodzina, zwykle parametryczna, do której należy gęstość lub dystrybuanta, natomiast w drugim kroku estymowane są parametry i sprawdzana jest hipoteza, że obserwacje pochodzą ze zmiennej losowej o założonym rozkładzie.

Jeśli nie ma informacji a priori o rozkładzie, to należy określić klasę funkcji na podstawie obserwacji – próby. Do tego pomocny jest histogram lub wykres *dystrybuanty empirycznej*. *Dystrybuantą empiryczną* próby  $x_1, \dots, x_n$  nazywamy funkcję

$$F_e(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < x_{(1)}, \\ \frac{k}{n} & \text{dla } x_{(k)} \leq x < x_{(k+1)}, \quad 1 \leq k \leq n-1, \\ 1 & \text{dla } x \geq x_{(n)}, \end{cases} \quad (3.32)$$

gdzie  $x_{(1)} \leq \dots \leq x_{(n)}$  jest uporządkowanym ciągiem.

Na podstawie „kształtu” histogramu lub dystrybuanty empirycznej należy postawić hipotezę, że zmienna losowa należy do określonej rodziny rozkładów, na przykład, że jest zmienną losową o rozkładzie normalnym. Hipotetyczną gęstość oznaczymy symbolem  $f_0(x)$ , a jej dystrybuantę symbolem  $F_0(x)$ . Następnie, wykorzystując *testy zgodności*, sprawdzamy „odległość” hipotetycznej dystrybuanty  $F_0(x)$  od empirycznej dystrybuanty  $F_e(x)$  lub odległość hipotetycznej gęstości  $f_0(x)$  od empirycznej  $f_e(x)$ . Jeśli ta odległość jest „mała” – nie przekracza wartości krytycznej – to formuluje się wynik testu następująco „nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy”, a jeśli jest większa niż wartość krytyczna, to hipotezę odrzucamy – przyjmujemy się, że zmienna losowa nie należy do założonej rodziny rozkładów. Ponieważ próba nigdy nie dostarcza całkowitej informacji o zbiorowości, więc odpowiedź obarczona jest pewnym ryzykiem. Można odrzucić weryfikowaną hipotezę wtedy, gdy jest ona w rzeczywistości prawdziwa (*błąd pierwszego rodzaju* nazywany również *poziomem istotności testu*) lub przyjąć weryfikowaną hipotezę jako prawdziwą, podczas gdy jest ona fałszywa (*błąd drugiego rodzaju*).

W testach zgodności stosowane są różne miary (*metryki*) odległości funkcji. Najczęściej wykorzystywana jest metryka  $L_1$

$$\Delta_1 = \sup_{-\infty < x < \infty} |F_e(x) - F_0(x)| \quad (3.33)$$

lub metryka  $L_2$

$$\Delta_2 = \int_{-\infty}^{\infty} [f_e(x) - f_0(x)]^2 dx. \quad (3.34)$$

Metryka  $\Delta_1$  stosowana jest zwykle do badania odległości dystrybuant i na tej podstawie zbudowany jest test Kołmogorowa, natomiast druga metryka,  $\Delta_2$ , stosowana jest zwykle do badania odległości gęstości i na tej mierze oparty jest test  $\chi^2$ . Omówiono test zgodności  $\chi^2$ , który jest uniwersalnym testem przeznaczonym do badania różnych rozkładów oraz tak zwane *testy normalności* przeznaczone do testowania hipotezy, że próba pochodzi ze zmiennej losowej o rozkładzie normalnym.

### 3.4.1. Test zgodności $\chi^2$

Test  $\chi^2$  opracowany przez Pearsona w 1900 r. [86] służy do weryfikacji hipotezy  $H_0$ , że obserwowany ciąg obserwacji  $x_1, \dots, x_n$  pochodzi z próby o gęstości  $f_0(x)$ . W teście tym bada się „odległość” hipotetycznej gęstości od histogramu sporządzonego na podstawie zaobserwowanych danych. Rozpocznijmy od podania wskazówek ułatwiających sporządzenie histogramu.

Założmy, że dokonano  $n$  obserwacji  $x_1, \dots, x_n$  zmiennej losowej  $x$ . Obserwacje te należy pogrupować w *klasy* – przedziały liczbowe – za pomocą granic  $g_0, g_1, \dots, g_k$ ;  $j$ -ta klasa ma granice  $g_{j-1}$  i  $g_j$  (jest przedziałem liczbowym  $\langle g_{j-1}; g_j \rangle$ ), gdzie  $k$  oznacza liczbę klas. Liczba tych obserwacji, które należą do  $j$ -tej klasy nazywa się *licznością klasy* i oznacza symbolem  $n_j$ . Liczności spełniają warunek  $n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$ . Zalecana liczba klas  $k$ -histogramu wynosi [66]

$$k \simeq \sqrt{n}, \quad (3.35)$$

przy czym nie stosuje się większej liczby klas niż 30. Za *długość klasy*  $b$  (szerokość przedziału) przyjmuje się

$$b \simeq \frac{R}{k},$$

gdzie  $R = x_{\max} - x_{\min} = x_{(n)} - x_{(1)}$  jest *rozstępem próby*. Żeby wszystkie obserwacje znalazły się w klasach powinna być spełniona nierówność  $b k \geq R$ .



Histogram sporządza się następująco: na osi poziomej zaznacza się środki albo granice poszczególnych klas, a na osi pionowej liczności  $n_j$  lub *częstości*

$$w_j = \frac{n_j}{n}.$$

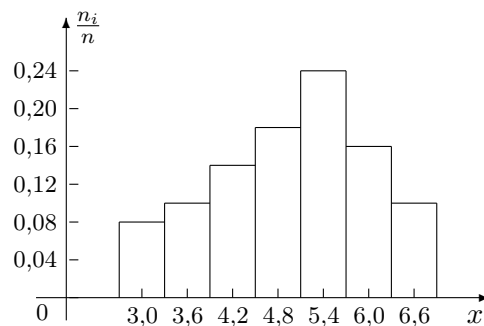
Zalecany jest drugi sposób. Środki kolejnych klas oraz ich liczności  $n_j$  tworzą tzw. *szereg rozdzielczy*.

Zwykle przyjmuje się, że średnia liczb obserwacji w poszczególnych przedziałach powinna być nie mniejsza niż pięć, a liczba klas nie powinna być mniejsza niż sześć. Stąd minimalna liczba obserwacji dla testu  $\chi^2$  wynosi około 30.

Sposób konstruowania histogramu przedstawiono na przykładzie.

**Przykład 3.3.** Założono, że dokonano  $n = 50$  obserwacji. Zgodnie ze wzorem (3.35) liczba klas powinna być równa  $\sqrt{50} \simeq 7,071$ , więc przyjmuje się  $k = 7$ . Znajduje się obserwację maksymalną  $x_{\max}$  oraz minimalną  $x_{\min}$ ; powiedzmy, że wynoszą one  $x_{\max} = 6,7$  i  $x_{\min} = 2,9$ , stąd rozstęp  $R = 3,8$ . Iloraz  $R/k \simeq 0,543$ , więc przyjmuje się długość klasy  $b = 0,6$ . Wyznacza się dolną granicę pierwszej klasy nieco poniżej  $x_{\min}$ , stąd  $g_0 = 2,7$ . Następnie oblicza się granice kolejnych klas  $g_1, \dots, g_7$ , dodając  $b$ , stąd otrzymuje się ciąg wartości 2,7; 3,3; 3,9; 4,5; 5,1; 5,7; 6,3; 6,9.

Oblicza się liczności klas (liczby obserwacji w poszczególnych klasach), które dla tego przykładu wynoszą 4; 5; 7; 9; 12; 8; 5. Graficzną reprezentację wyników w formie histogramu przedstawiono na rysunku 3.1  $\square$



Rys. 3.1. Histogram skonstruowany dla prezentowanej w przykładzie próby; suma wysokości równa jest 1

Niech  $p_j$  oznacza prawdopodobieństwo, że zmienna losowa  $x$  przyjmuje wartości z  $j$ -tego przedziału, gdy hipoteza  $H_0$  jest prawdziwa. Prawdopodobieństwo to można obliczyć ze wzoru

$$p_j = \int_{g_{j-1}}^{g_j} f_0(x) dx. \quad (3.36)$$

Liczby  $p_j$  spełniają związek  $p_1 + \dots + p_k = 1$ . Przeciętna liczba obserwacji, która „wpadnie” do  $j$ -tej klasy jest równa  $np_j$ ; wartości te nazywa się *licznościami hipotetycznymi*, natomiast liczby  $n_j$  (tych obserwacji, które „wpadły” do  $j$ -tej klasy) nazywamy *licznościami doświadczalnymi*. Jeśli hipoteza  $H_0$  jest prawdziwa, to liczności doświadczalne powinny być „bliskie” licznościom hipotetycznym. Person zaproponował [87] następującą miarę odległości między tymi licznościami

$$Q^2 = \sum_{j=1}^k \frac{(n_j - np_j)^2}{np_j}, \quad (3.37)$$

natomiast Cramér [17] wykazał, że prawdziwe jest twierdzenie 3.2.

**Twierdzenie 3.2.** Jeżeli hipoteza  $H_0$  jest prawdziwa i liczba obserwacji w próbie dąży do nieskończoności,  $n \rightarrow \infty$ , to statystyka  $Q^2$  ma asymptotycznie rozkład  $\chi^2$  o  $k - p - 1$  stopniach swobody, gdzie  $p$  jest liczbą parametrów gęstości  $f_0(x)$ , które należy wyznaczyć z próby  $x_1, \dots, x_n$ , aby móc obliczyć prawdopodobieństwa  $p_j$ .

Małe wartości sprawdzianu  $Q^2$  przemawiają za hipotezą, natomiast duże przeciwnie. Wartość krytyczną należy odczytać z tablic rozkładu  $\chi^2$  dla założonego poziomu istotności testu.

Testowanie hipotezy o rozkładzie można przeprowadzić według następujących punktów:

1. Konstruuje się szereg rozdzielnicy – wyznacza się klasy i licznosci.
2. Na bazie tych klas sporządza się histogram.
3. Wykorzystuje się histogram do określenia gęstości  $f_0(x; a_1, \dots, a_p)$  z dokładnością do nieznanymi parametrów – postawienia hipotezy  $H_0$ .
4. Estymuje się parametry  $a_1, \dots, a_p$  gęstości  $f_0(x; a_1, \dots, a_p)$ .
5. Znając  $f_0(x; a_1, \dots, a_p)$  wyznacza się prawdopodobieństwa  $p_j$  – zwykle odczytuje je z tablic rozkładu hipotetycznego  $f_0$ .
6. Oblicza się sprawdzian  $Q^2$  ze wzoru (3.37).
7. Wyznacza się liczbę stopni swobody – wzór  $l = k - p - 1$ .
8. Zakłada się poziom istotności  $\alpha$  (błąd pierwszego rodzaju), zwykle  $\alpha = 0,05$ .

9. Dla przyjętego  $\alpha$  i obliczonego  $l$  odczytuje się z tablic rozkładu  $\chi^2$  kwantyl  $\gamma_\alpha$  spełniający wzór  $F(\gamma_\alpha) = 1 - \alpha$  – jest to *wartość krytyczna testu*.

10. Porównuje się sprawdzian  $Q^2$  z kwantylem  $\gamma_\alpha$  – jeśli  $Q^2 \leq \gamma_\alpha$ , to nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy  $H_0$ , w przeciwnym razie odrzucamy hipotezę.

Test  $\chi^2$  oparty jest na metryce  $\Delta_2$ . Innym testem uniwersalnym jest test Kołmogorowa, który wykorzystuje metrykę  $\Delta_1$ . Zainteresowany czytelnik znajdzie go w cytowanej literaturze, np. [29, 66]. W następnym punkcie omówiono zmodyfikowany przez Lillefors test Kołmogorowa przeznaczony do testowania normalności rozkładów.

### 3.5. Testowanie normalności rozkładów

Rozkład normalny odgrywa szczególną rolę w analizie danych i dlatego celowe jest poświęcenie większej uwagi testowaniu tego rozkładu. Do tego celu można zastosować zarówno ogólne testy, na przykład omówiony powyżej test  $\chi^2$  czy test Kołmogorowa [86], jak i specjalne *testy normalności*. Dalej zostaną przedstawione najważniejsze z nich.

**Test oparty na współczynnikach asymetrii i kurtozy.** Test ten wykorzystuje szczególną miarę odległości dowolnej dystrybuanty  $F(x)$  od rodziny dystrybuant normalnych  $\mathcal{F}_N$ . Ponieważ dla rozkładu normalnego współczynniki asymetrii i kurtozy są równe zero, więc jest rzeczą naturalną, aby „zmierzyć” odległość dystrybuanty  $F(x)$  od  $\mathcal{F}_N$  za pomocą następujących miar (por. (3.17) i (3.18)).

$$|\gamma_1| = \frac{|\mu_3|}{\sigma^3} \quad (3.38)$$

oraz

$$|\gamma_2| = \left| \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3 \right|, \quad (3.39)$$

gdzie  $\mu_3$  i  $\mu_4$  oznaczają odpowiednio, trzeci i czwarty moment centralny.

Małe wartości współczynników  $\gamma_1$  i  $\gamma_2$  przemawiają za rozkładem normalnym, natomiast duże przeciw. Wyznamy wartości krytyczne tych współczynników – powyżej których należy odrzucić hipotezę o normalności badanego rozkładu. Ponieważ miara ta opiera się tylko na dwóch współczynnikach, więc test ten może być stosowany, gdy dysponujemy dużą próbą.

Niech  $t_1$  i  $t_2$  oznaczają estymatory współczynników, odpowiednio  $\gamma_1$  i  $\gamma_2$ , otrzymane ze wzorów (3.38) i (3.39), w których zamiast  $\sigma$ ,  $\mu_3$  i  $\mu_4$  wstawiono ich estymatory:

$$\hat{\sigma}^2 = s^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad \hat{\mu}_3 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3, \quad \hat{\mu}_4 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^4. \quad (3.40)$$

Można wykazać (por. [17], s. 342–343), że gdy liczba obserwacji  $n$  jest duża, wówczas wariancje tych estymatorów są w przybliżeniu równe

$$D^2[t_1] \simeq \frac{6}{n} \quad \text{oraz} \quad D^2[t_2] \simeq \frac{24}{n}, \quad (3.41)$$

natomiast ich wartości oczekiwane  $E[t_1] = 0$  i  $E[t_2] = 0$ . Znormalizujemy zmienne losowe  $t_1$  i  $t_2$ , dzieląc je przez ich odchylenia standardowe, skąd otrzymamy następujące sprawdziany

$$q_1 = \frac{t_1}{\sqrt{6}} \sqrt{n}, \quad q_2 = \frac{t_2}{\sqrt{24}} \sqrt{n}. \quad (3.42)$$

Jeśli hipoteza o normalności badanego rozkładu jest prawdziwa, to sprawdziany  $q_1$  i  $q_2$  mają asymptotycznie standaryzowane rozkłady normalne,  $q_1 \sim N(0, 1)$  i  $q_2 \sim N(0, 1)$ . Hipotezę o normalności rozkładu należy odrzucić, gdy wartość przynajmniej jednego ze sprawdzianów jest, co do modułu, większa niż założona granica – zwykle 3:

$$|q_1| > 3 \quad \text{lub} \quad |q_2| > 3.$$

**Przykład 3.4.** Załóżmy, że dokonano  $n = 400$  niezależnych pomiarów, na podstawie których, ze wzorów (3.40) wyznaczono oceny parametrów, skąd otrzymano: odchylenie standardowe  $\hat{\sigma} = s = 0,95$ , trzeci moment centralny  $\hat{\mu}_3 = 0,67$  oraz czwarty moment centralny  $\hat{\mu}_4 = 1,90$ . Sprawdźmy hipotezę, że obserwowana zmienna losowa ma rozkład normalny.

Obliczono ocenę współczynników  $\gamma_1$  i  $\gamma_2$ , skąd  $\gamma_1 = 0,781$  oraz  $\gamma_2 = -0,667$ . Po podstawieniu tych wartości do wzorów (3.42) otrzymano wartości sprawdzianów  $q_1 = 6,38$  i  $q_2 = -2,72$ . Pierwszy z nich,  $q_1$ , znacznie przekracza wartość 3, więc zmienna losowa ma rozkład asymetryczny. Drugi sprawdzian,  $q_2$ , ma wartość zbliżoną do wartości granicznej 3, co oznacza, że spłaszczenie rozkładu znacznie odbiega od rozkładu normalnego. Końcowy wniosek: należy odrzucić hipotezę o normalności rozkładu.  $\square$

Zaletą testu opartego na współczynnikach asymetrii i kurtozy jest jego prostota i to, że dostarcza on informacji o kształcie analizowanej zmiennej losowej.

**Test Kołmogorowa–Lillieforsa.** Test ten służy do weryfikacji hipotezy  $H_0$ , że badana zmienna losowa ma rozkład  $N(\bar{x}, s_1)$ , gdzie  $\bar{x}$  i  $s_1$  są ocenami nieznanymi parametrów, odpowiednio  $\mu$  i  $\sigma$ , rozkładu hipotetycznego  $N(\mu, \sigma)$  otrzymanymi z  $n$ -elementowej próby  $x_1, \dots, x_n$ . Test Kołmogorowa–Lillieforsa można przeprowadzić następująco:

1. Oblicza się  $\bar{x}$  i  $s_1^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ .
2. Oblicza się dystrybuantę empiryczną  $F_e(x)$  zgodnie ze wzorem (3.32).
3. Oblicza się różnice

$$d_i = |F_0(x_i) - F_e(x_i)|, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

gdzie  $F_0$  jest dystrybuantą rozkładu normalnego  $N(\bar{x}, s_1)$ ; wartości  $F_0(x_i)$  odczytuje się z tablic standaryzowanego rozkładu normalnego  $u$ , wykorzystując zależność  $F_0(x_i) = P(x < x_i) = P(u < u_i) = G(u_i)$ , gdzie  $u_i = (x_i - \bar{x})/s_1$ , a  $G(u)$  jest dystrybuantą rozkładu  $N(0, 1)$ .

4. Spośród wszystkich różnic  $d_i$  wybiera się największą

$$d_i^m = \max_{x_i} |F_0(x_i) - F_e(x_i)|;$$

5. W ostatnim kroku porównuje się największą różnicę  $d_i^m$  z wartością krytyczną  $\gamma_n(1 - \alpha)$ , którą odczytuje się z tablic opracowanych przez Lillieforsa [68] (por. również [66]) dla liczby obserwacji  $n$  i przyjętego poziomu istotności  $\alpha$ .

Jeżeli  $d_i^m \in \langle 0; \gamma_n(1 - \alpha) \rangle$ , to próba nie przeczy hipotezie – nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy. Natomiast, jeżeli  $d_i^m \in \langle \gamma_n(1 - \alpha; 1) \rangle$ , to hipotezę odrzuca się na poziomie istotności  $\alpha$ .

Przykładowe wartości krytyczne testu Kołmogorowa–Lillieforsa dla  $\alpha = 0,05$  i różnych  $n$  są następujące:

$n$	31	40	50	...	100
$\gamma_n(1 - \alpha)$	0,1599	0,1630	0,1488	...	0,1031

Test Kołmogorowa–Lillieforsa stosowany jest dla liczby obserwacji od 30 do 100.

**Test Shapiro–Wilka.** W tym teście wykorzystywana jest następująca statystyka testowa [101, 102]

$$W = \frac{(\sum_{i=1}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} a_i(n)(x_{(n-i+1)} - x_{(i)}))^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad (3.43)$$

gdzie różnice  $x_{(n-i+1)} - x_{(i)}$  są tzw. quasi-rozstępami, natomiast  $\lfloor n/2 \rfloor$  oznacza część całkowitą liczby  $n/2$ . Dla  $i = 1$  otrzymuje się rozstęp  $x_{(n)} - x_{(1)}$ , czyli różnicę między największą wartością  $x_{\max} = x_{(n)}$ , a najmniejszą  $x_{\min} = x_{(1)}$ ; dla  $i = 2$  różnicę między kolejnymi elementami itd. Parametry  $a_i(n)$  są stałymi zależnymi zarówno od liczności  $n$ -próby, jak i od numeru quasi-rozstępu  $i$ , stąd liczba parametrów jest bardzo duża i rośnie szybko wraz z liczbą obserwacji. Wartości parametrów  $a_i(n)$  dla  $n \leq 50$  podano w tablicach, np. [66, 77].

Parametry  $a_i(n)$  można traktować jako wagi poszczególnych quasi-rozstępów. Wagi te przyjmują największe wartości dla największego rozstępu (dla  $i = 1$ ) i szybko maleją dla kolejnych rozstępów. Na przykład dla  $n = 30$ , poszczególne parametry są następujące:

$i$	1	2	...	5	...	10	...	15
$a_i(30)$	0,4254	0,2944	...	0,1870	...	0,0862	...	0,076

Hipotezę o normalności badanego rozkładu odrzuca się, gdy wartość statystyki  $W$  obliczona na podstawie wzoru (3.43) leży poza przedziałem liczbowym

$$\langle W(0, 5\alpha, n); W(1 - 0, 5\alpha, n) \rangle,$$

którego końcami są kwantyle rozkładu statystyki  $W$ . Wartości  $W(\alpha, n)$  dla poziomów ufności  $\alpha = 0,01; 0,02; 0,05; 0,98; 0,99$  podane są w pracach [66, 77, 101].

Sposób przeprowadzenia testu Shapiro–Wilka może być następujący:

1. Porządkuje się próbę i oblicza różnice  $x_{(n-i+1)} - x_{(i)}$  dla  $i = 1, 2, \dots, n/2$ .
2. Odczytuje się parametry  $a_i(n)$  z tablic dla  $i = 1, 2, \dots, n/2$ .
3. Oblicza się wartość  $W_o$  statystyki  $W$  ze wzoru (3.43).
4. Zakłada się poziom istotności testu  $\alpha$  (np.  $\alpha = 0,1$ ) i odczytuje z tablic wartości kwantyli  $W(\frac{1}{2}\alpha, n)$  i  $W(1 - \frac{1}{2}\alpha, n)$ .
5. Sprawdza się, czy  $W_o$  należy do przedziału liczbowego  $\langle W(0, 5\alpha, n); W(1 - 0, 5\alpha, n) \rangle$  – jeśli tak, to „nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy”, natomiast jeśli  $W_o$  leży poza tym przedziałem, to odrzucamy hipotezę o normalności rozkładu na poziomie istotności  $\alpha$ .

Test Shapiro–Wilka należy do najbardziej efektywnych sprawdzianów normalności rozkładu [102]. W przypadku powstania wątpliwości, co do wyniku określonego testu, należy zastosować kilka testów.

Wśród testów normalności warto jeszcze wymienić „graficzny test normalności”. Polega on na naniesieniu punktów dystrybuanty empirycznej na wykres w którym tak zmodyfikowano współrzędne, żeby dystrybuanta rozkładu normalnego w przedziale  $\langle -3\sigma; +3\sigma \rangle$  była linią prostą. Jeśli punkty rozkładu empirycznego układają się wokół linii prostej, to wykres potwierdza hipotezę o rozkładzie normalnym. W pakiecie MATLAB odpowiedni wykres realizowany jest za pomocą funkcji `normplot`.

### 3.6. Transformacja funkcji gęstości w przekształceniach zmiennych losowych

W wielu przypadkach zmienna losowa  $x$  o gęstości  $f(x)$  jest przekształcana za pomocą znanej funkcji, powiedzmy  $y = \varphi(x)$ . Można wykazać (por. np. [9]), że jeśli w miejsce argumentu  $x$  podstawimy zmienną losową, a  $\varphi$  jest funkcją borelowską, to  $y = \varphi(x)$  jest również zmienną losową. Wyznacza się jej dystrybuantę,  $G(x)$  oraz gęstość  $g(y) = G'(x)$ .

Niech  $I_y = \langle -\infty; y \rangle$  oznacza lewą półprostą osi współrzędnej, a  $\varphi^{-1}(E)$  przeciwobraz zbioru  $E \in \mathbb{R}$ , tj.  $\varphi^{-1}(E) = \{x : y = \varphi(x) \in E\}$ . W szczególności  $\varphi^{-1}(I_y)$  jest przeciwobrazem półprostej  $\langle -\infty; y \rangle$ . Z definicji dystrybuanty wynika, że  $G(y) = P\{y \in I_y\}$ , a to jest równe prawdopodobieństwu, że zmienna losowa  $x$  przyjmie wartości ze zbioru  $\varphi^{-1}(I_y)$ . Stąd dystrybuanta  $G(y)$  zmiennej losowej  $y$  jest równa

$$G(y) = P\{y \in I_y\} = P\{x \in \varphi^{-1}(I_y)\},$$

więc

$$G(y) = \int_{\varphi^{-1}(I_y)} f(x) dx. \quad (3.44)$$

Wyrażenie (3.44) jest ogólną reprezentacją dystrybuanty zmiennej losowej  $y$ , jednak nie jest odpowiednie do bezpośredniego stosowania, gdyż argument  $y$  jest „ukryty” w obszarze całkowania. Dlatego dalszą analizę przeprowadza się dla takich funkcji, dla których można łatwo obliczyć całkę prawej strony równości (3.44).

**Ściśle rosnąca funkcja przekształcająca.** Dla funkcji ściśle rosnącej, która nie ma asymptot ( $\lim_{x \rightarrow -\infty} \varphi(x) = -\infty$  oraz  $\lim_{x \rightarrow \infty} \varphi(x) = \infty$ ) przeciwobraz  $\varphi^{-1}(I_y)$  zbioru  $I_y$  jest odcinkiem  $\langle -\infty; \varphi^{-1}(y) \rangle$ , więc na mocy (3.44)

$$G(y) = \int_{-\infty}^{\varphi^{-1}(y)} f(x) dx = F(\varphi^{-1}(y)) - F(-\infty) = F(\varphi^{-1}(y)),$$

gdzie  $F(x)$  jest dystrybuantą zmiennej losowej  $x$ .

Gęstość

$$g(y) = G'(y) = \frac{f(\varphi^{-1}(y))}{\varphi'(\varphi^{-1}(y))}, \quad (3.45)$$

gdzie wykorzystano następujący związek między pochodną funkcji i pochodną jej odwrotnej:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{\frac{dx}{dy}}.$$

**Ściśle malejąca funkcja przekształcająca.** Dla tej funkcji przeciwobraz  $\varphi^{-1}(I_y)$  zbioru  $I_y$  jest odcinkiem  $\langle \varphi^{-1}(y); \infty \rangle$ , więc

$$G(y) = \int_{\varphi^{-1}(y)}^{\infty} f(x)dx = F(-\infty) - F(\varphi^{-1}(y)) = 1 - F(\varphi^{-1}(y)),$$

stąd

$$g(y) = G'(y) = -\frac{f(\varphi^{-1}(y))}{\varphi'(\varphi^{-1}(y))}. \quad (3.46)$$

Po połączeniu wzoru (3.45) z (3.46) otrzymuje się wyrażenie określające gęstość dla ściśle monotonicznej, niemającej asymptot, funkcji przekształcającej  $\varphi(x)$

$$g(y) = \frac{f(\varphi^{-1}(y))}{|\varphi'(\varphi^{-1}(y))|}. \quad (3.47)$$

**Odcinkami monotoniczna funkcja przekształcająca.** Rozważono przypadek, gdy funkcja  $\varphi(x)$  nie jest monotoniczna, ale jej obszar określoności można podzielić na skończoną liczbę odcinków, w których funkcja jest monotoniczna. Wtedy wyrażenie (3.47) można zastosować do każdego odcinka osobno, sumując prawdopodobieństwa, więc

$$g(y) = \begin{cases} \sum_{i=1}^n \frac{f(\varphi^{-1}(y))}{|\varphi'(\varphi^{-1}(y))|}, & \text{gdy } \inf_x \varphi(x) < y < \sup_x \varphi(x), \\ 0, & \text{poza tym obszarem,} \end{cases} \quad (3.48)$$

gdzie dla każdego  $y$  sumowanie przeprowadzane jest po wszystkich rozwiązaniach  $x_1, \dots, x_n$ , równania  $\varphi(x) = y$ .

Przy wyprowadzaniu wzorów (3.45), (3.46) i (3.47) założono, dla ustalenia uwagi, że gdy  $|x| \rightarrow \infty$ , wtedy  $|\varphi(x)| \rightarrow \infty$ . We wzorze (3.48) uwzględniono również przypadek ogólniejszy, gdy funkcja  $\varphi(x)$  ma asymptoty.

Omówimy kilka przykładów.



**Przykład 3.5.** Załóżmy, że zmienna losowa  $x$  o rozkładzie jednostajnym na odcinku  $\langle -0,5; 0,5 \rangle$ ,

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } -0,5 < x < 0,5, \\ 0, & \text{poza tym przedziałem,} \end{cases}$$

jest przekształcana za pomocą funkcji  $y = \varphi(x) = ax + b$ . Równanie  $y = ax + b$  ma dla każdego  $y$  jedno rozwiązanie  $x = (y - b)/a$ , przy czym  $|y| \rightarrow \infty$ , gdy  $|x| \rightarrow \infty$ . Pochodna  $\varphi'(x) = a$ , natomiast funkcja  $f(\varphi^{-1}(y)) = 1$ , gdy  $y \in \langle -0,5|a| + b; 0,5|a| + b \rangle$ , stąd na mocy (3.48)

$$f(y) = \begin{cases} \frac{1}{|a|}, & \text{gdy } -0,5|a| + b < y < 0,5|a| + b, \\ 0, & \text{poza tym przedziałem.} \end{cases}$$

Wynikiem więc przekształcenia liniowego zmiennej losowej o rozkładzie jednostajnym jest również zmienna losowa o rozkładzie jednostajnym. Środek przedziału przemieścił się z 0 do  $b$ , jego szerokość zmieniła się z 1 na  $|a|$ , a wartość funkcji z 1 na  $1/|a|$ .  $\square$

**Przykład 3.6.** Załóżmy, że zmienna losowa  $x$  ma rozkład normalny standaryzowany,  $N(0, 1)$ ; gęstość  $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{1}{2}x^2)$ , a funkcja transformująca, tak jak w poprzednim przykładzie  $y = \varphi(x) = ax + b$ . Wykorzystując obliczone wartości we wzorze (3.47), otrzymano

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}|a|} e^{-\frac{1}{2}(\frac{y-b}{a})^2}.$$

Tak więc transformując rozkład normalny standaryzowany  $x \sim N(0, 1)$  funkcją  $y = ax + b$ , otrzymuje się również rozkład normalny,  $y \sim N(b, |a|)$ , o parametrach  $b$  oraz  $|a|$ .  $\square$

**Przykład 3.7.** Załóżmy, że celem wyznaczenia przewodności elektrycznej  $y$  izolatora zmierzono jego rezystancję  $x$  i otrzymano  $10T\Omega \pm 1T\Omega$ . Wynik ten zinterpretujemy jako zmienną losową o rozkładzie jednostajnym w przedziale  $10 \pm 1 = \langle 9; 11 \rangle^3$ , a więc  $f(x) = 0,5$  dla  $x \in \langle 9; 11 \rangle$  oraz  $f(x) = 0$  poza tym przedziałem. Wyznamy gęstość  $g(y)$  rozkładu przewodności. Funkcja przekształcająca rezystancję na przewodność,  $y = \varphi(x) = 1/x$ , jest funkcją monotoniczną i ma

<sup>3</sup> Dla uproszczenia zapisu pomijamy wymiar wielkości, tu  $T\Omega$ .

dla każdego  $y$  jedno rozwiązanie  $x = 1/y$ . Pochodna w punkcie  $y$  jest równa  $\varphi'(x) = -1/x^2 = -y^2$ , stąd na mocy (3.47)

$$g(y) = \frac{f(1/y)}{y^2} = \begin{cases} \frac{1}{2y^2}, & \text{gdym } \frac{1}{11} < y < \frac{1}{9}, \\ 0, & \text{poza tym przedziałem.} \end{cases}$$

Tak więc po przekształceniu zmiennej losowej o rozkładzie jednostajnym, otrzymano zmienną losową o rozkładzie typu hiperbolicznego. Wartość oczekiwana zmiennej  $x$  wynosi 10, natomiast wartość oczekiwana zmiennej losowej  $y$  jest równa

$$E[y] = \int_{1/11}^{1/9} y \frac{1}{2y^2} dy = 0,5 \log \frac{11}{9} \cong 0,100395, \quad (3.49)$$

więc  $E[y] \neq 1/E[x]$ .

Interesujące jest porównanie wartości oczekiwanej  $E[y] \cong 0,100395$  z wartością zmierzoną  $\underline{y} = 0,1010101\dots$ , którą otrzymano dla tych danych, stosując analizę przedziałową, wzór (2.13). Są to różne oszacowania, obie większe od wartości  $f(10) = 0,1$ , którą się otrzyma, stosując metodę różniczki zupełnej (wzór(2.22)). Różnice między wynikami pokazują, jak ważne jest właściwe sformułowanie zadania i dobór odpowiedniej analizy matematycznej.  $\square$

Z przykładu tego wynika następujący wniosek: jeśli wyznacza się w sposób pośredni wartość wielkości zmierzonej  $y$ , to przekształcenie wartości zaobserwowanej  $\underline{x}$  na wartość zaobserwowaną  $\underline{y}$  za pomocą wzoru  $\underline{y} = \varphi(\underline{x})$  (jak to się zwykle robi) obarczone jest błędem. Zwykle jest on pomijalnie mały, ale w przypadku gdy funkcja  $\varphi$  charakteryzuje się dużą nieliniowością w obszarze określonym przez błąd pomiaru  $x$ , wówczas może on być istotny i należy stosować przedstawioną tu dokładną metodę oceny wartości.

**Przykład 3.8.** Należy zbadać przekształcenie zmiennej losowej  $x \sim N(0,1)$  za pomocą funkcji  $y = \varphi(x) = x^2$ . Dla  $y < 0$  równanie  $y = x^2$  nie ma rozwiązań, natomiast dla dowolnego  $y > 0$  ma dwa rozwiązania  $x_1 = -\sqrt{y}$  oraz  $x_2 = +\sqrt{y}$ . Pochodna  $\varphi'(\varphi^{-1}(y)) = 2x$  i jest równa  $-2\sqrt{y}$  dla  $x = x_1$  oraz  $2\sqrt{y}$  dla  $x = x_2$ . Stosując wzór (3.48),  $n = 2$ , dla  $y > 0$ , otrzymano

$$g(y) = \frac{f(\varphi^{-1}(y))}{|\varphi'(\varphi^{-1}(y))|_{x=x_1}} + \frac{f(\varphi^{-1}(y))}{|\varphi'(\varphi^{-1}(y))|_{x=x_2}} = \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-0,5y}}{2\sqrt{y}} + \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-0,5y}}{2\sqrt{y}},$$

gdzie obie składowe sumy, dla rozwiązań  $x_1$  i  $x_2$ , są takie same, co wynika z tego, że  $\varphi(x) = x^2$  jest funkcją symetryczną względem osi  $y$ . Po dodaniu obu składowych

$$g(y) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi y}} e^{-0,5y}, & \text{gdy } y > 0, \\ 0, & \text{gdy } y \leq 0. \end{cases}$$

Zmienna losowa  $y$  ma więc rozkład  $\chi_1^2$  (z jednym stopniem swobody).  $\square$

### 3.7. Funkcje dwóch zmiennych losowych

Założmy, że dany jest wektor losowy  $[x, y]$  o łącznej gęstości  $f(x, y)$  oraz funkcja  $z = \varphi(x, y)$ . Wyznamy gęstość  $h(z)$  wektora losowego  $\varphi(x, y)$ .

Niech  $D_z = \{(x, y) : \varphi(x, y) < z\}$  będzie zbiorem punktów w przestrzeni  $\mathbb{R}^2$ , dla których  $\varphi(x, y) < z$ , wtedy dystrybuanta  $H(z)$  zmiennej losowej  $z$  określona jest wzorem

$$H(z) = \int \int_{D_z} f(x, y) dx dy. \quad (3.50)$$

Powyższą całkę oblicza się dla takich funkcji  $\varphi$ , dla których można przekształcić całkę podwójną i sprowadzić do całki iterowanej. Przedstawimy wzory dla sumy  $\varphi(x, y) = x + y$ , iloczynu  $\varphi(x, y) = xy$  i ilorazu zmiennych  $\varphi(x, y) = x/y$ .

Dokonując przekształceń funkcji jednej zmiennej oraz stosując powyższe operacje dwuargumentowe, można otrzymać większość praktycznych funkcji.

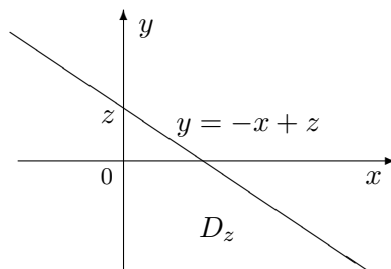
#### 3.7.1. Suma dwóch zmiennych losowych – splot rozkładów

Dla funkcji  $z = \varphi(x, y) = x + y$  zbiór  $D_z = \{(x, y) : z = x + y\}$  jest półpłaszczyzną leżącą poniżej prostej  $y = -x + z$ , rysunek 3.2. Pozwala to na sprowadzenie całki podwójnej we wzorze (3.50) do całki iterowanej. Całkowanie przeprowadza się najpierw względem zmiennej  $x$ , a potem względem  $y$ , wtedy

$$H(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{z-y} f(x, y) dx. \quad (3.51)$$

Dla niezależnych zmiennych losowych gęstość  $f(x, y) = f_x(x)f_y(y)$ , gdzie  $f_x(x)$  oraz  $f_y(y)$  są gęstościami, odpowiednio zmiennej losowej  $x$  oraz  $y$  wyrażenie (3.51) można zapisać

$$H(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_y(y) dy \int_{-\infty}^{z-y} f_x(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_y(y) [F_x(z-y) - F_x(-\infty)] dy,$$



Rys. 3.2. Prosta  $y = -x + z$  i obszar  $D_z$  leżący poniżej prostej

gdzie  $F_x(x) = \int f_x(x)$  jest dystrybuantą zmiennej losowej  $x$ . Uwzględniając równość  $F_x(-\infty) = 0$  i obliczając pochodną dystrybuanty  $H(z)$ , otrzymuje się

$$h(z) = H'(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_x(z-y)f_y(y)dy. \quad (3.52)$$

Po przeprowadzeniu operacji całkowania w odwrotnej kolejności, najpierw względem  $y$ , a potem względem  $x$ , otrzymuje się dualną postać gęstości

$$h(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_x(x)f_y(z-x)dx. \quad (3.53)$$

Tak więc funkcja  $h(z)$  jest splotem funkcji  $f_x(x)$  i  $f_y(y)$ , co zapisuje się krótko

$$h = f_x * f_y. \quad (3.54)$$

**Przykład 3.9.** Załóżmy, że obie zmienne losowe  $x$  i  $y$  mają rozkład jednostajny na odcinku  $\langle -1; 1 \rangle$ , więc ich gęstości, odpowiednio  $f_x(x)$  i  $f_y(y)$ , określone są wzorami

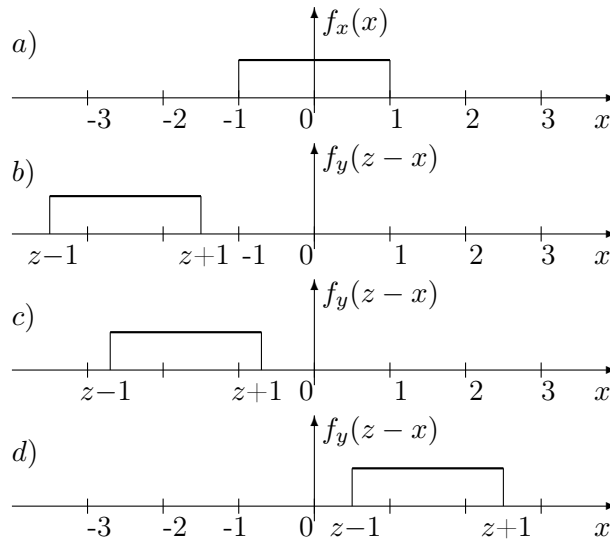
$$f_x(x) = f_y(y) = \begin{cases} 0,5 & \text{gdy } x, y \in \langle -1; 1 \rangle, \\ 0 & \text{gdy } x, y \notin \langle -1; 1 \rangle. \end{cases} \quad (3.55)$$

Skorzystano ze wzoru (3.53). We wzorze tym pierwsza funkcja podcałkowa,  $f_x(x)$ , jest (por. (3.55)) równa 0,5, gdy  $|x| \leq 1$ , natomiast druga funkcja,  $f_y(z-x)$ , jest równa 0,5, gdy  $|z-x| \leq 1$ ; lub co jest równoważne, gdy  $x \in \langle z-1; z+1 \rangle$ , (por. rys. 3.3a). Tak więc wartość zmiennej  $z$  określa położenie przedziału, w którym  $f_y(z-x)$  jest równa 0,5.

Całkowanie przeprowadzono dla różnych przypadków:

(1) Oba przedziały  $\langle -1; 1 \rangle$  i  $\langle z-1; z+1 \rangle$  są rozłączne, rysunek 3.3b). Następuje to, gdy  $z+1 < -1$  (prawy koniec  $z+1$  przedziału  $\langle z-1; z+1 \rangle$  jest

mniejszy niż lewy koniec przedziału  $\langle -1; 1 \rangle$ ), lub gdy  $z - 1 > 1$  (lewy koniec  $z - 1$  przedziału  $\langle z - 1; z + 1 \rangle$  jest większy niż prawy koniec przedziału  $\langle -1; 1 \rangle$ ). Oba przedziały są rozłączne, gdy  $|z| > 2$ . Wtedy dla każdego  $x$  przynajmniej jedna funkcja podcałkowa we wzorze (3.53) jest równa zero, więc  $h(z) = 0$ .



Rys. 3.3. Wykresy funkcji podcałkowych (3.53) z przykładu 3.9: a) gęstość  $f_x(x)$  oraz wykresy gęstości  $f_y(z-x)$ : b) dla  $z < -2$ , c) dla  $-2 < z < 0$ , d) dla  $0 < z < 2$

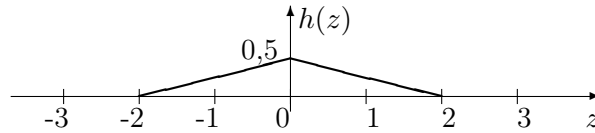
(2) Przedziały  $\langle z-1; z+1 \rangle$  oraz  $\langle -1; 1 \rangle$  mają część wspólną, przy czym lewy koniec przedziału  $\langle -1; 1 \rangle$  leży w przedziale  $\langle z-1; z+1 \rangle$  (rys. 3.3c), co występuje, gdy  $z-1 \leq -1$  oraz  $z+1 \geq -1$ . Wtedy obie funkcje podcałkowe są różne od zera w przedziale  $\langle -1; z+1 \rangle$  i całka (3.53) przyjmuje wartość

$$h(z) = \int_{-1}^{z+1} \frac{1}{2} \frac{1}{2} dx = \frac{z+2}{4}.$$

Jest to równanie reprezentujące linię prostą łączącą punkt  $(-2, 0)$  z punktem  $(0, 0,5)$ .

(3) Przedziały  $\langle z-1; z+1 \rangle$  oraz  $\langle -1; 1 \rangle$  mają część wspólną, przy czym prawy koniec przedziału  $\langle -1; 1 \rangle$  leży w przedziale  $\langle z-1; z+1 \rangle$  (rys. 3.3d), co występuje, gdy  $z-1 \leq 1$  oraz  $z+1 \geq 1$ . Wtedy obie funkcje podcałkowe są różne od zera w przedziale  $\langle z-1; 1 \rangle$  i całka (3.53) jest równa

$$h(z) = \int_{z-1}^1 \frac{1}{2} \frac{1}{2} dx = \frac{-2z+2}{4}.$$



Rys. 3.4. Rozkład trójkątny – spłot dwóch rozkładów jednostajnych

Reprezentuje ona linię prostą łączącą punkt  $(-2; 0)$  z punktem  $(0; 0,5)$ .

Po połączeniu wszystkich przypadków w jeden wzór otrzymuje się tak zwany rozkład Simpsona (trójkątny), rysunek 3.4, o gęstości

$$h(z) = \begin{cases} \frac{z+2}{4}, & \text{gdy } -2 \leq z \leq 0, \\ \frac{2-z}{4}, & \text{gdy } 0 \leq z \leq 2, \\ 0, & \text{gdy } |z| > 2. \end{cases} \quad (3.56)$$

Wniosek – „splatając” dwa rozkłady jednostajne, otrzymano rozkład trójkątny.  $\square$

**Przykład 3.10.** Należy wyznaczyć gęstość sumy trzech losowo niezależnych zmiennych losowych  $x_1, x_2, x_3$ , każda o rozkładzie jednostajnym w przedziale  $(-1, 1)$ . Sumując najpierw dwie zmienne losowe, np.  $x_1$  i  $x_2$ , otrzymamy rozkład trójkątny, a następnie dodając zmienną losową  $x_3$  o rozkładzie jednostajnym i powtarzając tę samą procedurę, otrzymamy

$$h(z) = \begin{cases} \frac{3-z^2}{8}, & \text{gdy } |z| < 1, \\ \frac{(3-|z|)^2}{16}, & \text{gdy } 1 \leq |z| \leq 3, \\ 0, & \text{gdy } |z| > 3. \end{cases} \quad (3.57)$$

Funkcja ta składa się z odcinków parabol i jest krzywą gładką – pochodne lewostronne i prawostronne w punktach łączących dwie sąsiednie parabole są sobie równe. Wykres jej ma kształt zbliżony do rozkładu normalnego. Suma  $n$  takich zmiennych losowych szybko zmierza do rozkładu normalnego, gdy  $n$  rośnie. Tę własność można wykorzystać do konstrukcji prostego generatora liczb losowych o rozkładzie normalnym.  $\square$

**Generator liczb o rozkładzie normalnym standaryzowanym.** Z twierdzeń granicznych wynika, że suma niezależnych zmiennych losowych  $x_1, \dots, x_n$

dąży do rozkładu normalnego. Ponadto z przykładu 3.10 wynika, że zbieżność ta jest bardzo szybka. Stąd pomysł, aby skonstruować na tej podstawie prosty generator liczb losowych o rozkładzie normalnym.

Punktem wyjścia do konstrukcji generatorów liczb losowych są generatory liczb pseudolosowych o rozkładzie jednostajnym na odcinku  $\langle 0; 1 \rangle$ . Wartość oczekiwana zmiennej losowej o rozkładzie jednostajnym na odcinku  $\langle 0; 1 \rangle$  jest równa  $E[x] = 0,5$ , natomiast wariancja  $D^2[x] = 1/12$ , stąd zmienna losowa

$$y = x_1 + \cdots + x_{12} - 6 \quad (3.58)$$

ma wartość oczekiwaną  $E[y] = 0$  i wariancję  $D^2[x] = 1$ . Jej gęstość składa się z odcinków wielomianów jedenastego stopnia i ma kształt bardzo zbliżony do standaryzowanego rozkładu normalnego. W miarę potrzeby można łatwo poprawić dokładność aproksymacji, sumując większą liczbę zmiennych losowych i standaryzując ją; na przykład dla  $n = 48$  zmienna losowa  $y = \frac{1}{4}(x_1 + \cdots + x_{48} - 24)$  ma w przybliżeniu rozkład  $N(0, 1)$ .

**Przykład 3.11.** Należy wyznaczyć gęstość sumy dwóch niezależnych zmiennych losowych  $x$  i  $y$  o standaryzowanych rozkładach normalnych; gęstości  $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}x^2}$  i  $f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}y^2}$ . Po podstawieniu tych wzorów do (3.53) otrzymamy

$$h(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2} e^{-\frac{1}{2}(z-x)^2} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}[x^2+(z-x)^2]} dx. \quad (3.59)$$

Po przekształceniu wyrażenia w nawiasie kwadratowym wykładnika ostatniego członu powyższego wzoru do postaci

$$x^2 + (z-x)^2 = (\sqrt{2}x - \frac{1}{\sqrt{2}}z)^2 + \frac{1}{2}z^2,$$

a następnie stosując w (3.59) podstawienia  $t = \sqrt{2}x - z/\sqrt{2}$  oraz  $dt = \sqrt{2} dx$  i po przekształceniach, otrzymuje się

$$h(z) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{1}{4}z^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}t^2} dt. \quad (3.60)$$

Całka  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}t^2} dt = \sqrt{2\pi}$ , co wynika stąd, że  $\int_{-\infty}^{\infty} f(t)dt = 1$ , gdzie  $f(t)$  jest gęstością zmiennej losowej  $N(0, 1)$ .

Uwzględniając ten wynik we wzorze (3.60), otrzymujemy gęstość rozkładu normalnego,  $N(0, \sqrt{2})$ , o zerowej wartości oczekiwanej i odchyleniu standardowym  $\sqrt{2}$ :

$$h(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot 2} e^{-\frac{1}{2}(z/\sqrt{2})^2}. \quad (3.61)$$

Ogólnie, jeśli zmienne losowe  $x \sim N(\mu_x, \sigma_x)$  i  $y \sim N(\mu_y, \sigma_y)$  są losowo niezależne, to ich suma  $z = x + y$  ma rozkład normalny  $z \sim N(\mu_z, \sigma_z)$ , w którym  $\mu_z = \mu_x + \mu_y$  oraz  $\sigma_z^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$ .  $\square$

Z podanego przykładu wynika ważny wniosek: *sumując niezależne zmienne losowe o rozkładzie normalnym, otrzymuje się zmienną losową o rozkładzie normalnym.*

### 3.7.2. Iloczyn i iloraz dwóch zmiennych losowych

Postępując podobnie jak w poprzednim punkcie, otrzymano ze wzoru (3.50) gęstość iloczynu  $z = xy$  niezależnych zmiennych losowych

$$h(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_x(x) f_y\left(\frac{z}{x}\right) \frac{1}{|x|} dx \quad (3.62)$$

oraz ilorazu  $z = x/y$

$$h(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_x(zy) f_y(y) |y| dy. \quad (3.63)$$

Wzory te pozwalają na wyznaczenie gęstości różnych zmiennych losowych, na przykład zmiennej losowej o rozkładzie Studenta o  $n$ -stopniach swobody, który jest określony wzorem

$$t_n = \frac{x_0}{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2}},$$

gdzie  $x_0, x_1, \dots, x_n$  są niezależnymi zmiennymi losowymi o zerowej wartości oczekiwanej i jednakowej wariancji  $\sigma^2$ . Rozkład Studenta nie zależy od wartości  $\sigma^2$  i można przyjąć, że  $x_i \sim N(0, 1)$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ . Gęstość rozkładu Studenta można otrzymać, stosując przedstawione dotychczas wzory na przekształcenia zmiennych losowych: kwadrat zmiennej losowej, suma zmiennych losowych, mnożenie zmiennej losowej przez liczbę, obliczanie pierwiastka i na końcu ilorazu dwóch zmiennych losowych.



### 3.8. Przekształcenia zmiennych losowych o rozkładzie normalnym

Z przeprowadzonej analizy wynika, że wyznaczanie gęstości przy przekształceniach jest złożonym zadaniem, nawet dla „prostych” transformacji. Pewnym wyjątkiem mogą być zmienne losowe o rozkładzie normalnym, które po przekształceniach liniowych (afinicznych) zachowują rozkład. Rozkład normalny jest określony przez parametry, więc w przekształceniach liniowych rozkładów normalnych wystarczy wyznaczyć parametry rozkładu, co jest znacznie prostszym zadaniem. Rozpatrzmy transformacje wektorów losowych normalnych.

#### 3.8.1. Transformacje liniowe wektorów losowych o rozkładzie normalnym

Niech  $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_n]^T$  będzie wektorem losowym o wektorze wartości oczekiwanych  $\mathcal{E}[\mathbf{X}] = [E[x_1], \dots, E[x_n]]^T$  oraz macierzy kowariancji  $\mathcal{D}[\mathbf{X}] = [\sigma_{ij}]$ , gdzie  $\sigma_{ij} = \text{cov}[x_i, x_j]$ . Rozważmy przekształcenie

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{b}, \quad (3.64)$$

gdzie  $\mathbf{A}$  jest  $m \times n$  wymiarową,  $m \leq n$  macierzą rzeczywistą, natomiast  $\mathbf{b} = [b_1, \dots, b_m]^T \in \mathbb{R}^m$ , wtedy [98]

$$\mathcal{E}[\mathbf{Y}] = \mathbf{A}\mathcal{E}[\mathbf{X}] + \mathbf{b}, \quad (3.65)$$

$$\mathcal{D}[\mathbf{Y}] = \mathbf{A}\mathcal{D}[\mathbf{X}]\mathbf{A}^T. \quad (3.66)$$

Wyrażenie (3.66) określa transformację macierzy kowariancji wektora losowego przy przekształceniu liniowym.

Szczególną rolę odgrywa przypadek wzoru (3.64) dla  $m = 1$ , wtedy  $\mathbf{Y} = y$  jest zmienną losową,  $\mathbf{A} = [a_1, \dots, a_n]$ , natomiast  $\mathbf{b} = a_0$  i w rozwiniętej postaci wzór ten można zapisać

$$y = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_nx_n. \quad (3.67)$$

Na mocy (3.65) i (3.66)

$$E[y] = a_0 + a_1E[x_1] + \dots + a_nE[x_n], \quad (3.68)$$

$$D^2[y] = \sigma_y^2 = \mathbf{A}\Sigma\mathbf{A}^T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ij}, \quad (3.69)$$

gdzie  $\sigma_{ij} = \text{cov}[x_i, x_j]$ .

Zależność (3.69) jest podstawą szacowania niepewności w pomiarach pośrednich [42].

Jeśli  $\mathbf{X} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ , to zmienna losowa  $y$  określona wzorem (3.67) ma również rozkład normalny (jako kombinacja liniowa zmiennych losowych normalnych), której wartość oczekiwana  $E[y] = a_0 + a_1\mu_1 + \dots + a_n\mu_n$ , natomiast wariancja jest określona wzorem (3.69).

**Przykład 3.12.** Należy wyznaczyć wartość oczekiwaną i wariancję średniej arytmetycznej pomiarów  $x_1, \dots, x_n$  wielkości  $a$ , jeśli  $E[x_i] = a$  oraz  $\text{cov}[x_i, x_j] = \sigma_{ij}$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ .

Macierz transformacji we wzorze (3.64) dla wartości średniej  $\bar{x}$  wynosi  $A = [1/n, 1/n, \dots, 1/n] = [1, 1, \dots, 1]/n$ , natomiast  $\mathbf{b} = 0$ . Wtedy na mocy wzoru (3.68) wartość oczekiwana wartości średniej jest w dalszym ciągu równa mierzonej wielkości,  $E[\bar{x}] = a$ , co otrzymuje się, podstawiając we wzorze (3.68)  $a_0 = 0$ ,  $a_i = 1/n$ ,  $i = 1, \dots, n$  oraz  $\mu_i = a$ . Więc średnia arytmetyczna niezależnie od korelacji grupuje się wokół mierzonej wartości  $a$  (jest „estymatorem nieobciążonym”). Należy tu zauważyć, że wprawdzie średnia arytmetyczna przy tych ogólnych warunkach jest nieobciążonym estymatorem parametru  $a$ , to nie jest ona estymatorem optymalnym – o „minimalnej wariancji”. Metody wyznaczania „optymalnych” estymatorów zostaną omówione w dalszych rozdziałach.

Na mocy (3.69) wariancja średniej arytmetycznej wynosi

$$D^2[\bar{x}] = \frac{1}{n^2} [1, 1, \dots, 1] \boldsymbol{\Sigma} [1, 1, \dots, 1]^T = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sigma_{ij}, \quad (3.70)$$

więc jest równa sumie wszystkich kowariancji podzielonej przez  $n^2$ .

Wzór (3.70) pozwala na wyznaczenie wariancji średniej arytmetycznej, gdy znane są wariancje  $\sigma_i^2$  i kowariancje  $\sigma_{ij}$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ , tzn. gdy znana jest macierz kowariancji  $\boldsymbol{\Sigma} = [\sigma_{ij}]$  ( $\sigma_{ij} = \text{cov}[x_i, x_j]$ ).

Jeśli obserwacje nie są skorelowane ( $\sigma_{ij} = 0$ , gdy  $i \neq j$  oraz  $\sigma_{ii} = \sigma_i^2$ ), to ze wzoru (3.70)

$$D^2[\bar{x}] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sigma_{ii} = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sigma_i^2. \quad (3.71)$$

Ponadto, jeśli wszystkie wariancje są jednakowe,  $\sigma_i^2 = \sigma^2$ , to

$$D^2[\bar{x}] = \frac{1}{n} \sigma^2, \quad (3.72)$$

a więc otrzymaliśmy znany wzór wariancji wartości średniej jako szczególny przypadek wyrażenia (3.69).  $\square$

Wykorzystamy teraz wzór (3.69) do przybliżonej oceny wariancji w przekształceniach nieliniowych.

### 3.8.2. Ocena wariancji w nieliniowych przekształceniach zmiennych losowych

Odstąpimy obecnie od założenia liniowości funkcji transformującej  $y = \varphi(\mathbf{x}) = \varphi(x_1, \dots, x_n)$ . Założymy jednak, że w obszarze, w którym skupiona jest „masa prawdopodobieństwa” wektora losowego  $\mathbf{X}$  funkcja  $\varphi(\mathbf{x})$  jest w przybliżeniu liniowa, więc można ją aproksymować modelem liniowym, rozwijając w szereg Taylora względem punktu wyznaczonego przez wektor wartości oczekiwanych  $\boldsymbol{\mu} = [\mu_1, \dots, \mu_n]^T$ , gdzie  $\mu_i = E[x_i]$ , i uwzględniając tylko pochodne pierwszego rzędu, stąd

$$y = \varphi(\mathbf{x}) \approx a_0 + \mathbf{A}^T (\mathbf{x}^T - \boldsymbol{\mu}^T),$$

gdzie

$$\mathbf{A} = \left[ \frac{\partial \varphi}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial \varphi}{\partial x_n} \right]^T.$$

Na mocy (3.65) wartość oczekiwana zmiennej losowej  $y$  wynosi

$$E[y] \approx \varphi(E[x_1], \dots, E[x_n]) = \varphi(\mu_1, \dots, \mu_n),$$

a jej wariancja, na mocy (3.66)

$$D^2[y] = \sigma_y^2 \approx \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \sigma_{ij}. \quad (3.73)$$

Kładąc  $\rho_{ij} = \sigma_{ij}/(\sigma_i \sigma_j)$  ( $\sigma_i = \sqrt{\sigma_{ii}}$ ), wzór (3.73) można przedstawić w równoważnej postaci

$$D^2[y] \approx \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \sigma_i \sigma_j \rho_{ij}. \quad (3.74)$$

Wzór ten umożliwia wyznaczenie wariancji  $D^2[y]$ , ale gdy znane są współczynniki korelacji  $\rho_{ij}$ , co w wielu praktycznych przypadkach stwarza znaczne trudności. Rozważono więc możliwość oszacowania wariancji dla słabszych założeń.

**Ocena wariancji, gdy obserwacje nie są skorelowane.** Załóżmy, że składowe wektora losowego  $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_n]^T$  nie są skorelowane, co oznacza, że

$$\rho_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{gdy } i = j, \\ 0, & \text{gdy } i \neq j. \end{cases}$$

Wtedy mieszane składniki sumy (3.74) są równe zeru i wzór ten upraszcza się

$$D^2[y] \approx \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \sigma_i \right)^2. \quad (3.75)$$

Wyrażenie to wymaga jedynie znajomości wariancji obserwacji i jest często stosowane do oceny niepewności typu A w pomiarach pośrednich rozumianej jako odchylenie standardowe  $\sigma_y$  [42] (lub *niepewności rozszerzonej*, którą jest wielokrotność odchylenia standardowego).

**Oszacowanie odchylenia standardowego, gdy obserwacje są skorelowane.** Jeśli obserwacje są skorelowane, ale współczynniki korelacji nie są znane, to nie można wyznaczyć odchylenia standardowego ze wzoru (3.74), jednakże można oszacować jego górną granicę. W tym celu zauważmy, że wyrażenie po prawej stronie równania (3.74) osiągnie maksimum, gdy wszystkie składowe sumy są dodatnie

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \rho_{ij} > 0$$

oraz  $|\rho_{ij}| = 1$  dla  $i, j = 1, \dots, n$ , wtedy

$$D^2[y] \leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right| \sigma_i \sigma_j = \left( \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right| \sigma_i \right)^2.$$

Po obliczeniu pierwiastków obu stron powyższego równania otrzymuje się następujące ograniczenie

$$D[y] = \sigma_y \leq \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right| \sigma_i \quad (3.76)$$

odchylenia standardowego zmiennej losowej  $y$ .

Wzór (3.76) wykazuje podobieństwo do wzoru (2.23) określającego błąd graniczny  $\Delta y$  w pomiarach pośrednich przy stosowaniu przedziałowej metody analizy wyników pomiarów. Błędem granicznym  $\Delta y, \Delta x_1, \dots, \Delta x_n$  odpowiadają w analizie probabilistycznej odchylenia standardowe, odpowiednio  $\sigma_y, \sigma_{x_1}, \dots, \sigma_{x_n}$  lub ich wielokrotności.

Prawdopodobieństwo, że nierówność (3.76) przejdzie w równość jest małe i oszacowanie  $\sigma_x$  za pomocą tego wzoru jest zwykle z dużym nadmiarem.

## Rozdział 4

# Podstawy estymacji punktowej

Estymacja parametrów modelu matematycznego stanowi podstawowy element procesu jego wyznaczenia. Wybór optymalnej metody estymacji zależy od wielu czynników, a zwłaszcza od własności wyników pomiarów. Przedstawiono kryteria oceny jakości estymatorów oraz metody ich wyznaczenia.

### 4.1. Podstawowe pojęcia i definicje

Przedmiotem estymacji punktowej jest wnioskowanie, na podstawie obserwacji, o wartościach nieznanymi parametrów rozkładów badanych zmiennych losowych (np. gęstości). W rozpatrywanych tu zagadnieniach są to zwykle parametry modeli matematycznych badanych obiektów. Ciąg wartości liczbowych  $x_1, \dots, x_n$  obserwowanych w eksperymencie ma charakter losowy i dlatego traktowany jest jako realizacja zmiennych losowych  $x = x(\omega)$ <sup>1</sup>. Ciąg ten nazywamy *próbą prostą*, jeśli obserwowane zmienne losowe są losowo niezależne i każda zmienna losowa ma ten sam rozkład.

W estymacji punktowej pojedynczego parametru należy wyznaczyć (na podstawie próby) taką liczbę, którą w świetle przyjętych kryteriów można uznać za jej „najlepsze przybliżenie”. Jeśli celem estymacji jest wyznaczenie ocen  $p$  parametrów  $a_1, \dots, a_p$ , to grupujemy je w wektor  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$ . W dalszej części, dla ustalenia uwagi, będziemy często rozważali estymację pojedynczego parametru, by następnie uogólnić analizę na wektor parametrów. Przejdziemy obecnie do omówienia pojęcia estymatora.

---

<sup>1</sup> Przypomnijmy, że zarówno zmienne losowe, jak i ich realizacje oznaczamy tymi samymi symbolami,  $x, y, \dots$ , a bezpośrednio z towarzyszącego tekstu wynika aktualne znaczenie symbolu. Jednak w przypadku gdyby mogło to prowadzić do niejednoznaczności, zmienną losową oznaczamy pełnym symbolem,  $x(\omega), y(\omega), \dots$ , a jej realizację  $x, y, \dots$

Każdą funkcję  $T(x_1, \dots, x_n)$  próby losowej  $x_1, \dots, x_n$  nazywamy *statystyką*. Statystyka jako funkcja (borelowska<sup>2</sup>) zmiennych losowych jest też zmienną losową mającą rozkład zależny od funkcji  $T$  i rozkładów zmiennych losowych  $x_1, \dots, x_n$ .

**Definicja 4.1.** Każdą statystykę  $T_n(x_1, \dots, x_n)$ , której wartość można przyjąć za ocenę nieznanego parametru  $a$  nazywamy *estymatorem*, a otrzymaną na podstawie realizacji zmiennych losowych wartość liczbową nazywamy *oceną* lub *estymatą*.

Dla uproszczenia zapisu będziemy pomijali argumenty, oznaczając estymator krótko symbolem  $T_n$  lub  $\hat{a}$ . Gęstość obserwacji  $x_i$  powinna zależeć od parametru  $a$ , gdyż w przeciwnej sytuacji w obserwacjach nie byłoby informacji o wartości parametru.

**Przykład 4.1.** Niech  $x_1, \dots, x_n$  będzie próbą prostą, zmiennych losowych o rozkładzie normalnym,  $x_i \sim N(\mu, \sigma)$ , wtedy średnia arytmetyczna  $\bar{x}$  jest estymatorem parametru  $\mu$ .  $\square$

Z definicji 4.1 wynika, że estymatorem może być dowolna funkcja zmiennych losowych, której wartość można przyjąć za ocenę wyznaczanego parametru. Jeśli znana jest pewna liczba estymatorów tego samego parametru, to powstaje problem wyboru najlepszego z nich. Stąd pojawia się potrzeba określenia kryteriów pozwalających na wybór „optymalnego estymatora” oraz metod wyznaczania estymatorów.

## 4.2. Własności estymatorów

W teorii estymacji rozważa się trzy podstawowe własności estymatorów *nieobciążoność*, *zgodność* i *efektywność*. Przedstawimy kolejno te pojęcia.

### 4.2.1. Nieobciążoność estymatorów

Pożądaną własnością estymatora jest, aby jego realizacje grupowały się wokół estymowanej wartości  $a$ . Własność tę określa się za pomocą terminu nieobciążoność estymatora i definiuje następująco.

**Definicja 4.2.** Statystykę  $T_n$  nazywamy *nieobciążonym estymatorem* parametru  $a$ , jeśli dla każdego  $n$

$$E[T_n] = a. \quad (4.1)$$

<sup>2</sup> Nie każda funkcja zmiennych losowych jest zmienną losową, funkcja ta musi być funkcją borelowską, por. np. [9].

Jeśli  $T_n$  nie jest estymatorem nieobciążonym, to nazywany jest *estymatorem obciążonym*, a różnicę

$$E[T_n] - a$$

obciążeniem lub błędem systematycznym estymatora. Jeśli  $T_n \neq a$  oraz

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = a,$$

to  $T_n$  nazywamy *asymptotycznie nieobciążonym* estymatorem parametru  $a$ . Z definicji 4.2 wynika, że realizacje nieobciążonego estymatora parametru  $a$  grupują się wokół wartości tego parametru.

**Przykład 4.2.** Niech  $x_1, \dots, x_n$  będzie obserwowaną w eksperymencie próbą prostą, przy czym  $E[x_i] = a$ ,  $i = 1, \dots, n$ , wtedy statystyka  $\bar{x}$  jest nieobciążonym estymatorem parametru  $a$ , gdyż

$$E[\bar{x}] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E[x_i] = a.$$

□

**Przykład 4.3.** Niech  $x_1, \dots, x_n$  będzie próbą prostą, dla której  $E[x_i] = a$  oraz  $D^2[x_i] = \sigma^2$ ,  $i = 1, \dots, n$ , przy czym parametry  $a$  oraz  $\sigma$  nie są znane. Do estymacji  $\sigma^2$  stosowana jest *wariancja próby*

$$s^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2.$$

Zbadamy obciążenie tego estymatora. W tym celu zauważmy, że

$$D^2[\bar{x}] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n D^2[x_i] = \frac{\sigma^2}{n},$$

ponadto

$$s^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 2x_i\bar{x} + \bar{x}^2) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \bar{x}^2,$$

a stąd

$$E[s^2] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E[x_i^2] - E[\bar{x}^2]. \quad (4.2)$$

Wartość oczekiwana  $E[x_i^2]$  pierwszej składowej wzoru (4.2) wynosi

$$E[x_i^2] = E[(x_i - a)^2 + 2ax_i - a^2] = E[(x_i - a)^2] + a^2 = \sigma^2 + a^2, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.3)$$

natomiast drugiej

$$E[\bar{x}^2] = E[(\bar{x} - a)^2 + 2a\bar{x} - a^2] = E[(\bar{x} - a)^2] + a^2 = \frac{\sigma^2}{n} + a^2. \quad (4.4)$$

Po podstawieniu tych wyników do (4.2) otrzymamy

$$E[s^2] = \frac{n-1}{n}\sigma^2, \quad (4.5)$$

co oznacza, że  $s^2$  jest obciążonym estymatorem parametru  $\sigma^2$  (ale jest asymptotycznie nieobciążonym estymatorem). Mnożąc estymator  $s^2$  przez współczynnik  $n/(n-1)$ , likwiduje się obciążenie i otrzymuje nieobciążony estymator wariancji

$$s_1^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2. \quad (4.6)$$

Estymator ten jest najczęściej używaną oceną wariancji  $\sigma^2$ . □

#### 4.2.2. Zgodność estymatorów

Pożądane jest, aby wraz ze wzrostem liczności próby  $n$  wzrastała „dokładność” estymatora. Własność ta określona jest terminem „zgodność estymatora”.

**Definicja 4.3.** Statystykę  $T_n$  nazywamy *zgodnym estymatorem* parametru  $a$ , jeśli

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\{|T_n - a| < \varepsilon\} = 1 \quad (4.7)$$

dla dowolnie małej dodatniej wartości  $\varepsilon$ .

Zgodność estymatora powoduje, że opłaca się powiększać liczbę obserwacji, gdyż wtedy maleje prawdopodobieństwo, że odchylenie oceny od wartości prawdziwej przekroczy zadaną wartość. Zgodność nabiera znaczenia przy dużych próbach, natomiast przy małych próbach ważniejsze znaczenia ma obciążenie estymatora.

Następujące twierdzenie pozwala zbadać zgodność estymatorów.

**Twierdzenie 4.1.** Jeżeli  $T_n$  jest nieobciążonym lub asymptotycznie nieobciążonym estymatorem parametru  $a$  oraz

$$\lim_{n \rightarrow \infty} D^2[T_n] = 0,$$

to  $T_n$  jest zgodnym estymatorem.

Dowód tego twierdzenia wynika bezpośrednio z nierówności Czebyszewa [86].



### 4.2.3. Efektywność estymatorów

Pożądaną własnością estymatora jest, aby jego realizacje miały możliwie mały rozrzut wokół wyznaczonej wartości. Tę własność określa się za pomocą pojęcia efektywności, która opiera się na wariancji jako mierze rozrzutu.

**Definicja 4.4.** Niech  $\{T_n^i\}$ ,  $i = 1, \dots, n$  będzie zbiorem nieobciążonych estymatorów parametru  $a$ . Estymator  $T_n^k$ , o najmniejszej wariancji w tym zbiorze, tj. spełniający warunek

$$D^2[T_n^k] \leq D^2[T_n^i], \text{ dla } i = 1, \dots, n$$

nazywamy *najefektywniejszym estymatorem w zbiorze  $\{T_n^i\}$* . Estymator, który ma najmniejszą wariancję w zbiorze wszystkich możliwych estymatorów nieobciążonych nazywamy *estymatorem najefektywniejszym*.

**Przykład 4.4.** Założono, że dokonano dwóch, losowo niezależnych pomiarów parametru  $a$  i otrzymano wyniki  $x_1$  oraz  $x_2$ , o własnościach:  $E[x_1] = E[x_2] = a$ ,  $D^2[x_1] = D^2[x_2] = \sigma^2$  (wartość  $\sigma^2$  nie jest znana),  $\text{cov}[x_1, x_2] = 0$ . Jako klasę estymatorów parametru  $a$  rozpatrzmy kombinacje liniowe obserwacji

$$T_2 = \alpha x_1 + \beta x_2.$$

Nakładając warunek nieobciążoności  $E[T_2] = \alpha E[x_1] + \beta E[x_2] = \alpha a + \beta a = a$ , otrzymamy równanie  $\alpha + \beta = 1$ . Po podstawieniu w powyższym wzorze  $\beta = 1 - \alpha$  otrzymuje się następującą klasę estymatorów nieobciążonych parametru  $a$

$$T_2 = \alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2.$$

Dla  $\alpha = 1$  otrzymano  $T_2 = T_2^1 = x_1$ , więc pierwsza obserwacja jest estymatorem tej klasy; analogicznie dla  $\alpha = 0$ ,  $T_2 = T_2^2 = x_2$  – druga obserwacja jest również estymatorem.

Wariancja estymatora  $T_2$  wynosi

$$D^2[T_2] = \alpha^2 D^2[x_1] + (1 - \alpha)^2 D^2[x_2] = [\alpha^2 + (1 - \alpha)^2] \sigma^2,$$

więc jej wartość zależy od współczynnika  $\alpha$  i osiąga minimum dla  $\alpha = 1/2$ . Stąd najefektywniejszym estymatorem parametru  $a$ , w klasie kombinacji liniowych, jest statystyka

$$T_2 = \frac{1}{2}(x_1 + x_2) = \bar{x}.$$

**Wniosek.** Dla podanych założeń najefektywniejszym estymatorem w klasie kombinacji liniowych jest średnia arytmetyczna. Jej wariancja  $D^2[T_2] = \frac{1}{4}(D^2[x_1] + D^2[x_2]) = \frac{1}{2}\sigma^2$ , natomiast wariancja estymatora  $T_2^1 = x_1$  wynosi  $D^2[T_2^1] = \sigma^2$  i jest większa od wariancji wartości średniej – optymalnego estymatora. Analogiczna uwaga dotyczy estymatora  $T_2^2$ .  $\square$

**Przykład 4.5.** Wyznaczyć estymator parametru  $a$  w warunkach z przykładu 4.4 z jedną zmianą, odstępujemy od założenia, że wariancje obserwacji są takie same i zastępujemy je założeniem, że wariancja obserwacji  $x_1$  pozostaje jak w przykładzie  $D^2[x_1] = \sigma^2$ , natomiast wariancja drugiej obserwacji  $x_2$  wynosi  $D^2[x_2] = 2\sigma^2$ . Pozostawiamy czytelnikowi sprawdzenie, że najefektywniejszym estymatorem nieobciążonym w klasie liniowych kombinacji, dla tych założeń, jest statystyka

$$T_2 = \frac{2}{3}x_1 + \frac{1}{3}x_2.$$

$\square$

Z analizy i przykładów wynika, że relacje między wariancjami poszczególnych obserwacji w istotny sposób wpływają na „postać” najefektywniejszego estymatora. Analogiczna uwaga dotyczy również korelacji między obserwacjami, które powinny być uwzględniane podczas wyznaczania estymatora.

W poprzednich przykładach wyznaczano estymatory najefektywniejsze w klasie kombinacji liniowych. Rodzi się pytanie, do jakiego stopnia można minimalizować wariancję estymatorów nieobciążonych? Czy jeśli, na przykład, rozszerzymy, w przykładzie 4.4 klasę estymatorów, to możemy otrzymać efektywniejszy estymator niż średnia arytmetyczna? Odpowiedzi na to pytanie udzielili niezależnie od siebie Rao i Cramér [70]. Znana jest ona pod nazwą *nierówności Rao–Craméra*, którą przedstawimy dla jednego parametru.

Niech  $x_1, \dots, x_n$  będzie ciągiem zaobserwowanych wartości  $n$  niezależnych zmiennych losowych o tej samej gęstości  $f(x_i; a)$  zależnej od parametru  $a$ . Wyrażenie

$$L = L(x_1, \dots, x_n; a) = f_1(x_1; a) f_2(x_2; a) \cdots f_n(x_n; a) \quad (4.8)$$

nazywamy *funkcją wiarygodności*, a

$$I_n = E \left[ -\frac{\partial^2 \ln L}{\partial a^2} \right] = nE \left[ -\frac{\partial^2 \ln f(x_1; a)}{\partial a^2} \right] \quad (4.9)$$

*ilością informacji w sensie Fishera* lub krótko *informacją Fishera*. Rao i Cramér niezależnie wykazali (por. [70]), że wariancja dowolnego estymatora  $T_n$  parametru

tru  $a$ , wyznaczonego na podstawie próby prostej  $x_1, \dots, x_n$  spełnia następujący warunek

$$D^2[T_n] \geq \frac{1}{I_n} = \frac{1}{nE \left[ -\frac{\partial^2 \ln f(x_1; a)}{\partial a^2} \right]}, \quad (4.10)$$

nazywany *nierównością Rao–Craméra*. Tak więc wariancja dowolnego estymatora jest nie mniejsza niż odwrotność informacji Fishera. Uogólnieniem informacji Fishera, dla jednego parametru, jest dla wektora parametrów *macierz informacji Fishera*.

**Przykład 4.6.** Załóżmy, że dokonano  $n$  pomiarów parametru  $a$  i otrzymano próbę prostą  $x_1, \dots, x_n$ , przy czym każda obserwacja  $x_i$  ma rozkład normalny,  $x_i \sim N(a, \sigma)$  – gęstość  $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x-a}{\sigma} \right)^2 \right]$ .

Wyznamy liczbę informacji w sensie Fishera tej próby względem parametru  $a$ . W tym celu obliczymy

$$\ln f(x_i; a) = \ln(\sigma\sqrt{2\pi}) - \frac{1}{2} \left( \frac{x_i - a}{\sigma} \right)^2, \quad i = 1, \dots, n,$$

oraz

$$\frac{\partial^2 \ln f(x_i; a)}{\partial a^2} = -\frac{1}{\sigma^2}$$

i po podstawieniu do (4.9) liczba informacji  $I_n = n/\sigma^2$ , a stąd i (4.10) wynika dolne ograniczenie wariancji dowolnego estymatora  $T_n$  parametru  $a$

$$D^2[T_n] \geq \frac{\sigma^2}{n}. \quad (4.11)$$

Zgodnie z nierównością Rao–Craméra nie istnieje nieobciążony estymator parametru  $a$  z tej próby o mniejszej wariancji niż  $\sigma^2/n$ . Zwykle do oceny parametru  $a$  stosowana jest średnia arytmetyczna  $\bar{x}$  z obserwacji, której wariancja wynosi

$$D^2[\bar{x}] = D^2 \left[ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n D^2[x_i] = \frac{1}{n^2} n\sigma^2 = \frac{\sigma^2}{n},$$

więc dla estymatora  $T_n = \bar{x}$  nierówność Rao–Craméra przechodzi w równość. Stąd ważny wniosek, że wartość średnia z próby prostej o rozkładzie normalnym  $N(x, \sigma)$  jest najefektywniejszym estymatorem w klasie wszystkich możliwych estymatorów.  $\square$

Warunek nieobciążoności może jednak eliminować estymatory obciążone w małym stopniu o być może istotnie mniejszej wariancji. Bywa również, że estymatory nieobciążone, jak również estymatory o minimalnej wariancji nie istnieją.

Rozpatrzono statystykę  $s_1^2 = \frac{1}{n-1} \sum (x_i - \bar{x})^2$  opartą na obserwacjach  $x_1, \dots, x_n$  pochodzących z rozkładu normalnego  $x_i \sim N(\mu, \sigma^2)$ . Wykazano (por. przykład 4.3), że  $E[s_1^2] = \sigma^2$ , czyli  $s_1^2$  jest nieobciążonym estymatorem parametru  $\sigma^2$ . Ponieważ [70]

$$\frac{(n-1)s_1^2}{\sigma^2} \sim \chi_{n-1}^2,$$

więc

$$D^2\left[\frac{(n-1)s_1^2}{\sigma^2}\right] = D^2[\chi_{n-1}^2] = 2(n-1),$$

a stąd

$$D^2[s_1^2] = \frac{2\sigma^4}{n-1}.$$

Rozpatrzmy estymatory  $\gamma s_1^2$  parametru  $\sigma^2$ , które powstają przez pomnożenie  $s_1^2$  przez liczbę  $\gamma$ . Dla  $\gamma \neq 1$  statystyka  $\gamma s_1^2$  jest obciążonym estymatorem. Wyznamy wartość  $\gamma$ , która minimalizuje wariancję względem  $\sigma^2$ , więc

$$E[\gamma s_1^2 - \sigma^2]^2 = E[\gamma(s_1^2 - \sigma^2) - \sigma^2(1 - \gamma)]^2 = \left\{ \frac{2\gamma^2}{n-1} + (1 - \gamma)^2 \right\} \sigma^4.$$

Wyrażenie  $E[\gamma s_1^2 - \sigma^2]^2$  osiąga minimum dla  $\gamma_m = (n-1)/(n+1)$  i ma wartość  $2\sigma^4/(n+1)$ , która jest mniejsza od wariancji  $D^2[s_1^2] = 2\sigma^4/(n-1)$ . Po podstawieniu  $\gamma_m$  do  $\gamma s_1^2$  otrzymuje się obciążony estymator

$$s_2^2 = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

wariancji  $\sigma^2$ , który charakteryzuje się mniejszą wariancją niż nieobciążony estymator  $s_1^2$  – jest estymatorem najefektywniejszym. Powstaje więc pytanie, który z nich należy wybrać? Odpowiedź zależy od celu estymacji i nie może być rozstrzygnięta jedynie na gruncie analizy statystycznej.

Przedstawiona tu analiza wskazuje, że w wielu przypadkach nie ma jednoznacznego rozwiązania i eksperymentator musi sam dokonać wyboru kryterium.

### 4.3. Metody wyznaczania estymatorów

Dotychczas omówiono kryteria oceny estymatorów. Przedstawiono trzy metody wyznaczania estymatorów: historycznie najstarszą metodę momentów, metodę największej wiarygodności (NW) oraz metodę najmniejszych kwadratów (NK). Dwie ostatnie z wymienionych znajdują najszerze zastosowania.

#### 4.3.1. Metoda momentów

Należy wyznaczyć oceny parametrów  $a_1, \dots, a_p$  analizowanej zmiennej losowej  $x$ . Metoda momentów polega na porównaniu momentów – najczęściej kolejnych – rozkładu zmiennej losowej  $x$  (będących funkcjami nieznanymi parametrów) z momentami próby. Otrzymuje się, w ten sposób, układ równań, którego rozwiązanie wyznacza estymatory. Opiszemy ten proces bardziej szczegółowo.

Niech

$$h_r(a_1, \dots, a_p), \quad (4.12)$$

będzie momentem zwykłym rzędu  $r$ , natomiast

$$m_r = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^r \quad (4.13)$$

momentem próby  $x_1, \dots, x_n$  rzędu  $r$ . Jeśli  $p$  momentów zwykłych rzędów  $r_1, \dots, r_p$  porówna się z momentami zmiennej losowej odpowiednich rzędów, to otrzyma się układ  $p$  równań

$$\begin{aligned} m_{r_1} &= h_{r_1}(a_1, \dots, a_p), \\ m_{r_2} &= h_{r_2}(a_1, \dots, a_p), \\ &\vdots \\ m_{r_p} &= h_{r_p}(a_1, \dots, a_p), \end{aligned} \quad (4.14)$$

przy czym rzędy momentów dobierane są tak, aby istniało jednoznaczne rozwiązanie układu równań. Poszczególne rozwiązania względem parametrów  $a_j$  wyznaczają estymatory. Przedstawimy przykład z jednym parametrem.

**Przykład 4.7.** Założono, że znane jest  $n$  realizacji  $x_1, \dots, x_n$  zmiennych losowych  $N(a, \sigma^2)$ . Należy wyznaczyć estymator parametru  $a$  metodą momentów. Moment rozkładu pierwszego rzędu wynosi  $h_1(a) = a$ , natomiast moment próby  $m_1 = \bar{x}$ . Układ równań (4.14) sprowadza się do jednego równania  $m_1 = h_1(a)$ . Po podstawieniu  $m_1 = \bar{x}$  otrzymuje się równanie  $\bar{x} = a$ , którego rozwiązaniem  $\hat{a} = \bar{x}$  jest estymatorem parametru  $a$ .  $\square$

Zaletą metody momentów jest prostota, natomiast podstawową wadą, jak wykazał Fisher (por. [86]), jest mniejsza efektywność w porównaniu z estymatorami największej wiarygodności.

#### 4.3.2. Metoda największej wiarygodności

Metoda największej wiarygodności, ze względu na cenne własności i jasną interpretację, jest najważniejszą, obok metody najmniejszych kwadratów, metodą estymacji. Jej podstawy teoretyczne opracował Fisher.

Niech

$$L = f_1(x_1; a_1, \dots, a_p) f_2(x_2; a_1, \dots, a_p) \cdots f_n(x_n; a_1, \dots, a_p) \quad (4.15)$$

będzie funkcją wiarygodności próby  $x_1, \dots, x_n$ , gdzie  $f(x_i; a_1, \dots, a_p)$  są gęstościami obserwacji. Wartość funkcji  $L$  nazywana jest *wiarygodnością*. Zasadniczą ideą metody NW jest, aby za ocenę parametrów przyjąć takie ich wartości, dla których wiarygodność jest największa – funkcja  $L$  przyjmuje maksimum. Ponieważ  $\ln L$  osiąga wartość największą dla tych samych wartości parametrów, jak funkcja  $L$ , więc estymatory zwykle wyznacza się, obliczając maksimum  $\ln L$  – co jest prostsze.

Maksimum funkcji  $L$  spełnia układ równań

$$\frac{\partial \ln L}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, \dots, p, \quad (4.16)$$

którego rozwiązanie wyznacza estymatory.

**Przykład 4.8.** Na podstawie  $n$  elementowej próby prostej pobranej z populacji o rozkładzie wykładniczym

$$f(x; a) = ae^{-ax}, \quad \text{gdzie } a > 0 \text{ i } x > 0,$$

wyznamy estymator NW parametru  $a$ . Funkcja wiarygodności

$$L = \prod_{i=1}^n f(x_i; a) = a^n e^{-a \sum x_i},$$

więc

$$\ln L = n \ln a - a \sum_{i=1}^n x_i.$$

Przyrównując pochodną tej funkcji do zera

$$\frac{\partial \ln L}{\partial a} = \frac{n}{a} - \sum_{i=1}^n x_i$$

i rozwiązując równanie względem parametru  $a$ , otrzymuje się estymator

$$\hat{a} = \frac{n}{\sum_{i=1}^n x_i} = \frac{1}{\bar{x}}.$$

□

**Przykład 4.9.** Na podstawie próby prostej  $x_1, \dots, x_n$  pobranej z populacji o rozkładzie normalnym  $N(\mu, \sigma^2)$  wyznacza się, metodą NW, estymatory parametrów  $\mu$  i  $\sigma^2$  tego rozkładu.

Funkcja wiarygodności

$$L = \prod_{i=1}^n f(x_i; a) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sigma^n} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^2} \right],$$

stąd

$$\ln L = -\frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2.$$

Obliczając pochodną względem  $\mu$ , a następnie  $\sigma^2$ , otrzymuje się układ równań

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \mu} = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu) = 0, \quad \frac{\partial \ln L}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2} \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 = 0.$$

Po rozwiązaniu pierwszego równania względem  $\mu$  otrzymuje się estymator

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \bar{x},$$

natomiast po rozwiązaniu drugiego równania względem  $\sigma^2$  i podstawieniu  $\bar{x}$  w miejsce  $\mu$  otrzymuje się estymator

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

Wykazano więc, że średnia arytmetyczna  $\bar{x}$  i wariancja próby  $s^2$  są estymatorami największej wiarygodności parametrów rozkładu normalnego. □

**Przykład 4.10.** Na podstawie próby prostej  $x_1, \dots, x_n$  pobranej z populacji o rozkładzie geometrycznym

$$f(x; a) = (1 - a)^{x-1}a, \quad \text{gdzie } x = 1, 2, \dots, \quad \text{oraz } 0 < a < 1,$$

wyznamy estymator parametru  $a$  metodą największej wiarygodności. Funkcja  $f(x; a)$  określa prawdopodobieństwo pojawienia się wyróżnionego zdarzenia losowego po raz pierwszy w  $x$ -tym doświadczeniu, jeśli kolejne doświadczenia są losowo niezależne, a prawdopodobieństwo zdarzenia w każdym doświadczeniu jest takie samo i wynosi  $a \in (0, 1)$ .

Jako przykład sytuacji praktycznej opisanej przez rozkład geometryczny może służyć rzut kostką do gry. Prawdopodobieństwo pojawienia się określonej liczby, powiedzmy szóstki, w każdym pojedynczym rzucie równe jest  $a$ , stąd prawdopodobieństwo, że „szóstka” pojawi się po raz pierwszy w kolejnych rzutach ( $x = 1, 2, \dots$ ) wynosi  $f(1; a) = a$ ,  $f(2; a) = (1 - a)a$ ,  $f(3; a) = (1 - a)^2a$  itd.

Funkcja wiarygodności

$$L = a^n \prod_{i=1}^n (1 - a)^{x_i - 1},$$

stąd

$$\ln L = n \ln a + \sum_{i=1}^n (x_i - 1) \ln(1 - a).$$

Po obliczeniu pochodnej i przyrównaniu jej do zera otrzymano

$$\frac{\partial \ln L}{\partial a} = \frac{n}{a} - \frac{1}{1 - a} \sum_{i=1}^n (x_i - 1) = 0,$$

więc

$$\hat{a} = \frac{1}{\bar{x}} \tag{4.17}$$

jest estymatorem parametru  $a$ . Wynik ten może się wydać zaskakujący, gdyż jesteśmy przyzwyczajeni do estymatora równego średniej arytmetycznej, a tu otrzymaliśmy jej odwrotność.  $\square$

Jeśli chcemy wyznaczyć prawdopodobieństwo wyrzucenia „szóstki” w pojedynczym rzucie, to można zrobić to w dwojaki sposób. Rzucac kostką  $n$  razy i ocenić prawdopodobieństwo zdarzenia jako stosunek liczby wyrzuconych szóstek



do liczby wszystkich rzutów lub w alternatywny sposób, jak w omawianym tu przykładzie, wykonywać serie rzutów i notować, w którym rzucie,  $x_i$ , danej serii po raz pierwszy pojawi się szóstka i oszacować  $a$  ze wzoru (4.17). Porównanie własności obu metod pozostawiamy czytelnikowi.

### 4.3.3. Metoda najmniejszych kwadratów

Metoda najmniejszych kwadratów ma długą historię. Przyjmuje się, że jej koncepcja została opracowana przez Gaussa [86]. Niech  $x_1, \dots, x_n$  będzie zbiorem zaobserwowanych wartości  $n$ -elementowej próby prostej, której rozkład zależy od nieznanymi parametrów  $a_1, \dots, a_p$ . Wartości tych parametrów należy oszacować na podstawie zaobserwowanych wartości. Niech  $g(a_1, \dots, a_p)$  będzie znaną funkcją parametrów  $a_j$ , która określa wartość obserwacji. Postać funkcji  $g$  zależy od specyfiki analizowanego problemu. *Metoda najmniejszych kwadratów* (NK) polega na takim wyborze ocen parametrów  $\hat{a}_j$ , które minimalizują wyrażenie

$$Q = \min_{a_j} \sum_{i=1}^n [x_i - g(a_1, \dots, a_p)]^2. \quad (4.18)$$

Jeśli  $g$  jest liniową funkcją parametrów  $a_j$ , to oceny parametrów  $\hat{a}_j$  są liniowymi funkcjami obserwacji  $x_1, \dots, x_n$ . Ponadto, co wykażemy później, dla liniowych zależności i rozkładów normalnych oceny otrzymane metodą NK pokrywają się z ocenami otrzymanymi metodą NW.

Poprzednio wykazaliśmy (por. (3.22)), że jeśli próba prosta  $x_1, \dots, x_n$  pochodzi ze zmiennych losowych o tej samej wartości oczekiwanej równej  $a$  oraz tej samej wariancji, to  $\min_a \sum_{i=1}^n (x_i - a)^2$  osiągnęte jest dla  $\hat{a} = \bar{x}$ , a to oznacza, że estymatorem wartości oczekiwanej jest średnia arytmetyczna próby. Ta własność wartości średniej mogła być podstawą sformułowania kryterium najmniejszych kwadratów przez Gaussa.

Metoda NK jest podstawowym narzędziem analizy regresji i będzie przedmiotem szczegółowej analizy w dalszych rozdziałach.



## Rozdział 5

# Wstępna analiza bezpośrednich obserwacji

Szczególnie częstym przedmiotem analizy danych są bezpośrednie pomiary ustalonej wielkości. Zwykle zakładamy, że pomiary takie są próbą prostą, co oznacza, że każda z obserwowanych zmiennych losowych ma ten sam rozkład i są one losowo niezależne. Założenia te mogą nie być spełnione, co może skutkować w stosowaniu nieodpowiednich narzędzi analizy danych i prowadzić do błędnych wniosków. Dlatego wstępnym krokiem analizy pomiarów bezpośrednich powinno być sprawdzenie założeń wyjściowych. Rozpatrzmy tu dwa rodzaje takich badań; pierwsze dotyczy występowania nietypowych obserwacji odbiegających wartością od innych – w statystyce matematycznej nazywane są one „odstającymi obserwacjami” lub w metrologii pomiarami obciążonymi „błędami grubymi”; natomiast drugie, polega na sprawdzeniu czy kolejne obserwacje zachowują stałość wartości oczekiwanej – co określane jest terminem „braku trendu systematycznego”. Oba rodzaje badań powinny być przeprowadzane rutynowo.

Założono dodatkowo, że obserwowane zmienne losowe reprezentowane są przez próbę prostą  $y_1, \dots, y_n$  o rozkładzie normalnym  $y_i \sim N(\mu, \sigma)$ . Założenia takie są często spełnione, a dla zmiennych o rozkładzie normalnym opracowano odpowiednie tablice statystyczne, które ułatwiają stosowanie testów statystycznych.

### 5.1. Odstające obserwacje

W statystyce matematycznej *odstającymi obserwacjami* (ang. *outliers*) nazywane są obserwacje, których wartości znacznie odbiegają od pozostałych danych. Może to być spowodowane przez czynniki losowe, gdyż w dużej próbie mogą występować obserwacje znacznie różniące się od wartości średniej. W szczególności, jeśli obserwowana zmienna losowa ma rozkład normalny  $N(\mu, \sigma^2)$ , to obserwacje grupują się wokół wartości oczekiwanej  $\mu$ , ale zgodnie z teorią, zmienna losowa normalna może przyjąć dowolną wartość liczbową. Jednak duże odstępstwo od wartości średniej może być spowodowane pojawieniem się szczególnych okoliczno-

ści, które naruszają mechanizm powstawania rozrzutów losowych. Na przykład, może ją spowodować nagły spadek, „zapad”, napięcia sieci energetycznej zasilającej system pomiarowy. Odstające obserwacje, których znaczne odstępstwo od średniej arytmetycznej spowodowane jest szczególnymi okolicznościami należy usunąć z danych, o ile nie ma możliwości ich skorygowania. Przykładem odstającej obserwacji, którą można skorygować jest obserwacja zakłócona „czeskim błędem” – błąd zapisu spowodowany przestawieniem kolejności cyfr. Jednak przed decyzją usunięcia odstającej obserwacji, należy rozważyć, czy to odstępstwo nie jest zgodne z założonym rozkładem, a jeśli tak, to należy ją pozostawić. Innym sposobem zmniejszenia wpływu odstających obserwacji na wyniki analizy jest stosowanie statystyk odpornych.

Opracowano kilka testów pozwalających na wykrycie odstających obserwacji, z których najważniejsze to test Grubbsa, kryterium Chauveneta oraz kryterium Peircesa [40, 41, 105]. Poniżej przedstawiono najczęściej stosowany w praktyce test Grubbsa.

Niech  $y_{\max}$  będzie maksymalną obserwacją w próbie prostej  $y_1, \dots, y_n$ . Grubbs zaproponował następującą statystykę

$$\nu = \frac{y_{\max} - \bar{y}}{s}, \quad (5.1)$$

która jest względnym odchyleniem maksymalnej obserwacji  $y_{\max}$  od wartości średniej  $\bar{y}$  odniesionym do oceny,  $s$ , odchylenia standardowego obserwacji,  $s^2 = \frac{1}{n} \sum (y_i - \bar{y})^2$ . Jeśli niezależne obserwacje  $y_i$  mają rozkład normalny,  $y_i \sim N(\mu, \sigma^2)$ , to rozkład ilorazu  $\nu$  nie zależy od parametrów  $\mu$  i  $\sigma$ , lecz jedynie od liczby obserwacji  $n$  [70]. Kwantyle  $\nu_n(\alpha)$  (liczby spełniające warunek  $P\{\nu > \nu_n(\alpha)\} = \alpha$ ) rozkładu zmiennej losowej  $\nu$  zostały obliczone dla poziomów istotności  $\alpha = 0,10; 0,05; 0,025; 0,01$  (por. [40, 105]). Rozstrzygnięcie czy odstającą obserwację  $y_{\max}$  należy odrzucić, przeprowadza się na podstawie relacji między wartością ilorazu  $\nu$  a kwantylem  $\nu_n(\alpha)$ . Jeśli  $\nu > \nu_n(\alpha)$ , to usuwamy obserwację  $y_{\max}$  z danych.

Test Grubbsa można przeprowadzić według następujących punktów:

- założyć poziom istotności  $\alpha$  (zwykle  $\alpha = 0,05$ );
- dla liczby obserwacji  $n$  i przyjętego poziomu istotności  $\alpha$  odczytać z tablic (np. [70]) kwantyl  $\nu_n(\alpha)$ ;
- obliczyć wartość ilorazu  $\nu$  ze wzoru (5.1);
- porównać wartość  $\nu$  z wartością  $\nu_n(\alpha)$  i podjąć decyzję: jeśli  $\nu > \nu_n(\alpha)$ , to obserwację  $y_{\max}$  należy odrzucić jako obciążoną zbyt dużym błędem, a jeśli  $\nu \leq \nu_n(\alpha)$ , to „nie ma podstaw do odrzucenia obserwacji”  $y_{\max}$ .

Jeżeli najmniejsza obserwacja  $y_{\min}$  odstaje znacznie od wartości średniej  $\bar{y}$ , to można przystosować powyższą procedurę testowania maksymalnej wartości  $y_{\max}$  do testowania minimalnej wartości  $y_{\min}$ , zastępując ciąg  $y_1, \dots, y_n$  ciągiem  $z_1, \dots, z_n$ , zdefiniowanym wyrażeniem  $z_i = -y_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Wtedy  $-y_{\min} = z_{\max}$ ,  $\bar{z} = -\bar{y}$ , natomiast  $s$  nie ulega zmianie. Można teraz zastosować powyższe postępowanie do ciągu obserwacji  $z_i$ , badając iloraz

$$\nu = \frac{z_{\max} - \bar{z}}{s} = \frac{-y_{\min} - (-\bar{y})}{s} = \frac{\bar{y} - y_{\min}}{s}.$$

Przedstawimy przebieg testu na przykładzie<sup>1</sup>.

**Przykład 5.1.** Dokonano  $n = 20$  pomiarów położenia kreski na skali i odczytano wartości: 3,68; 5,08; 2,81; 4,43; 3,11; 2,95; 4,65; 3,43; 4,76; 6,35; 3,27; 3,26; 2,75; 3,78; 4,08; 2,48; 4,15; 4,49; 4,51; 4,84. Dziewiętnaście pomiarów zachowuje się regularnie – mieści się w przedziale  $\langle 2,48; 5,08 \rangle$ , natomiast pomiar dziesiąty  $y_{10} = y_{\max} = 6,35$  ma znacznie większą wartość. Zakładając, że pomiary te są realizacjami zmiennej losowej o rozkładzie normalnym i nieznanymi parametrach  $\mu$  oraz  $\sigma$  należy zbadać, czy pomiar ten,  $y_{\max}$ , należy odrzucić jako obarczony zbyt dużym błędem. Założono najpierw poziom istotności  $\alpha = 0,05$  i dla tego  $\alpha$  i liczby obserwacji  $n = 20$  odczytuje się z tablic Grubbsa kwantyl  $\nu_n(\alpha) = \nu_n(0,05) = 2,623$ . Następnie oblicza się kolejno: wartość średnią

$$\bar{y} = \frac{1}{20} \sum_{i=1}^{20} y_i = 3,942,$$

ocenę odchylenia standardowego

$$s = \sqrt{\frac{1}{20} \sum_{i=1}^{20} (y_i - \bar{y})^2} = 0,943,$$

oraz ze wzoru (5.1) iloraz

$$\nu = \frac{6,35 - 3,943}{0,943} = 2,552.$$

Ponieważ  $\nu = 2,552 < \nu_{20}(0,05) = 2,623$ , więc obserwację  $y_{10} = y_{\max}$  należy pozostawić.  $\square$

<sup>1</sup> Na podstawie [70], s. 140.

Dla większych prób niż  $n = 30$  można również stosować uproszczone postępowanie oparte na regule „trzech sigm”, zgodnie z którą wystarczy sprawdzić, dla  $y_{\max}$  czy spełniona jest nierówność

$$\frac{y_{\max} - \bar{y}}{s} < 3$$

lub dla  $y_{\min}$  nierówność

$$\frac{\bar{y} - y_{\min}}{s} < 3.$$

Jeśli tak, to „nie ma podstaw do odrzucenia odstającej obserwacji” ( $y_{\max}$  lub  $y_{\min}$ ), w przeciwnym wypadku odrzucamy tę obserwację. Procedura ta odpowiada, w przybliżeniu, procedurze Grubbsa dla poziomu istotności  $\alpha = 0,05$ .

**Uwaga.** W teście Grubbsa zakłada się, że obserwacje pochodzą z populacji o rozkładzie normalnym. Dlatego przed jego zastosowaniem wskazane jest przeprowadzenie testu normalności, szczególnie w przypadku gdy wartość  $\nu$  statystyki Grubbsa jest zbliżona do wartości krytycznej  $\nu_n(\alpha)$ .

## 5.2. Badanie trendu systematycznego

Zwykle pomiary wykonywane są w kolejnych momentach, więc należy się liczyć z występowaniem mechanizmów, które spowodują, że założenie o stałości wartości oczekiwanej,  $E[y_i] = a$ ,  $i = 1, \dots, n$ , (jak również wariancji) nie jest spełnione. Może to być spowodowane różnymi czynnikami: zmianą temperatury pracy zarówno badanego obiektu, jak i elementów systemu pomiarowego, starzeniem się elementów, indukowaniem się niepożądanego napięcia sieci energetycznej na przewodach pomiarowych łączących źródło napięcia stałego z systemem pomiarowym próbującym sygnał itd. Efektem tych zmian jest pojawienie się *trendu systematycznego* w danych. Pomiary, w których występuje trend systematyczny, wymagają innych narzędzi analizy danych niż pomiary stacjonarne. Należy więc zbadać, czy w obserwowanych wartościach występuje trend statystyczny. Można do tego celu wykorzystać analizę regresji, o której będzie mowa w dalszej części monografii. Prowadzi to jednak do rozbudowanej, często pracochłonnej analizy, dlatego wydaje się użyteczne zastosowanie prostego testu nazywanego kryterium Abbego [70], który umożliwia szybkie i skuteczne zbadanie hipotezy o braku trendu systematycznego w bezpośrednich obserwacjach. Poniżej przedstawiono sposób przeprowadzania tego testu.

Kryterium Abbego opiera się na porównaniu dwóch nieobciążonych estymatorów wariancji  $\sigma^2$  próby prostej  $y_1, \dots, y_n$ , a mianowicie wariancji próby

$$s_1^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (5.2)$$

oraz statystyki

$$q^2 = \frac{1}{2(n-1)} \sum_{i=1}^{n-1} (y_{i+1} - y_i)^2. \quad (5.3)$$

Pierwszy z nich,  $s_1^2$ , jest powszechnie stosowanym, nieobciążonym estymatorem wariancji, a jego wariancja wynosi  $D^2[s_1^2] = 2\sigma^4/(n-1)$ , natomiast drugi,  $q^2$ , jest również nieobciążonym estymatorem wariancji pojedynczej obserwacji,  $E[q^2] = \sigma^2$ , [98]. Estymator  $q^2$  nie jest stosowany do oceny wariancji, gdyż jest mniej efektywny niż estymator  $s_1^2$ . Można wykazać (por. [98]), że

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{D^2[s_1^2]}{D^2[q^2]} = \frac{2}{3},$$

a więc względna efektywność estymatora  $q^2$  względem  $s_1^2$  jest równa  $2/3$ .

Oba estymatory  $s_1^2$  i  $q^2$  różnią się jeszcze jedną ważną własnością. Dla danego zbioru obserwacji  $y_1, \dots, y_n$  estymator  $s_1^2$  nie jest zależny od kolejności ich występowania, natomiast estymator  $q^2$  jest zależny. Zależność ta objawi się tym, że jeśli uporządkuje się obserwacje według wzrastających wartości, to wartość estymatora  $q^2$  zmniejszy się – zmaleją różnice  $y_{i+1} - y_i$ , podczas gdy wartość  $s_1^2$  pozostanie taka sama. Małe różnice między sąsiednimi obserwacjami wskazują na występowanie trendu systematycznego. Można więc testować występowanie trendu, badając relacje między wartościami oczekiwanymi obu estymatorów. W tym celu tworzy się iloraz

$$r = \frac{q^2}{s_1^2}. \quad (5.4)$$

Jeśli brak jest trendu systematycznego w obserwacjach, to wartości ilorazu  $r$  będą bliskie jedności,  $E[r] = 1$ , a jeśli występuje trend systematyczny, to będzie on powodował zmniejszanie się wartości ilorazu  $r$ . Wartości kwantyli  $r_n(\alpha)$ ,  $P\{r < r_n(\alpha)\} = \alpha$  statystyki  $r$  dla  $\alpha = 0,001; 0,01; 0,05$  znajdują się w tablicach statystycznych, por. [70]. Kwantyle  $r_n(\alpha)$  dla  $\alpha = 0,05$  wynoszą

$n$	5	10	20	30	40	50	60
$r_n(0,05)$	0,410	0,531	0,650	0,709	0,746	0,772	0,791

Własności statystyki  $r$  zilustrujemy prostym przykładem.

**Przykład 5.2.** Niech 0; 4; 1; 3; 2 będzie ciągiem obserwacji otrzymanych w pewnym doświadczeniu. Liczba obserwacji  $n = 5$ ; średnia arytmetyczna  $\bar{y} = 2$ , wariancja próby  $s_1^2 = 5/2$ , natomiast  $q^2 = 13/4$ , statystyka  $r = q^2/s_1^2 = 1,5$  przyjmuje wartość większą od 1, co wskazuje na brak trendu systematycznego. Jeśli jednak te same obserwacje pojawiłyby się w innej, wzrastającej kolejności 0; 1; 2; 3; 4 świadczącej ewidentnie o występowaniu trendu systematycznego, to wariancja próby nie ulega zmianie,  $s_1^2 = 5/2$ , natomiast statystyka  $q^2$  maleje do wartości  $q^2 = 1/5$ , a stąd  $r = 1/5$ . Kwantyl podany w tabeli dla  $n = 5$  wynosi  $r_5(0,05) = 0,410$ , więc  $r < r_5(0,05)$ , co wskazuje na występowanie trendu systematycznego w obserwacjach.  $\square$

Omówimy teraz przybliżoną metodę wyznaczania wartości krytycznych  $r_n(\alpha)$  bazując na tym, że statystyka  $r$  ma asymptotycznie rozkład normalny. Ponadto Hald [43] wykazał, że jeśli obserwacje mają rozkład normalny,  $y_i \sim N(\mu, \sigma^2)$ , i są losowo niezależne, to statystyka  $r$  spełnia warunki

$$\begin{aligned} E[r] &= 1, \\ D^2[r] &\approx \frac{1}{n+1} \left(1 - \frac{1}{n-1}\right). \end{aligned}$$

Dla  $n > 30$  można przyjąć, że statystyka  $r$  ma, w przybliżeniu, rozkład normalny o parametrach 1 oraz  $1/(n+1)$ ,  $r \sim N(1, 1/(n+1))$ . Normalizując zmienną losową  $r$ , poprzez odjęcie wartości oczekiwanej oraz podzielenie przez odchylenie standardowe, otrzymuje się zmienną losową  $u$  o rozkładzie normalnym standaryzowanym

$$u = (r - 1)\sqrt{n+1} \sim N(0, 1). \quad (5.5)$$

Wyrażenie (5.5) umożliwia wyznaczenie (w przybliżeniu) kwantyli  $r_n(\alpha)$  statystyki  $r$  wykorzystując ogólnie dostępne tablice rozkładu normalnego. W tym celu dla zadanego poziomu istotności  $\alpha$  odczytuje się z tablic rozkładu normalnego  $u \sim N(0, 1)$  kwantyl  $u(\alpha)$ . Przekształcając równanie (5.5), otrzymuje się następujący wzór

$$r_n(\alpha) \approx 1 + \frac{u(\alpha)}{\sqrt{n+1}} \quad (5.6)$$

pozwalający wyznaczyć kwantyl  $r_n(\alpha)$  statystyki  $r$ . Na przykład dla  $\alpha = 0,05$  z tablic rozkładu normalnego otrzymamy  $u(\alpha) \approx -1,65$ . Stąd, na podstawie wzo-



ru (5.6), dla  $n = 32$  (przykładowa liczba obserwacji), kwantyl  $r_{32}(0, 05)$  statystyki  $r$  wynosi

$$r_{32}(0, 05) \approx 1 + \frac{-1,65}{\sqrt{33}} = 0,713.$$

Natomiast kwantyl  $r_{32}(0, 05)$  odczytany, bezpośrednio z tablic ilorazu  $r$  jest równy  $r_{32}(0, 05) = 0,718$ , więc obie liczby różnią się nieznacznie – z rozkładu normalnego otrzymaliśmy odpowiednio dokładne przybliżenie kwantyla  $r_n(\alpha)$ .

**Uwaga.** Zwykle tablice rozkładu normalnego podawane są jedynie dla liczb dodatnich. Wtedy należy odczytać kwantyl  $u(1 - \alpha)$  i wykorzystać własność symetrii rozkładu normalnego, stąd  $u(\alpha) = -u(1 - \alpha)$ .

**Przykład 5.3.<sup>2</sup>** W fabryce produkowane są elementy, których podstawowym parametrem jest wytrzymałość na ściskanie. Ważna jest kontrola stałości warunków procesu technologicznego – czy w miarę upływu czasu produkowane elementy nie zmieniają wytrzymałości. W celu sprawdzenia hipotezy o stałości wytrzymałości na ściskanie produkowanych elementów, każdego dnia jeden element poddawany jest badaniom kontrolnym. Badania prowadzono przez kolejne 45 dni, otrzymując  $n = 45$  pomiarów. Na ich podstawie obliczono

$$s_1^2 = 848,5; \quad q^2 = 485,6 \quad \text{oraz} \quad r = \frac{q^2}{s_1^2} = \frac{485,6}{848,5} = 0,573.$$

Założono poziom istotności  $\alpha = 0,05$  i dla  $n = 45$ , odczytano z tablic kwantyl  $r_{45}(0, 05) = 0,760$ . Iloraz  $r = 0,573$  jest mniejszy niż kwantyl  $r_{45}(0, 05)$ , więc należy odrzucić na poziomie istotności  $\alpha = 0,05$  hipotezę o braku trendu systematycznego wytrzymałości produkowanych elementów.  $\square$

---

<sup>2</sup> Na podstawie [70], s. 307.



## Rozdział 6

# Modele regresji

W rozdziale 1 dokonano ogólnego przeglądu rodzaju i własności modeli matematycznych znajdujących zastosowanie w różnych dziedzinach nauki. Przedmiotem zainteresowania są przede wszystkim modele statystyczne oraz metody wyznaczania i weryfikacji tych modeli. Podstawowym narzędziem analizy modeli statystycznych jest analiza regresji. Zajmuje się ona badaniami relacji między mierzalnymi wielkościami związanymi z określonym zjawiskiem, gdy mają one charakter stochastyczny. Ze względu na bardzo dużą różnorodność sytuacji praktycznych opracowano różne rodzaje regresji. W rachunku prawdopodobieństwa definiuje się dwa „klasyczne” modele regresji: linię (funkcję) regresji I rodzaju oraz prostą regresji II rodzaju. W modelach klasycznych zakłada się, że wszystkie analizowane zmienne mają charakter losowy oraz że relacja między nimi jest zdefiniowana przez łączną gęstość. Zastosowanie klasycznych modeli regresji jest jednak ograniczone przede wszystkim tym, że wymaga znajomości gęstości rozkładu, co rzadko występuje w sytuacjach praktycznych. Ponadto w modelach matematycznych rzeczywistych obiektów stosowane są zarówno zmienne losowe, jak i deterministyczne. Do analizy takich modeli opracowany został opisowy model regresji, nazywany krótko regresją liniową, w przypadku zależności liniowych oraz regresją nieliniową w przypadku zależności nieliniowych. Opisowy model regresji jest bardziej uniwersalny niż modele klasyczne i może być stosowany w przypadku znacznie słabszych założeń wyjściowych, dlatego będzie przedmiotem szczegółowej analizy w następnych rozdziałach. Rozpocznijmy od krótkiego przedstawienia klasycznych modeli regresji, a następnie zdefiniujemy modele regresji liniowej i nieliniowej.

### 6.1. Linie regresji I rodzaju

Linie regresji I rodzaju zdefiniujemy dla wektora losowego  $[x, y]^T$  złożonego z dwóch zmiennych losowych  $x$  oraz  $y$  o gęstości  $f(x, y)$ . Przypadek dwóch zmien-

nych pozwala na omówienie podstawowych problemów, a uogólnienie rozważań na większą liczbę zmiennych jest naturalne i nie przedstawia trudności.

Zbiór punktów w przestrzeni  $\mathbb{R}^2$  o współrzędnych  $(x, y)$  spełniających równanie

$$x = m_1(y) = E[x|y] \quad (6.1)$$

nazywamy *linią regresji I rodzaju zmiennej losowej  $x$  względem zmiennej losowej  $y$* , gdzie  $E[x|y]$  jest warunkową wartością oczekiwaną zmiennej losowej  $x$  względem zmiennej losowej  $y$  ( $E[x|y]$  jest uproszczonym zapisem  $E[x|y(\omega) = y]$ ). Linia  $m_1(y)$  określa więc średnie wartości zmiennej losowej  $x$  dla założonych wartości zmiennej losowej  $y$ . Jeśli  $f(x, y)$  jest gęstością wektora losowego  $[x, y]^T$ , to zależność  $m_1(y)$  można wyznaczyć ze wzoru [65]

$$x = m_1(y) = E[x|y] = \frac{1}{f_2(y)} \int_{-\infty}^{\infty} x f(x, y) dx, \quad (6.2)$$

gdzie

$$f_2(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dx.$$

Analogicznie *linią regresji I rodzaju zmiennej losowej  $y$  względem zmiennej losowej  $x$*  nazywamy funkcję

$$y = m_2(x) = E[y|x]. \quad (6.3)$$

Funkcja  $m_2(x)$  określa średnie wartości zmiennej losowej  $y$  dla założonych wartości  $x$ . Jeśli  $f(x, y)$  jest gęstością wektora losowego  $[x, y]^T$ , to [65]

$$y = m_2(x) = E[y|x] = \frac{1}{f_1(x)} \int_{-\infty}^{\infty} y f(x, y) dy, \quad (6.4)$$

gdzie

$$f_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dy.$$

Można wykazać [29], że jeśli para  $[x, y]^T$  tworzy wektor losowy o łącznym dwuwymiarowym rozkładzie normalnym i gęstości

$$f(x) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left[ \frac{(x-\mu_x)^2}{\sigma_x^2} - 2\rho \frac{(x-\mu_x)(y-\mu_y)}{\sigma_x\sigma_y} + \frac{(y-\mu_y)^2}{\sigma_y^2} \right] \right\}, \quad (6.5)$$

gdzie  $\mu_x$  i  $\mu_y$  są wartościami oczekiwanymi,  $\sigma_x$  i  $\sigma_y$  odchyleniami standardowymi zmiennych losowych, odpowiednio  $x$  i  $y$ , natomiast  $\rho$  jest współczynnikiem korelacji tych zmiennych losowych, to linia regresji,  $m_1(x)$ , I rodzaju zmiennej losowej  $x$  względem  $y$  jest linią prostą określoną wzorem

$$\frac{x - \mu_x}{\sigma_x} = \rho \frac{y - \mu_y}{\sigma_y}, \quad (6.6)$$

natomiast linia regresji zmiennej losowej  $y$  względem  $x$  jest również linią prostą określoną wzorem

$$\frac{y - \mu_y}{\sigma_y} = \rho \frac{x - \mu_x}{\sigma_x}. \quad (6.7)$$

Obie funkcje  $m_1(y)$  i  $m_2(x)$  reprezentowane są przez dwie różne linie proste. W szczególności w reprezentacji kierunkowej  $y = ax + b$  linii prostej tangens kąta nachylenia funkcji  $m_1(y)$  wynosi

$$a = \frac{1}{\rho} \frac{\sigma_y}{\sigma_x},$$

natomiast funkcji  $m_2(x)$

$$a = \rho \frac{\sigma_y}{\sigma_x}.$$

Kąty nachylenia prostych różnią się, a różnica zależy od wartości współczynnika korelacji  $\rho$ . Im mniejsza jest jego wartość bezwzględna, tym większa jest wzajemna różnica między nachyleniami prostych. Kąt między prostymi dąży do  $90^\circ$ , gdy  $|\rho| \rightarrow 0$  i dąży do zera, gdy  $|\rho| \rightarrow 1$  (proste zbliżają się do siebie).

## 6.2. Proste regresji II rodzaju

Proste regresji II rodzaju stanowią aproksymację średniej tendencji linią prostą. Definiuje się je następująco:

*Prostą regresji II rodzaju zmiennej losowej  $y$  względem zmiennej losowej  $x$  nazywa się linię prostą o równaniu  $y = ax + b$ , której współczynniki są tak dobrane, aby średnie odchylenie kwadratowe zmiennej losowej  $y$  względem zmiennej losowej  $ax + b$  było minimalne, to znaczy*

$$E[y - (ax + b)]^2 = \min. \quad (6.8)$$

Można wykazać [29], że prosta regresji II rodzaju zmiennej losowej  $x$  względem  $y$  określona jest wzorem (6.6), natomiast regresja II rodzaju zmiennej losowej  $y$  względem  $x$  wzorem (6.7).

Jak wynika z podanych rozważań, wyznaczenie linii regresji zarówno I, jaki i II rodzaju wymaga znajomości gęstości wektora losowego, co rzadko zdarza się w praktyce. Ponadto w tych modelach przyjmuje się, że obie zmienne (w ogólnym przypadku wszystkie) mają charakter losowy. Te wymagania powodują, że modele klasyczne mają małe zastosowanie w praktyce, gdzie zwykle występują zarówno zmienne deterministyczne, jak i losowe, a funkcja gęstości nie jest znana. Dysponujemy natomiast skończoną liczbą obserwowanych wartości zmiennych. Do takich sytuacji lepiej dostosowany jest tak zwany „opisowy model regresji”, który będzie przedmiotem rozważań w następnych rozdziałach.

### 6.3. Opisowy model regresji

W opisowym modelu jedna ze zmiennych, nazywana *odpowiedzią* lub zmienną zależną, jest przedmiotem szczególnego zainteresowania i oznaczana symbolem  $y$ . Pozostałe zmienne  $x_1, \dots, x_k$  nazywane są zwykle *zmiennymi objaśniającymi* (ang. *explanatory variables*), *regresorami* lub niezależnymi zmiennymi (nazwa zmienne niezależne w niektórych zastosowaniach może być myląca). Zakłada się, że relację między odpowiedzią  $y$  a zmiennymi objaśniającymi  $x_1, \dots, x_k$  można zapisać wzorem

$$y = f(x_1, \dots, x_k) + \varepsilon, \quad (6.9)$$

gdzie zmienne objaśniające  $x_1, \dots, x_k$  są zmiennymi deterministycznymi,  $f$  jest funkcją  $\mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ , natomiast odpowiedź  $y$  oraz *składnik losowy*  $\varepsilon$  są zmiennymi losowymi.

Zakłada się, że wartość oczekiwana składnika losowego  $\varepsilon$  jest równa zeru,  $E[\varepsilon] = 0$ , lub co jest równoważne, że

$$E[y] = f(x_1, \dots, x_k).$$

W wielu praktycznych sytuacjach model matematyczny  $f$  badanego obiektu jest znany, z wyjątkiem pewnej liczby współczynników  $a_1, \dots, a_p$  nazywanych *parametrami strukturalnymi modelu* lub krótko *parametrami modelu*. Model regresji (6.9) można teraz zapisać w postaci parametrycznej

$$y = f(x_1, \dots, x_k; a_1, \dots, a_p) + \varepsilon. \quad (6.10)$$

Na przykład, model matematyczny opisujący zmiany napięcia  $y$  na kondensatorze elektrycznym o pojemności  $c$ , rozładowującym się w czasie  $x$  przez rezystor o wartości  $r$ , można zapisać równaniem

$$y = f(x; \alpha, \tau) = \alpha e^{-x/\tau} + \varepsilon,$$

gdzie  $\alpha$  oraz  $\tau$  są parametrami modelu, natomiast  $\varepsilon$  czynnikiem losowym. Zwykle podstawowym celem eksperymentu jest wyznaczenie modelu  $f$  badanego obiektu oraz zakresu zmian zmiennych objaśniających, w którym model poprawnie opisuje badany obiekt. W wielu matematycznych modelach parametry mają interpretację fizyczną, a głównym celem badań może być ocena ich wartości. W omawianym przykładzie  $\alpha$  oznacza napięcie początkowe, natomiast  $\tau$  stałą czasową obiektu ( $\tau = rc$ ), a głównym celem badań może być na przykład ocena stałej czasowej  $\tau$ .

W podanym przykładzie z kondensatorem model, funkcję  $f$ , można było wyznaczyć z dokładnością do parametrów  $\alpha$  i  $\tau$  ze znajomości praw rządzących tym układem. Jednak w wielu dziedzinach nauki, np. biologii czy ekonomii, procesy są bardzo złożone i często nie ma teorii pozwalającej na wyznaczenie modelu matematycznego. W takich przypadkach pozostaje wykonanie eksperymentu i podjęcie próby wyznaczenia funkcji  $f$  na podstawie analizy wyników pomiarów. Pomocne są tu wykresy, zwłaszcza gdy mamy do czynienia z funkcją jednej zmiennej.

Zmienne objaśniające dzielimy na regulowane i kontrolowane. W celu wyjaśnienia tych pojęć rozważymy eksperyment mający na celu wyznaczenie plonu pszenicy  $y$ , z jednostki powierzchni w zależności od gęstości zasiewu  $x_1$  oraz ilości użytego nawozu  $x_2$ . W każdym eksperymencie ustalamy, „regulujemy” poziomy zmiennych  $x_1$  oraz  $x_2$ , dlatego są one *wielkościami regulowanymi*. Jeśli dodatkowo sprawdzamy (mierzymy) poziom pH gleby na każdym doświadczalnym poletku, to nowa zmienna  $x_3$  jest *wielkością kontrolowaną*.

Przedstawimy obecnie użyteczny przykład modelu eksperymentalnego podany przez Hockinga [50].

**Przykład 6.1.** Produkcja płyt paździerzowych polega na mieszaniu drewnianych wiórów z klejem, formowaniu z nich płyt o zadanej grubości, a następnie wygrzewaniu w piecu w temperaturze  $x$ . Producent jest zainteresowany w określeniu relacji między wytrzymałością  $y$  płyty a temperaturą  $x$  jej wygrzewania. W celu wyznaczenia tej zależności należy wyprodukować kilka płyt, stosując różne temperatury wygrzewania i zmierzyć ich wytrzymałość. Bazując na otrzymanych danych, można podjąć próbę wyznaczenia modelu – zależności funkcyjnej  $y = f(x)$ .

Można się spodziewać, że poszczególne płyty wygrzewane w tej samej temperaturze będą się charakteryzowały znacznym rozrzutem wytrzymałości. Ponadto

wyniki pomiarów wytrzymałości płyty  $y$  i temperatury  $x$  są obciążone błędami pomiarowymi. Jednak błędy te mają zwykle znacznie mniejszy rozrzut niż losowy rozrzut wytrzymałości poszczególnych płyt. Można więc przyjąć, że temperatura  $x$  jest w przybliżeniu zmienną deterministyczną, natomiast wytrzymałość  $y$  zmienną losową (losowe błędy pomiarów wytrzymałości poszczególnych płyt są zwykle pomijalnie małe w porównaniu z rozrzutem wytrzymałości poszczególnych płyt). □

Założymy teraz, że znany jest model matematyczny, określony funkcją (6.10) z dokładnością do nieznanymi parametrów. W celu oceny wartości tych parametrów należy przeprowadzić pomiary odpowiedzi układu  $y$  dla różnych wartości wielkości objaśniających  $x_j$ . Liczba pomiarów  $n$  nie powinna być mniejsza niż liczba parametrów  $p$ . Pomiary można przeprowadzić za pomocą, albo „planowanego eksperymentu”, albo „obserwacyjnego eksperymentu”. Znaczenie tych pojęć wyjaśnimy na przykładzie wyznaczania modelu  $y = f(x, a_1, \dots, a_p)$  określającego zależność wytrzymałości  $y$  płyt paździerzowych od temperatury  $x$  ich wygrzewania. *Planowany eksperyment* polega tu na ustalaniu temperatury na kolejnych założonych poziomach,  $x_1, x_2, \dots$ , wykonaniu pewnej liczby płyt na każdym poziomie i pomiarze odpowiedzi  $y$ . *Eksperyment obserwacyjny* polega natomiast na wykonywaniu płyt przy zmieniających się losowo i mierzonych (kontrolowanych) temperaturach.

Zmienne objaśniające mogą być *ilościowe*, taką zmienną jest temperatura w powyższym przykładzie, jak również *jakościowe* na przykład *zmienna wskaźnikowa* sygnalizujące obecność pewnego czynnika lub jego brak. Uogólnieniem zmiennych jakościowych są *zmiennie lingwistyczne*, tj. takie, które przyjmują wartości ze skończonego zbioru, gdzie elementami są zwykle słowa. Zmienne te są stosowane np. w medycynie, gdzie lekarz ocenia stan chorego za pomocą słów.

Zmienne wskaźnikowe wykorzystywane są do kodowania obecności lub braku pewnego czynnika w eksperymencie. Wyjaśnimy pojęcie na przykładzie produkcji płyt paździerzowych. Założymy, że producent płyt chce zbadać i porównać własności płyt wyprodukowanych z użyciem dwóch różnych klejów. W tym celu wytwarza się pewną liczbę płyt, stosując zarówno jeden, jak i drugi rodzaj kleju. Założono dla ustalenia uwagi, że zależności wytrzymałości od temperatury wygrzewania są liniowe dla obu klejów. Można wyznaczyć osobne modele dla obu klejów, ale lepiej porówna się ich własności jeśli wyznaczy się łączny model uwzględniający oba kleje. Właśnie zmienne wskaźnikowe umożliwiają skonstruowanie takiego uniwersalnego modelu

$$y = a_0 + a_1x + a_2z + \varepsilon,$$



gdzie  $z$  jest zmienną wskaźnikową. Przyjmujemy  $z = 1$ , gdy stosowany jest pierwszy klej i  $z = 0$ , gdy drugi. Model taki reprezentowany jest przez dwie równoległe linie proste o tym samym nachyleniu  $a_1$  i o różnych punktach przecięcia z osią  $y$ . Punkt przecięcia jest równy  $a_0 + a_2$  dla pierwszego kleju i równy  $a_0$  dla drugiego kleju.

W dalszych rozważaniach ograniczymy się do opisowego modelu regresji nazywanego modelem regresji. Modele takie dzielone są na dwie podstawowe grupy: liniowe modele regresji i nieliniowe modele regresji. Model (6.10) jest nazywany *liniowym modelem regresji*, jeśli  $f$  jest liniową funkcją parametrów, stąd

$$y = f(x_1, \dots, x_p; a_1, \dots, a_p) = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_px_p + \varepsilon. \quad (6.11)$$

Liniowość modelu regresji rozumiana jest więc nie względem zmiennych objaśniających  $x_k$ , a względem wyznaczanych parametrów modelu  $a_j$ . Wielomian  $a_0 + a_1x + a_2x^2$  jest liniowym modelem regresji, gdyż kładąc  $x = x_1$  i  $x^2 = x_2$ , otrzymuje się model  $a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$ .

Liniowe modele obejmują szeroką klasę funkcji i są powszechnie stosowane. Wynika to zarówno z ich uniwersalności, jak i relatywnej prostoty obliczeń numerycznych. Ponadto ułatwiają głębszą analizę, a zwłaszcza testowanie hipotez statystycznych. Praktycznie wszystkie funkcje gładkie można z dowolną dokładnością aproksymować modelami regresji liniowej. Istnieją jednak sytuacje praktyczne, do których lepiej zastosować modele nieliniowe. Na przykład, gdy parametry modelu nieliniowego mają interpretację fizyczną, a parametry modelu liniowego nie mają. Inna sytuacja przemawiająca za modelami nieliniowymi jest taka, że równie dokładny model liniowy ma większą liczbę parametrów.

W następnych rozdziałach omówiono zarówno liniowe, jak i nieliniowe modele regresji.



## Rozdział 7

# Regresja liniowa

### 7.1. Model regresji liniowej

W poprzednim rozdziale zdefiniowano ogólny model

$$y = f(x_1, \dots, x_p; a_1, \dots, a_p) = a_1x_1 + \dots + a_px_p + \varepsilon \quad (7.1)$$

regresji liniowej (por.(6.11)). W modelu tym  $y$  jest zmienną losową charakteryzującą *odpowieź badanego obiektu*;  $x_1, \dots, x_p$  są *zmiennymi objaśniającymi* nazywanymi również *regresorami*;  $a_1, \dots, a_p$  są nieznanymi parametrami, natomiast  $\varepsilon$  jest zmienną losową reprezentującą fluktuacje – „błąd pomiaru”, przy czym  $\varepsilon$  może być „naturalną” fluktuacją związaną z własnością badanego obiektu lub może reprezentować błąd pomiaru odpowiedzi  $y$ . Przypomnijmy, że liniowość w nazwie „regresji liniowej” oznacza liniowość funkcji  $f$  względem parametrów modelu  $a_j$ .

Estymację parametrów  $a_j$  przeprowadza się na podstawie pomiarów, w których dla założonych wartości regresorów  $x_j$ ,  $j = 1, \dots, p$ , wyznacza się odpowiedzi  $y$  obiektu. Załóżmy, że zostało przeprowadzonych  $n$  takich pomiarów, przy czym  $n \geq p$  (liczba pomiarów powinna być większa lub przynajmniej równa liczbie wyznaczanych parametrów), wtedy otrzymuje się  $n$  ciągów danych

$$\{y_i, x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip}\}, \quad i = 1, \dots, n,$$

w których  $y_i$  jest zaobserwowaną odpowiedzią układu w  $i$ -tym eksperymencie, natomiast  $x_{ij}$ ,  $i = 1, \dots, n$ ,  $j = 1, \dots, p$ , jest  $j$ -tym regresorem,  $x_j$ , w  $i$ -tym eksperymencie. Uwzględniając te wyniki w modelu (7.1), otrzymuje się układ  $n$  *równań eksperymentu*<sup>1</sup>

$$y_i = a_1x_{i1} + \dots + a_px_{ip} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (7.2)$$

---

<sup>1</sup> Stosowane są również nazwy *równania fundamentalne* i *równania regresji*.

który w notacji macierzowej przyjmują postać

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \quad (7.3)$$

lub

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (7.4)$$

gdzie  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$  jest wektorem losowym obserwacji,  $\mathbf{X} = [x_{ij}]$  jest  $n \times p$  wymiarową macierzą eksperymentu,  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$  jest wektorem parametrów modelu, natomiast  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n]^T$  jest wektorem losowym „błędów obserwacji”.

Macierz eksperymentu  $\mathbf{X}$  nazywana jest również macierzą regresji lub w „planowanym eksperymencie” macierzą planu. Liczba wierszy macierzy eksperymentu jest równa liczbie obserwacji  $n$ , natomiast liczba jej kolumn jest równa liczbie regresorów  $p$ .

Jak już wspomniano, podstawowym celem analizy regresji jest estymacja parametrów  $a_j$  na podstawie zaobserwowanych w eksperymencie odpowiedzi  $y_1, \dots, y_n$ . Estymatory te wyznacza się zwykle, stosując jedną z dwóch metod statystycznych: metodę największej wiarygodności (NW) lub metodę najmniejszych kwadratów (NK). Metoda NW prowadzi do „najefektywniejszych estymatorów”, jednak wymaga znajomości funkcji gęstości rozkładów obserwowanych zmiennych losowych, a to rzadko występuje w praktyce. Dlatego częściej stosowana jest metoda NK, która może być stosowana w przypadku słabszych założeń. Wykażemy, że dla modeli liniowych i normalnych rozkładów obserwowanych zmiennych losowych zarówno metoda NW, jak i NK prowadzi do tych samych estymatorów (por. [50], [70]).

Optymalne estymatory parametrów zależą od własności obserwacji  $y_i$ . Rozważania rozpoczniemy od najprostszej sytuacji, gdy błędy  $\varepsilon_i$  lub, co jest równoważne obserwacje  $y_i$ , spełniają trzy podstawowe założenia:

- (a)  $E[\varepsilon_i] = 0$ ,  $i = 1, \dots, n$  – nie są obciążone błędem systematycznym,
- (b)  $D^2[\varepsilon_i] = \sigma^2$ ,  $i = 1, \dots, n$  – są tej samej „dokładności”,
- (c)  $\text{cov}[\varepsilon_i, \varepsilon_j] = 0$ , dla  $i \neq j$ ,  $i, j = 1, \dots, n$  – nie są skorelowane.

Założenie (a) oznacza, że przyjęto właściwą klasę funkcji – poprawny model matematyczny. Założenia (a) i (b) można zapisać w zwartej formie, używając macierzy kowariancji  $\mathcal{D}[\mathbf{y}]$  wektora  $\mathbf{y}$  następująco

$$\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n, \quad (7.5)$$

gdzie  $\sigma^2$  jest wariancją pojedynczej obserwacji (pomiaru), natomiast  $\mathbf{I}_n$  jest macierzą jednostkową o wymiarze  $n \times n$ .

Jak wspomniano, zadanie estymacji parametrów  $\mathbf{a}$  można rozwiązać metodą największej wiarygodności (NW) lub metodą najmniejszych kwadratów (NK).

## 7.2. Estymacja parametrów liniowego modelu regresji metodą NW

Metoda NW wymaga znajomości łącznej funkcji gęstości wektora obserwacji  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$ . Zadanie rozwiążemy dla szczególnego przypadku, gdy obserwacje  $y_i$  lub, co jest tu równoważne, błędy pomiarów  $\varepsilon_i$  mają rozkład normalny i pokażemy jego związek z metodą NK. Sformułowane w poprzednim punkcie trzy założenia, (a), (b) i (c), uzupełniono o czwarte:

(d) błędy  $\varepsilon_i$  (a stąd i obserwacje  $y_i$ ) mają rozkład normalny,  $i = 1, \dots, n$ .

Jeśli uwzględnimy wszystkie założenia (a)–(d), to  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ , a zmienna losowa  $y_i$  ma rozkład  $y_i \sim N(a_1 x_{i1} + \dots + a_p x_{ip}, \sigma^2)$  o gęstości

$$f_i(y_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left(y_i - \sum_{j=1}^p a_j x_{ij}\right)^2\right\}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Funkcję wiarygodności  $L(y_1, \dots, y_n)$  obserwacji  $y_1, \dots, y_n$  otrzymuje się, mnożąc funkcje gęstości  $f_i(y_i)$  dla  $i = 1, \dots, n$  (wykorzystuje się tu założenie o braku korelacji między obserwacjami), stąd

$$L(y_1, \dots, y_n) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^p a_j x_{ij}\right)^2\right\}. \quad (7.6)$$

Zgodnie z metodą NW szuka się takich wartości parametrów  $a_1, \dots, a_p$ , dla których logarytm z funkcji wiarygodności

$$\ln L(y_1, \dots, y_n) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^p a_j x_{ij}\right)^2 \quad (7.7)$$

osiąga maksimum. Ze wzoru (7.7) wynika, że maksimum funkcji wiarygodności  $L$  jest osiągnięte ( $\max L \iff \max \ln L$ ), gdy parametry  $a_1, \dots, a_p$  minimalizują różnicową sumę kwadratów

$$Q(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^p a_j x_{ij}\right)^2. \quad (7.8)$$

Warunek ten jest zgodny z kryterium metody NK. Wynika stąd następujący ważny wniosek:

*Dla liniowych modeli regresji i losowo niezależnych obserwacji o rozkładzie normalnym obie podstawowe metody estymacji, metoda NW i metoda NK, wyznaczają te same estymatory.*

Ponadto, uwzględniając fakt, że metoda NK jest prostsza numerycznie niż metoda NW, otrzymuje się praktyczny wniosek:

*Dla liniowych lub w przybliżeniu liniowych modeli regresji oraz obserwacji o rozkładzie normalnym, lub w przybliżeniu normalnym należy stosować metodę NK.*

Metoda NK prowadzi do optymalnych estymatorów przy znacznie prostszych obliczeniach niż w przypadku stosowania metody NW. Jeśli jednak nie są spełnione założenia (a)–(d), przynajmniej w przybliżeniu, to zaleca się zastosować metodę NW. Należy jednak pamiętać, że metoda NW wymaga znajomości funkcji gęstości rozkładów obserwowanych zmiennych losowych.

Wyrażenie  $Q(\mathbf{a})$ , (7.8), można zapisać w następującej macierzowej formie

$$Q(\mathbf{a}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}), \quad (7.9)$$

gdzie wykorzystano następującą własność iloczynu skalarnego wektorów: jeśli  $\mathbf{z} = [z_1, \dots, z_n]^T$  to  $(\mathbf{z}, \mathbf{z}) = \mathbf{z}^T \mathbf{z} = \sum_{i=1}^n z_i^2$ . Minimalizacja wyrażenia  $Q(\mathbf{a})$  oznacza, że metoda NK sprowadza się do minimalizacji normy euklidesowej wektora  $\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}$ , co można zapisać

$$\min_{\mathbf{a}} Q(\mathbf{a}) = \min_{\mathbf{a}} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2 = \min_{\mathbf{a}} \{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})\}. \quad (7.10)$$

Minimum wyrażenia (7.10) względem  $a_1, \dots, a_p$  można wyznaczyć albo metodą algebraiczną, albo „geometryczną”. Rozwiązano zadanie obiema metodami, gdyż wskazują one na różne własności estymatorów. Wyrażenie (7.10) jest funkcją kwadratową względem parametrów  $a_j$ , a z tego wynika jednoznaczność rozwiązania – istnienie jednego globalnego minimum.

### 7.3. Estymacja parametrów liniowego modelu regresji metodą NK

#### 7.3.1. Rozwiązanie algebraiczne

W metodzie NK poszukuje się minimum funkcji  $Q(\mathbf{a})$ , (7.9), co można wyznaczyć, przyrównując do zera pochodne cząstkowe względem parametrów  $a_j$ . Dla

uproszczenia rachunków wykorzystamy pochodne wektorowe (por. DODATEK A.2.1), które pozwalają w jednolitej formie macierzowej przeprowadzić analizę. Wyrażenie (7.10) można, po przekształceniach, zapisać w postaci

$$Q(\mathbf{a}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{X} \mathbf{a} + \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a}. \quad (7.11)$$

Obliczając pochodną wektorową tego wyrażenia względem  $\mathbf{a}$  (por. wzory (A.22) i (A.23)), a następnie przyrównując ją do zera, otrzymuje się

$$\frac{\partial Q(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \nabla Q(\mathbf{a}) = -\mathbf{X}^T \mathbf{y} - \mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} = \mathbf{0},$$

skąd

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}. \quad (7.12)$$

Wyrażenie (7.12) reprezentuje układ  $p$  równań liniowych z niewiadomymi  $a_1, \dots, a_p$  nazywany *równaniami normalnymi*.

Jeśli macierz eksperymentu  $\mathbf{X}$  ma pełny rząd – równy liczbie kolumn  $p$ ,  $p \leq n$ , to iloczyn  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest kwadratową macierzą nieosobliwą o wymiarze  $p \times p$ , więc istnieje jednoznaczne rozwiązanie równań normalnych (7.12)

$$\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \quad (7.13)$$

które określa estymatory NK parametrów  $a_j$ . Symbol  $\hat{\phantom{a}}$  używany jest tu do oznaczenia estymatora, zarówno NK, jak i NW.

### 7.3.2. Rozwiązanie geometryczne

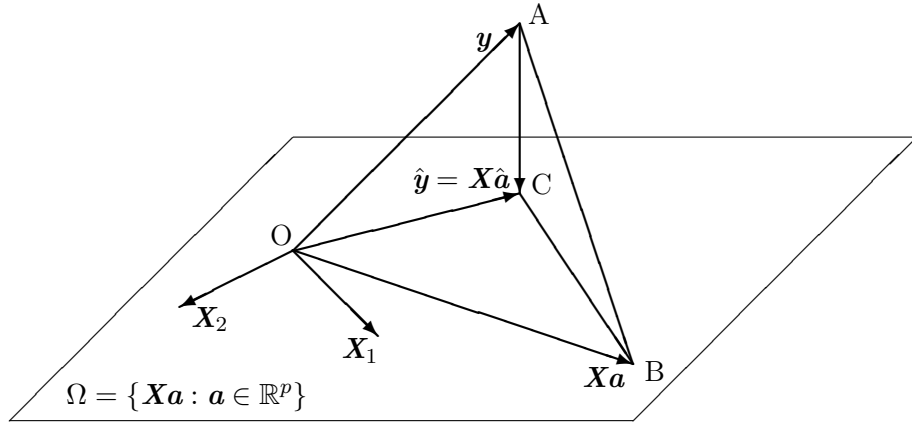
Wyznamy obecnie wzór (7.13) „metodą geometryczną”. Podejście to pozwala na inne spojrzenie na metodę NK, a ponadto jest przydatne w rozwiązaniu wielu problemów.

Iloczyn  $\mathbf{X} \mathbf{a}$  występujący w równaniu eksperymentu (7.4) zapisano w postaci kombinacji liniowej

$$\mathbf{X} \mathbf{a} = a_1 \mathbf{X}_1 + a_2 \mathbf{X}_2 + \dots + a_p \mathbf{X}_p, \quad (7.14)$$

kolejnych kolumn  $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_p$  macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$ . Symbol  $\mathbf{X}_j$  oznacza  $j$ -tą kolumnę<sup>2</sup> macierzy  $\mathbf{X}$ . Zbiór  $\Omega = \{\mathbf{X} \mathbf{a} : \mathbf{a} \in \mathbb{R}^p\}$ , kombinacji liniowych

<sup>2</sup>  $j$ -ta kolumna macierzy  $\mathbf{X}$  oznaczona jest tu symbolem  $\mathbf{X}_j$ , jako macierz. Jednak jednokolumnowa macierz jest również wektorem, więc zgodnie z przyjętym systemem oznaczeń może być również oznaczana małą literą  $\mathbf{x}_j$ . W dalszej części stosuje się oznaczenie macierzowe.



Rys. 7.1. Geometryczna ilustracja metody NK – wyznaczanie minimum odległości punktu A (wektora obserwacji  $\mathbf{y}$ ) od płaszczyzny  $\Omega$

$a_1 \mathbf{X}_1 + \dots + a_p \mathbf{X}_p$  wektorów  $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_p$ , jest więc podprzestrzenią rozpiętą na tych wektorach i tworzy hiperpłaszczyznę będącą podzbiorem przestrzeni  $\mathbb{R}^n$ . Zgodnie z założeniem, rząd macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$  jest równy liczbie jej kolumn,  $p$ , a stąd wynika, że wektory  $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_p$  są liniowo niezależne i zbiór ich kombinacji liniowych jest  $p$ -wymiarową podprzestrzenią liniową  $\Omega$  przestrzeni  $\mathbb{R}^n$ . Wektor  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$  zaobserwowanych wartości leży zwykle poza hiperpłaszczyzną  $\Omega$ . Sytuację tę pokazano na rysunku (7.1) dla dwóch regresorów,  $p = 2$ . Hiperpłaszczyzna  $\Omega$  jest wtedy rozpięta na wektorach  $\mathbf{X}_1$  oraz  $\mathbf{X}_2$  i jest, w tym przypadku, płaszczyzną. Zgodnie z metodą NK poszukuje się minimum wyrażenia (7.10) względem parametrów  $a_1, \dots, a_p$  (w przykładzie przedstawionym na rysunku dla parametrów  $a_1$  i  $a_2$ ). Zadanie wyznaczenia minimum wyrażenia  $Q(\mathbf{a})$  polega więc na znalezieniu takiego wektora  $\hat{\mathbf{y}} \in \Omega$ , należącego do hiperpłaszczyzny  $\Omega$ , który jest „najbliżej” wektora  $\mathbf{y}$ . Z twierdzenia o rzucie ortogonalnym wynika, że wektorem tym jest „rzut ortogonalny” wektora  $\mathbf{y}$  na hiperpłaszczyznę  $\Omega$ , rysunek 7.1.

Niech  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}$  oznacza rzut ortogonalny wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  na hiperpłaszczyznę  $\Omega$ , wtedy wektor  $\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}$  jest ortogonalny do dowolnego wektora należącego do hiperpłaszczyzny  $\Omega$ , a zwłaszcza, do jej generatorów  $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_p$ . Zapisuje się to symbolicznie  $\mathbf{X}_j \perp (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})$ ,  $j = 1, \dots, p$ . Iloczyn skalarny wektorów ortogonalnych równy jest zeru, więc

$$\mathbf{X}_j^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}) = 0, \quad j = 1, \dots, p. \quad (7.15)$$



Układ równań (7.15) można zapisać jednym, równoważnym wzorem macierzowym

$$\mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}) = \mathbf{0},$$

który po przekształceniach przyjmuje postać

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}.$$

Otrzymaliśmy więc równania normalne (7.12) poprzednio wyznaczone za pomocą działań algebraicznych.

### 7.3.3. Wyrównane oceny odpowiedzi i reszty

Przedstawimy obecnie „wyrównane oceny” odpowiedzi układu oraz „reszty” – różnice między wyrównanymi ocenami a odpowiedziami. Wyrównane oceny i reszty mają ważne zastosowania w analizie danych.

Element  $y_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  wektora  $\mathbf{y}$  reprezentuje  $i$ -tą odpowiedź badanego obiektu, gdy regresory wynoszą odpowiednio  $x_{i1}, \dots, x_{ip}$ . Jeśli w równaniu (7.2) podstawimy estymatory  $\hat{a}_j$  parametrów w miejsce  $a_j$ ,  $j = 1, \dots, p$ , to otrzymuje się tzw. *wyrównane (skorygowane) oceny*

$$\hat{y}_i = \hat{a}_1 x_{i1} + \dots + \hat{a}_p x_{ip}, \quad i = 1, \dots, n \quad (7.16)$$

odpowiedzi układu  $y_i$ . Wektor  $\hat{\mathbf{y}} = [\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_n]^T$  wyrównanych ocen można wyznaczyć ze wzoru

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{y}} &= \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} \\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \\ &= \mathbf{P}\mathbf{y}, \end{aligned} \quad (7.17)$$

gdzie przy przejściu z pierwszej do drugiej równości wykorzystano estymator (7.13), natomiast

$$\mathbf{P} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \quad (7.18)$$

jest macierzą rzutu ortogonalnego wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  na hiperpłaszczyznę  $\Omega$  nazywaną *macierzą kapeluszną* (nazwa pochodzi od angielskiego zwrotu „for putting hat on” określającego rolę tej macierzy „kładącej kapelusz na”  $\mathbf{y}$  (por. (7.17)).

Dla każdego ciągu wartości wejściowych  $x_{i1}, \dots, x_{ip}$  wyznaczone są dwie oceny odpowiedzi układu: obserwacja  $y_i$  (wynik pomiaru) oraz jej „wyrównana ocena”  $\hat{y}_i$ .

Wykażemy w dalszej części, że wyrównane oceny  $\hat{y}_i$  mają statystycznie lepsze własności niż obserwacje  $y_i$ .

Różnice

$$r_i = y_i - \hat{y}_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (7.19)$$

między obserwacjami  $y_i$  a wyrównanymi ocenami  $\hat{y}_i$  nazywa się również *resztami* lub *reziduami* (ang. *residuals*). Wektor różnic  $\mathbf{r} = [r_1, \dots, r_n]^T$  łączy wektor obserwacji  $\mathbf{y}$  z jego rzutem  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}^T \hat{\mathbf{a}}$  na hiperpłaszczyznę  $\Omega$  (rys. 7.1). Wektor ten można obliczyć ze wzoru

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} \\ &= \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} \\ &= (\mathbf{I}_n - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T) \mathbf{y} \\ &= (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}) \mathbf{y}. \end{aligned} \quad (7.20)$$

Kwadrat  $\|\mathbf{r}\|^2$  „długości” wektora  $\mathbf{r}$  nosi nazwę *różnicowej sumy kwadratów* (ang. *residual sum of squares*) i oznaczany jest symbolem  $RSS = \mathbf{r}^T \mathbf{r} = \|\mathbf{r}\|^2$ . Różnicowa suma kwadratów jest równa kwadratowi odległości wektora  $\mathbf{y}$  od hiperpłaszczyzny  $\Omega$ . Spełnia ona następujące zależności

$$\begin{aligned} RSS = \|\mathbf{r}\|^2 &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}) \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}} \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \hat{\mathbf{a}}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}} - \mathbf{X}^T \mathbf{y}) \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \quad \text{na mocy (7.12)} \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}} \end{aligned} \quad (7.21)$$

$$= \|\mathbf{y}\|^2 - \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}\|^2 \quad (7.22)$$

$$= \|\mathbf{y}\|^2 - \|\hat{\mathbf{y}}\|^2. \quad (7.23)$$

Omówimy jeszcze kilka faktów związanych z interpretacją geometryczną rozwiązania. Przy wyprowadzaniu zależności (7.21) zapisano rzut ortogonalny wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  na hiperpłaszczyznę  $\Omega$  w postaci  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{P}\mathbf{y}$ , gdzie  $\mathbf{P} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$  jest macierzą tego przekształcenia reprezentującego rzut ortogonalny  $n$ -wymiarowej przestrzeni euklidesowej  $E_n$  na jej podprzestrzeń (hiperpłaszczyznę)  $\Omega$ , natomiast  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  reprezentuje rzut ortogonalny na ortogonalne uzupełnienie,  $\Omega^\perp$ , hiperpłaszczyzny  $\Omega$ . Równanie

$$\mathbf{y} = \mathbf{P} \mathbf{y} + (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}) \mathbf{y}$$

jest dekompozycją wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  na dwie ortogonalne składowe  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{P}\mathbf{y}$  oraz  $\mathbf{r} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}$ . Macierze  $\mathbf{P}$  oraz  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  odgrywają ważną rolę w analizie danych i mają kilka interesujących własności, a zwłaszcza:

1.  $\mathbf{P}$  oraz  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  są macierzami symetrycznymi i idempotentnymi.
2.  $\text{tr}[\mathbf{P}] = p$ , natomiast  $\text{tr}[\mathbf{I}_n - \mathbf{P}] = n - p$ .
3.  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{X} = \mathbf{0}$ .

Ad 1. Symetrię macierzy  $\mathbf{P}$  łatwo sprawdzić bezpośrednio. Ponadto  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})^T = \mathbf{I}_n - \mathbf{P}^T = \mathbf{I}_n - \mathbf{P}$ , więc macierz  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  jest również symetryczna. Dalej

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T = \mathbf{X} \mathbf{I}_p (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T = \mathbf{P},$$

co dowodzi, że  $\mathbf{P}$  jest macierzą idempotentną. Podobnie  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})^2 = \mathbf{I}_n - 2\mathbf{P} + \mathbf{P}^2 = \mathbf{I}_n - \mathbf{P}$ , więc  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  jest również macierzą idempotentną.

Ad 2. Ponieważ  $\mathbf{P}$  jest macierzą symetryczną i idempotentną, więc

$$\text{rank} \mathbf{P} = \text{tr} \mathbf{P}.$$

Ponadto

$$\begin{aligned} \text{tr} \mathbf{P} &= \text{tr}[\mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T] \\ &= \text{tr}[\mathbf{X}^T \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}] \\ &= \text{tr} \mathbf{I}_p \end{aligned} \tag{7.24}$$

$$= p. \tag{7.25}$$

Macierz  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  jest również symetryczna i idempotentna, jak wykazano wyżej, więc

$$\text{rank}[\mathbf{I}_n - \mathbf{P}] = \text{tr}[\mathbf{I}_n - \mathbf{P}] = n - \text{tr} \mathbf{P} = n - p.$$

Ad 3.  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X} = \mathbf{0}$ . □

Macierz kapeluszkowa pozwala w prostej postaci wyrazić macierz kowariancji wektora wyrównanych ocen  $\hat{\mathbf{y}}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}[\hat{\mathbf{y}}] &= \mathcal{D}[\mathbf{P}\mathbf{y}] \\ &= \mathbf{P} \mathcal{D}[\mathbf{y}] \mathbf{P}^T \\ &= \sigma^2 \mathbf{P}, \end{aligned} \tag{7.26}$$

gdzie przy przejściu od pierwszej do drugiej równości wykorzystano „prawo propagacji macierzy kowariancji”, a przy przejściu z drugiej do trzeciej równości idempotentność macierzy  $\mathbf{P}$  oraz założenie, że  $\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ .

Analogicznie postępując, można wyznaczyć macierz kowariancji wektora różnic

$$\begin{aligned}\mathcal{D}[r] &= \mathcal{D}[(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}] \\ &= (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathcal{D}[\mathbf{y}](\mathbf{I}_n - \mathbf{P})^T \\ &= \sigma^2(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}).\end{aligned}\tag{7.27}$$

Zanim przejdziemy do przykładów zastosowań regresji liniowej omówimy jej szczególny przypadek, w którym model jest linią prostą.

#### 7.4. Estymacja parametrów linii prostej

Rozważania rozpoczniemy od linii prostej,  $y = ax$ , przechodzącej przez początek układu współrzędnych, wtedy: równania fundamentalne  $y_i = ax_i + \varepsilon_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ ; macierz eksperymentu  $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_n]^T$ ,  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) = \sum x_i^2$ ,  $\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \sum x_i y_i$ . Po podstawieniu tych danych do (7.13) otrzymano ocenę

$$\hat{a} = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}.\tag{7.28}$$

Rozpatrzmy obecnie sytuację, gdy model matematyczny obiektu opisany jest dowolną linią prostą  $y = a_0 + a_1 x$  – jest to tak zwana *regresja liniowa prosta*. Równania eksperymentu wynoszą  $y_i = a_0 + a_1 x_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , więc  $\mathbf{X} = [\mathbf{J}_n, \mathbf{x}]$ , gdzie  $\mathbf{J}_n = [1, 1, \dots, 1]^T$ ,  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ . Obliczymy kolejne elementy wzoru (7.13)

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^T \mathbf{X} &= \begin{bmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{bmatrix}, \\ (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} &= \frac{1}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum x_i^2 & -\bar{x} \\ -\bar{x} & 1 \end{bmatrix},\end{aligned}$$

oraz

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}.$$

Po podstawieniu tych wyników do (7.13), po przekształceniach, otrzymuje się oceny

$$\hat{a}_0 = \bar{y} - \hat{a}_1 \bar{x},\tag{7.29}$$

$$\hat{a}_1 = \frac{\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sum (x_i - \bar{x})^2}.\tag{7.30}$$

Estymator (7.30) współczynnika nachylenia  $a_1$  prostej różni się od estymatora (7.28) nachylenia  $a$  prostej przechodzącej przez początek układu współrzędnych. Również otrzymana tu linia prosta różni się od linii regresji I rodzaju, wzory (6.6) i (6.7).

## 7.5. Przykłady zastosowań regresji liniowej

**Przykład 7.1.** Należy wyznaczyć możliwie najdokładniej ładunek  $q$  elektronu za pomocą elektroskopu. W tym celu gromadzi się, możliwie małą liczbę elektronów na okładkach oscyloskopu, po czym mierzy ich ładunek. Wykonano dwa takie pomiary; w pierwszym z nich wyznaczono ładunek  $k_1$  elektronów, wynik  $y_1$ , a w drugim  $k_2$  elektronów, wynik  $y_2$ . Równania eksperymentu w rozwiniętej postaci są następujące

$$\begin{aligned}y_1 &= k_1 q + \varepsilon_1, \\y_2 &= k_2 q + \varepsilon_2,\end{aligned}$$

a w zapisie macierzowym  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , gdzie  $\mathbf{y} = [y_1, y_2]^T$ ,  $\mathbf{a} = q$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \varepsilon_2]^T$  oraz

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \end{bmatrix}. \quad (7.31)$$

Składowe estymatora  $\hat{\mathbf{a}}$  (wzór (7.13)) wynoszą:  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = k_1^2 + k_2^2$  oraz  $\mathbf{X}^T \mathbf{y} = k_1 y_1 + k_2 y_2$ , a stąd, po podstawieniu do (7.13), otrzymuje się następującą ocenę ładunku pojedynczego elektronu

$$\hat{\mathbf{a}} = \hat{q} = \frac{k_1 y_1 + k_2 y_2}{k_1^2 + k_2^2}.$$

Na przykład dla  $k_1 = 3$ , a  $k_2 = 4$ ,  $\hat{q} = (3y_1 + 4y_2)/25$ .

Ze wzoru (7.12) obliczymy różnicową sumę kwadratów:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}^T \mathbf{r} = RSS &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}(k_1 y_1 + k_2 y_2) \\ &= y_1^2 + y_2^2 - \frac{(k_1 y_1 + k_2 y_2)^2}{k_1^2 + k_2^2}.\end{aligned}$$

Wynik ten wykorzystuje się do badania dokładności oceny. □

**Przykład 7.2.** Należy wyznaczyć, możliwie dokładnie, gęstość  $\rho = m/v$  (masę właściwą) pewnego stopu zdefiniowaną jako stosunek masy  $m$  ciała do jego objętości  $v$ . Założymy, że w tym celu wykonano  $n$  różnych próbek stopu, a następnie zmierzono ich masy i objętości, i otrzymano ciąg wyników pomiarów  $\{m_i, v_i\}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , na podstawie których wyznacza się ocenę gęstości  $\rho$  metodą regresji liniowej.

W pierwszym kroku należy określić równania eksperymentu. Występują tu dwie mierzone wielkości,  $m$  i  $v$ , przy czym żadna z nich nie jest przedmiotem szczególnego zainteresowania, więc nie ma przesłanki wskazującej, którą z wielkości  $m$  czy  $v$  należy przyjąć za odpowiedź układu, a którą za pobudzenie (regresor). Stosując omówiony model regresji, w zależności od relacji między błędami pomiarów masy  $\varepsilon_m$  i błędami pomiarów objętości  $\varepsilon_v$  można sformułować dwa modele regresji

$$m = \rho v + \varepsilon_m,$$

gdzie  $\varepsilon_m$  jest błędem pomiaru masy lub

$$v = \frac{1}{\rho} m + \varepsilon_v,$$

przy czym  $\varepsilon_v$  – błąd pomiaru objętości.

Oba modele są przykładami linii prostej przechodzącej przez początek układu współrzędnych,  $y = ax$ . Powstaje więc problem wyboru jednego z nich. Można tego dokonać na bazie własności błędów pomiarów. W modelu regresji (opisowym) odpowiedź  $y$  jest zmienną losową, a wielkości wejściowe,  $x$ , są zmiennymi deterministycznymi, dlatego uzasadniony jest postulat, aby za odpowiedź,  $y$ , przyjąć tę zmienną, która charakteryzuje się większym błędem pomiarowym, a za  $x$ , tę która mniejszym błędem.

Założymy, że z analizy metrologicznej obserwacji wynika, że większym błędem względnym charakteryzują się pomiary masy, wtedy zmiennej  $y$  występującej w modelu regresji odpowiada  $m$ , co zapisuje się krótko,  $y \leftrightarrow m$ , natomiast regresorem  $x$  jest  $v$ ,  $x \leftrightarrow v$ . Równania eksperymentu przyjmą postać

$$m_i = \rho v_i + \varepsilon_{m_i}, \quad i = 1, \dots, n,$$

gdzie  $\varepsilon_{m_i}$  jest błędem pomiaru masy  $i$ -tej próbki. W zapisie macierzowym  $\mathbf{m} = \rho \mathbf{v} + \boldsymbol{\varepsilon}_m$ , gdzie  $\mathbf{m} = [m_1, \dots, m_n]^T$ ,  $\mathbf{v} = [v_1, \dots, v_n]^T$  oraz  $\boldsymbol{\varepsilon}_m = [\varepsilon_{m_1}, \dots, \varepsilon_{m_n}]^T$ , (wyznaczanym parametrem jest tu  $\rho$ ,  $\rho \leftrightarrow a$ ). Macierz ekspery-

mentu  $\mathbf{X} = \mathbf{v}$  i po podstawieniu tych danych do (7.28) otrzymuje się następującą ocenę gęstości

$$\hat{\rho}_v = \hat{a} = (\mathbf{v}^T \mathbf{v})^{-1} \mathbf{v}^T \mathbf{m} = \frac{\sum_{i=1}^n m_i v_i}{\sum_{i=1}^n v_i^2}. \quad (7.32)$$

Dla jednej próbki stopu ( $n = 1$ ), więc pojedynczego pomiaru  $\{m_1, v_1\}$ , ze wzoru (7.32) otrzymuje się ocenę  $\hat{\rho}_v = m_1/v_1$ , co jest zgodne z oczekiwaniami.

Porównajmy wynik jaki otrzyma się, gdy objętość  $v$  jest mierzona z większym błędem względnym niż masa  $m$ , wtedy odpowiedni jest model regresji  $v = m/\rho$ . W takim modelu  $v$  jest odpowiedzią układu,  $y \leftrightarrow v$ , a  $m$  wielkością wejściową (regresorem),  $x \leftrightarrow m$ . Równania eksperymentu przyjmą teraz postać

$$v_i = \frac{1}{\rho} m_i + \varepsilon_{v_i}, \quad i = 1, \dots, n,$$

gdzie  $\varepsilon_{v_i}$  jest tu błędem pomiaru objętości  $i$ -tej próbki. Przechodząc do zapisu macierzowego otrzymuje się  $\mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \mathbf{m} + \boldsymbol{\varepsilon}_v$ . Wyznaczanym parametrem jest tu  $a = 1/\rho$ , wektorem obserwacji  $\mathbf{y} = \mathbf{v}$ , a macierzą eksperymentu  $\mathbf{X} = \mathbf{m}$ . Po podstawieniu tych wyników do (7.28) otrzymuje się ocenę

$$\hat{a} = (\mathbf{m}^T \mathbf{m})^{-1} \mathbf{m}^T \mathbf{v} = \frac{\sum_{i=1}^n m_i v_i}{\sum_{i=1}^n m_i^2}.$$

Ponieważ  $\rho = 1/a$ , więc po założeniu, że błędy pomiarów są „relatywnie małe”, można przyjąć, że  $\hat{\rho} \cong \frac{1}{\hat{a}}$ , a stąd ocena gęstości

$$\hat{\rho}_m = \frac{\sum_{i=1}^n m_i^2}{\sum_{i=1}^n m_i v_i}. \quad (7.33)$$

Dla jednej próbki stopu,  $n = 1$ , otrzymuje się  $\hat{\rho}_m = m_1/v_1$ , a więc zgodnie z oczekiwaniami.

Oba estymatory  $\hat{\rho}_v$ , wzór (7.32) i  $\hat{\rho}_m$ , wzór(7.33) różnią się między sobą. A więc wybór modelu regresji jest istotny.

Łatwo sprawdzić, że jeśli pomiary objętości i masy wykonywane są bez błędu, to z obu modeli regresji otrzymuje się ten sam wynik – ocena jest równa wartości prawdziwej. To potwierdza poprawność analizy.

Podany przykład wykazuje, że dobór odpowiedniego modelu regresji zależy od własności obserwacji (wyników pomiarów). Zazwyczaj wszystkie pomiary obarczone są błędami losowymi, gdy tymczasem w prezentowanym tu modelu regresji liniowej przyjmuje się, że regresory (zmiennie wejściowe) znane są dokładnie. Należy więc zastosować właściwe uproszczenia, które pozwolą wybrać taki model analizy regresji, który „najlepiej” odpowiada rzeczywistym warunkom – w podanym przykładzie należało dokonać wyboru, którą zmienną można zakwalifikować jako zmienną deterministyczną, a którą jako zmienną losową. Jednak nie zawsze takie uproszczenie jest odpowiednie, gdyż obie zmienne mogą być mierzone z błędami (względny) o zbliżonym poziomie. Możliwe są różne rozwiązania tego problemu. Jedno z nich polega na wyznaczeniu prostej regresji, „mierząc” odległość między punktami a modelem nie wzdłuż osi współrzędnych, jak jest w opisowym modelu regresji, a ortogonalnie do prostej, co prowadzi do tak zwanej *prostej regresji ortogonalnej*. Własności regresji ortogonalnej oraz innych metod estymacji zbadał Wald [109], a zebrane metody podał Linnik [70]. Jednak tego typu podejścia są rzadko stosowane, gdyż utrudniają stosowanie wielu statystycznych metod analizy.

Innym rozwiązaniem problemu estymacji dla zbliżonych błędów pomiarów obu zmiennych  $m$  i  $v$  (ogólnie  $y$  i  $x$ ) jest przyjęcie średniej geometrycznej lub średniej arytmetycznej obu estymatorów jako ocenę końcową. Przyjmując średnią geometryczną, otrzymuje się

$$\hat{\rho} = \sqrt{\hat{\rho}_m \hat{\rho}_v} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n m_i^2}{\sum_{i=1}^n v_i^2}}. \quad (7.34)$$

Wybór średniej geometrycznej wynika stąd, że różni się ona od średniej arytmetycznej w pomijalnie małym stopniu (po założeniu, że względne błędy pomiarów są małe), a średnia geometryczna prowadzi do prostszych wzorów.

Podobnie jak poprzednio dla jednej próbki stopu,  $n = 1$ , otrzymuje się z (7.34) ocenę  $\hat{\rho} = m_1/v_1$ .  $\square$

**Przykład 7.3.** Kula o nieznanym ciężarze  $a$  umieszczona jest na desce odchyłonej o kąt  $\alpha$  od pionu i utrzymywana w równowadze za pomocą nici, przy czym kąt odchylenia jest regulowany. Należy wyznaczyć ciężar kuli na podstawie pomiarów naprężenia  $y$  nici wykonanych dla różnych kątów  $\alpha$ . Opór tarcia pominać.



Zgodnie z rozkładem wektorów sił relacja między ciężarem  $a$  a naprężeniem określona jest wzorem  $y = a \cos \alpha$ . Załóżmy, że wykonano  $n$  pomiarów naprężenia nici dla kątów  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$  i otrzymano wyniki, odpowiednio  $y_1, \dots, y_n$  z błędami  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$  spełniającymi założenia (a)–(c). Równania eksperymentu są następujące

$$y_i = a \cos \alpha_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

a w postaci macierzowej  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , gdzie  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$ ,  $\mathbf{a} = a$ ,  $\mathbf{X} = [\cos \alpha_1, \dots, \cos \alpha_n]^T$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n]^T$ . Jest to model regresji linii prostej przechodzącej przez początek układu współrzędnych, w którym regresory  $x_i = \cos \alpha_i$ , więc na mocy (7.28) otrzymano następujący estymator ciężaru kuli

$$\hat{a} = \frac{y_1 \cos \alpha_1 + y_2 \cos \alpha_2 + \dots + y_n \cos \alpha_n}{\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \dots + \cos^2 \alpha_n}.$$

Dla jednego pomiaru  $y_1$  i kąta  $\alpha_1$ , z podanego wzoru otrzymuje się ocenę  $\hat{a} = y_1 / \cos \alpha_1$ , a więc taką, jaką otrzymuje się bezpośrednio z relacji  $y = a \cos \alpha$ .

Na podstawie wzoru (7.12) różnicowa suma kwadratów jest równa

$$\mathbf{R}^T \mathbf{R} = RSS = y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_n^2 - \frac{(y_1 \cos \alpha_1 + y_2 \cos \alpha_2 + \dots + y_n \cos \alpha_n)^2}{\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \dots + \cos^2 \alpha_n}.$$

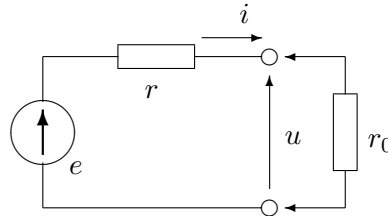
□

## 7.6. Wyznaczenie modelu matematycznego baterii elektrycznej

Ważnym problemem w elektrotechnice jest wyznaczenie modelu matematycznego źródeł napięć (np. akumulatora) opisującego zależność prądu  $i$  od napięcia  $u$  – funkcję  $i = f(u)$ . W przypadku liniowych zależności model taki reprezentuje schemat zastępczy złożony z idealnego źródła napięcia  $e$  oraz rezystancji wewnętrznej  $r$ , rys. 7.2

Siła elektromotoryczna  $e$  źródła napięcia oraz jego rezystancja wewnętrzna  $r$  są parametrami modelu. Wprawdzie mogą mieć one interpretację fizyczną, ale nie można ich zmierzyć bezpośrednio. W celu wyznaczenia ich wartości podłącza się obciążenie  $r_0$  i mierzy prąd  $i$  pobierany ze źródła oraz napięcie  $u$  na zaciskach dla różnych wartości obciążeń. Zależność między mierzonymi wielkościami oraz parametrami opisana jest równaniem

$$e - i r = u. \quad (7.35)$$



Rys. 7.2. Schemat zastępczy akumulatora złożony z idealnego źródła napięcia  $e$  oraz rezystancji wewnętrznej  $r$ ; symbol  $r_0$  reprezentuje rezystancję obciążenia

Jest to równanie liniowe względem parametrów  $e$  oraz  $r$ . Jeśli pomiary wielkości  $u$  oraz  $i$  wykonywane byłyby bez błędów, to wystarczyłoby wykonać je dla dwóch wartości rezystora  $r_0$ . Wtedy otrzymuje się dwie pary danych  $(u_1, i_1)$  i  $(u_2, i_2)$ , a po podstawieniu do (7.35) układ dwóch równań liniowych

$$\begin{aligned} e - i_1 r &= u_1, \\ e - i_2 r &= u_2 \end{aligned}$$

z dwoma niewiadomymi  $e$  oraz  $r$ . Rozwiązanie wyznacza szukane wartości parametrów  $e$  oraz  $r$ . Jednak takie podejście ma tylko znaczenie teoretyczne. W praktyce należy uwzględnić błędy pomiarów, jak również zbadać czy wzór (7.35) jest poprawny, ewentualnie, dla jakich wartości prądów  $i$  może być stosowany z założoną dokładnością. Narzędzi do takich badań dostarcza aparat regresji liniowej, który teraz zastosowano do wyznaczenia parametrów  $e$  oraz  $r$ .

Załóżmy, że wykonano  $n$  pomiarów par prądów  $i$  i napięć, i otrzymano wyniki  $\{(u_i, i_i)\}$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Pomiary obu wielkości obciążone są błędami losowymi. W regresji liniowej zakłada się, że tylko jedna zmienna, odpowiedź, jest zmienną losową, natomiast druga, regresor, jest wielkością deterministyczną, aby wykorzystać narzędzia regresji liniowej, należy dokonać wyboru, która z wielkości mierzonych  $u$  czy  $i$  jest odpowiedzią układu, a która regresorem. Odpowiednim kryterium wyboru jest tu błąd pomiaru. Rozpatrzono następujące przypadki:

1. Błąd względny (graniczny)  $\delta i$  pomiarów prądu jest istotnie mniejszy niż błąd względny (graniczny)  $\delta u$  pomiarów napięcia, wtedy przyjmuje się  $\delta i \approx 0$  i z (7.35) otrzymuje

$$u_i = e - r i_i + \varepsilon_{u_i}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (7.36)$$

gdzie  $\varepsilon_{u_i}$  jest błędem pomiaru napięcia  $u_i$ . Kładąc  $y_i = u_i$ ,  $x_i = i_i$ ,  $a_0 = e$  oraz  $a_1 = -r$ , otrzymuje się równania eksperymentu

$$y_i = a_0 + a_1 x_i + \varepsilon_{u_i}, \quad i = 1, \dots, n,$$

regresji liniowej prostej. Wzory (7.29) i (7.30) określają estymatory  $\hat{a}_0$  oraz  $\hat{a}_1$ , a stąd estymatory  $\hat{e} = \hat{a}_0$  oraz  $\hat{r} = -\hat{a}_1$  parametrów schematu zastępczego.

2. Błąd względny (graniczny)  $\delta u$  pomiaru napięcia  $u_i$  jest istotnie mniejszy niż błąd względny (graniczny)  $\delta i$  pomiaru prądu  $i_i$ , wtedy przyjmuje się  $\delta u \approx 0$  i z (7.35) po przekształceniach otrzymuje

$$i_i = \frac{e}{r} - \frac{1}{r}u_i + \varepsilon_{i_i}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (7.37)$$

gdzie  $\varepsilon_{i_i}$  jest błędem pomiaru prądu  $i_i$ . Kładąc  $y_i = i_i$ ,  $x_i = u_i$ ,  $a_0 = e/r$  oraz  $a_1 = -1/r$  otrzymuje się równania eksperymentu  $y_i = a_0 + a_1x_i + \varepsilon_{i_i}$ , tak jak w punkcie 1. Ze wzorów (7.29) i (7.30) na regresję liniową można wyznaczyć estymatory  $\hat{a}_0$  oraz  $\hat{a}_1$ , a następnie  $\hat{r} = -1/\hat{a}_1$  oraz  $\hat{e} = \hat{a}_0\hat{r} = -\hat{a}_0/\hat{a}_1$ .

3. Jeśli błędy względne pomiaru napięć i prądów mają zbliżone wartości,  $\delta u_i \approx \delta i_i$ , to można stosować inne miary odległości funkcji od obserwacji, np. opartą na metryce euklidesowej. Szczegółowe omówienie różnych metod estymacji, gdy obie zmienne obciążone są błędami podał Wald [109]. Można również, jak w przykładzie 7.2, wyznaczyć oceny parametrów, wykorzystując sposoby podane w punktach 1 i 2 i jako ostateczną ocenę przyjąć średnią arytmetyczną lub średnią geometryczną otrzymanych ocen.

Przedstawione tu rozwiązania nie wyczerpują wszystkich możliwości metod regresji w rozwiązaniu tego zagadnienia. Na przykład w celu poprawy dokładności pomiarów można zastosować, jako  $r_0$ , regulowany precyzyjny rezystor wzorcowy o większej dokładności niż pomiary prądu i napięcia. Wtedy wykorzystując zależność  $u = ir_0$ , można w równaniu (7.35) wyeliminować jedną ze zmiennych  $u$  lub  $i$ . Eliminuje się tę zmienną, która mierzona jest z większym błędem – dla ustalenia uwagi przyjęto, że jest nią prąd  $i$ . Następnie dla różnych wartości  $r_0$  rezystora  $r_0$  wykonuje się pomiary napięć  $u_i$ . Kładąc we wzorze (7.35)  $i = u/r_0$ , otrzymuje się równanie

$$u = e - \frac{u}{r_0} r.$$

Wzór ten sprowadza się do modelu regresji liniowej. Jeśli błąd względny pomiaru napięcia jest większy niż dokładność wzorca rezystancji  $r_0$ , to wzór ten można przedstawić w postaci

$$u = \frac{r_0}{r + r_0} e + \varepsilon_u, \quad (7.38)$$

gdzie  $\varepsilon_u$  jest błędem pomiaru napięcia. Równanie (7.38) nie jest liniowe względem parametru  $r$ , więc estymacja parametrów wymaga nieliniowych metod regresji.

Jednak, w tym szczególnym przypadku, możliwa jest transformacja do modelu liniowego. W tym celu wyrażenie (7.38) można przekształcić do postaci

$$\frac{1}{u} = \frac{1}{e} + \frac{r}{e} \frac{1}{r_0} + \varepsilon, \quad (7.39)$$

gdzie  $\varepsilon$  jest błędem pomiaru odwrotności napięcia  $u$ . Kładąc  $y = 1/u$ ,  $x = 1/r_0$ ,  $a_0 = 1/e$  oraz  $a_1 = r/e$ , otrzymuje się  $y = a_0 + a_1x + \varepsilon$ , a więc model regresji liniowej prostej. Ze wzorów (7.29) i (7.30) wyznacza się estymatory  $\hat{a}_0$  oraz  $\hat{a}_1$  metodą regresji i następnie estymatory  $\hat{e} = 1/\hat{a}_0$  oraz  $\hat{r} = \hat{a}_1\hat{e} = \hat{a}_1/\hat{a}_0$ .

Należy tu jednak uwzględnić fakt, że wraz z transformacją wartości mierzonych,  $u \rightarrow 1/u$  transformują się również błędy pomiarów (obserwacji) i jeśli w podanym przykładzie pomiary napięć  $u$  są jednakowej dokładności,  $D^2[u_i] = \text{const}$ , to ich odwrotności  $y_i = 1/u_i$  nie są już jednakowej dokładności, co prowadzi do ogólnej metody NK. Niezbędne jest w tym przypadku wyznaczenie wag pomiarów. Zagadnienie to omówiono w dalszych rozdziałach.

Na przykładzie wyznaczania modelu matematycznego akumulatora pokazano, że w wielu przypadkach rozwiązanie konkretnego zagadnienia może być zrealizowane w różny sposób, w zależności od własności obserwacji i własności modelu.

## 7.7. Własności estymatora parametrów i wyrównanych ocen

Zbadamy wybrane własności statystyczne estymatorów, a zwłaszcza ich obciążenie i wariancję.

Jeśli obserwacje nie są obciążone,  $\mathcal{E}[\varepsilon] = \mathbf{0}$ , założenie 1, to

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\hat{\mathbf{a}}] &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathcal{E}[\mathbf{y}] \\ &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} \\ &= \mathbf{a}, \end{aligned} \quad (7.40)$$

a to oznacza, że  $\hat{\mathbf{a}}$  jest nieobciążonym estymatorem parametrów  $\mathbf{a}$ .

Jeśli obserwacje  $y_i$  nie są skorelowane i mają taką samą wariancję (założenia 2 i 3, co zapisujemy  $\mathcal{D}[\varepsilon] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ ), to macierz kowariancji ocen wynosi

$$\begin{aligned} \mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}] &= \mathcal{D}[(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}] \\ &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathcal{D}[\mathbf{y}] \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \\ &= \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^T \mathbf{X}) (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \\ &= \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Przy przejściu z pierwszej do drugiej linii podanego wzoru wykorzystano „prawo propagacji błędów pomiarów”,  $\mathcal{D}[\mathbf{C}\mathbf{y}] = \mathbf{C}\mathcal{D}[\mathbf{y}]\mathbf{C}^T$ , natomiast przy przejściu z drugiej do trzeciej linii, zależność  $\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}]$ .

Ze wzoru (7.41) wynika, że oceny  $\hat{a}_j$  są na ogół skorelowane, mimo że obserwacje  $y_i$  nie są skorelowane. Wyjątek stanowi jedynie przypadek, w którym kolumny macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$  są ortogonalne, o czym będzie mowa w dalszej części tego rozdziału.

Można wykazać, por. [98], że wyrównane oceny  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}$  są najlepszymi nieobciążonymi liniowymi estymatorami (estymatorami BLUE od ang. *Best Linear Unbiased Estimate*). Jeśli dodatkowo założy się, że „błędy”  $\varepsilon_i$  mają rozkład normalny  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ , co można zapisać  $\mathbf{y} \sim N_n(\mathbf{X}\mathbf{a}, \sigma^2\mathbf{I}_n)$ , to estymatory  $\hat{\mathbf{a}}$  parametrów mają minimalne wariancje w klasie wszystkich nieobciążonych estymatorów – nie tylko liniowych (por. [89]).

Znajomość estymatorów  $\hat{\mathbf{a}}$  pozwala na ocenę odpowiedzi układu  $\mathbf{y}$  dla dowolnych wartości wielkości wejściowych  $x_1, \dots, x_p$  (z obszaru określoności modelu) za pomocą wzoru

$$\hat{y} = \hat{a}_1x_1 + \dots + \hat{a}_px_p. \quad (7.42)$$

Ze wzoru (7.42) można wyznaczyć wyrównane oceny odpowiedzi dla wartości wejściowych  $x_{i1}, \dots, x_{ip}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , tj. w punktach pomiarowych. Ocena  $\hat{y}_i$  dla  $i$ -tego ciągu wartości wejściowych wynosi  $\hat{y}_i = \hat{a}_1x_{i1} + \dots + \hat{a}_px_{ip}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , a wektor tych ocen, w notacji macierzowej,  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}$ . Dla każdego ciągu wartości wejściowych są dwie oceny odpowiedzi układu: bezpośrednie obserwacje  $y_i$  oraz wyrównane oceny  $\hat{y}_i$  (w zapisie macierzowym  $\mathbf{y}$  oraz  $\hat{\mathbf{y}}$ ). Porównamy „efektywność” tych ocen.

Zgodnie z założeniem, wszystkie bezpośrednie obserwacje mają taką samą wariancję  $D^2[y_i] = \sigma^2$ ,  $i = 1, \dots, n$  lub w zapisie macierzowym  $\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \sigma^2\mathbf{I}_n$ . Macierz kowariancji wektora  $\hat{\mathbf{y}}$  wyrównanych ocen określona jest wzorem

$$\begin{aligned} \mathcal{D}[\hat{\mathbf{y}}] &= \mathcal{D}[\mathbf{P}\mathbf{y}] = \mathbf{P}\mathcal{D}[\mathbf{y}]\mathbf{P}^T \\ &= \sigma^2\mathbf{P}\mathbf{I}_n\mathbf{P}^T = \sigma^2\mathbf{I}\mathbf{P} \\ &= \sigma^2\mathbf{P}, \end{aligned} \quad (7.43)$$

stąd wariancje wyrównanych ocen wynoszą

$$D^2[\hat{y}_i] = p_{ii}\sigma^2, \quad i = 1, \dots, n, \quad (7.44)$$

gdzie  $p_{ii}$  jest  $i$ -tym elementem przekątnej macierzy  $\mathbf{P}$ . Można wykazać ([50], s. 196), że elementy  $p_{ii}$  spełniają nierówność

$$\frac{1}{n} \leq p_{ii} \leq 1.$$

Wynika stąd, że wariancja każdej wyrównanej oceny jest mniejsza lub co najwyżej równa wariancji bezpośredniej obserwacji wynoszącej  $D^2[y_i] = \sigma^2$ .

Interesujące więc jest porównanie średniej wartości,  $\text{average}(D^2[\hat{y}_i])$ , wyrównanych wariancji z wariancją bezpośrednich obserwacji  $D^2[y_i]$  równej  $\sigma^2$ . Ślad macierzy idempotentnej jest równy jej rzędowi (por. A.1.5). Ponieważ  $\mathbf{P}$  jest macierzą idempotentną rzędu  $p$ , więc  $\text{tr } \mathbf{P} = p$ , a stąd wynika, że suma wariancji wyrównanych ocen jest równa

$$\sum_{i=1}^n D^2[\hat{y}_i] = \sigma^2 \text{tr } \mathbf{P} = \sigma^2 p. \quad (7.45)$$

Wszystkich wyrównanych ocen  $\hat{y}_i$  jest  $n$  – tyle samo co bezpośrednich obserwacji, więc średnia wariancja wyrównanych ocen jest równa

$$\text{average}(D^2[\hat{y}_i]) = \frac{p}{n} \sigma^2 = \frac{p}{n} D^2[y_i]. \quad (7.46)$$

Wynika stąd, że średnia wariancja wyrównanej oceny jest  $p/n$  razy mniejsza niż wariancja  $\sigma^2$  bezpośrednich obserwacji. Na przykład, jeśli liczba obserwacji jest czterokrotnie większa niż liczba parametrów,  $p/n = 1/4$ , to średnia wariancja wyrównanej oceny jest czterokrotnie mniejsza niż wariancja bezpośrednich obserwacji.

Teoretycznie poprzez zwiększanie liczby obserwacji można w dowolnym stopniu zmniejszać wariancje wyrównanych ocen, gdyż wtedy  $p/n \rightarrow 0$ . Jednak, w praktycznych zastosowaniach, należy się liczyć z występowaniem błędów systematycznych bezpośrednich obserwacji oraz błędem modelu. Błędy systematyczne nie są eliminowane przez zwiększanie liczby obserwacji i stosowanie zbyt dużej ich liczby nie przynosi istotnej poprawy dokładności. Błędy systematyczne zwykle nie są znane. Jest to podobna sytuacja jak w pomiarze bezpośrednim wartości prawdziwej  $a$ , gdzie teoretycznie, zwiększając liczbę pomiarów i obliczając średnią arytmetyczną, można do zera minimalizować błąd pomiaru i stąd wyciągnąć błędny wniosek, że zamiast kupować drogie narzędzie pomiarowe można to samo osiągnąć, stosując wielokrotne pomiary narzędziem pomiarowym o mniejszej dokładności. Jednak narzędzia pomiarowe mają zwykle znaczną składową systematyczną błąd pomiaru, a składowa systematyczna jest taka sama w każdym pomiarze i średnia arytmetyczna jej nie eliminuje.

## 7.8. Estymacja wariancji $\sigma^2$ pojedynczej obserwacji

Wyznaczenie wariancji estymatorów  $\hat{\mathbf{a}}$  parametrów modelu oraz wariancji estymatorów wyrównanych ocen wymaga znajomości wariancji  $\sigma^2$  bezpośrednich obserwacji (por. wzór(7.41)). Tymczasem zwykle nie jest ona znana. Podstawą do wyznaczenia wariancji pojedynczej obserwacji jest twierdzenie 7.1 [100].

**Twierdzenie 7.1.** Jeśli równanie eksperymentu  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$  spełnia warunki:  $\mathcal{E}[\mathbf{y}] = \mathbf{X}\mathbf{a}$ , gdzie  $\mathbf{X}$  jest macierzą o wymiarze  $n \times p$ , rzędu  $p$ ,  $p \leq n$ , macierz kowariancji wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  jest równa  $\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ , to statystyka

$$s^2 = \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})}{n - p} = \frac{\mathbf{r}^T \mathbf{r}}{n - p} = \frac{RSS}{n - p} \quad (7.47)$$

jest nieobciążonym estymatorem wariancji  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji.

**Dowód.** Zgodnie ze wzorem (7.20) wektor reszt można przedstawić w formie

$$\mathbf{r} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y},$$

stąd

$$\begin{aligned} (n - p)s^2 &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}) = \mathbf{y}^T(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y} = \mathbf{y}^T(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})^2\mathbf{y} \\ &= \mathbf{y}^T(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (7.48)$$

Po uwzględnieniu równania (B.7) otrzymuje się

$$E[\mathbf{y}^T(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}] = \sigma^2 \text{tr}(\mathbf{I}_n - \mathbf{P}) + \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{X}\mathbf{a} = \sigma^2(n - p),$$

a stąd po uwzględnieniu wzoru (7.48)  $E[s^2] = \sigma^2$ , co kończy dowód.  $\square$

**Przykład 7.4.** Załóżmy, że eksperyment polega na  $n$ -krotnym bezpośrednim pomiarze parametru  $a$ ,  $y_i = a + \varepsilon_i$ , a wyniki  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$  spełniają określone w twierdzeniu 7.1 warunki, wtedy  $\mathbf{X} = [1, 1, \dots, 1]^T$ , a stąd  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = n$ ,  $\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n y_i$  i po podstawieniu do wzoru  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  otrzymuje się ocenę parametru  $\hat{a} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = \bar{y}$  oraz, na mocy (7.47), ocenę wariancji  $\sigma^2$

$$s^2 = \frac{1}{n - 1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2.$$

Obie oceny są więc zgodne ze znanymi wzorami ocen pomiarów bezpośrednich.

$\square$

## 7.9. Funkcje gęstości estymatorów

Przy wyprowadzaniu estymatorów metodą NK wykorzystano założenia (a), (b) i (c). Jeśli dodatkowo założy się, że obserwacje  $\mathbf{y}$  lub, co jest równoważne, błędy mają łączny rozkład normalny,  $\varepsilon \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ , założenie (d), to można wyznaczyć funkcję gęstości rozkładów poszczególnych statystyk wykorzystywanych w analizie regresji na podstawie twierdzenia 7.2

**Twierdzenie 7.2.** Jeśli obserwacje  $\mathbf{y}$  mają rozkład normalny,  $\mathbf{y} \sim N_n(\mathbf{X}\mathbf{a}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ , gdzie  $\mathbf{X}$  jest macierzą o wymiarze  $n \times n$  rzędu  $p$ , to

1.  $\hat{\mathbf{a}} \sim N_p(\mathbf{a}, \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1})$ .
2.  $(\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X}(\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}) \sim \chi_p^2$ .
3.  $\hat{\mathbf{a}}$  jest losowo niezależne od  $s^2$ .
4.  $RSS/\sigma^2 = (n - p)S^2/\sigma^2 \sim \chi_{n-p}^2$ .

Dowód pomijamy. Zainteresowany czytelnik może go znaleźć w cytowanej literaturze, np. [98]. Rozkład estymatorów wykorzystywany jest w analizie własności estymatorów, testowaniu hipotez statystycznych itd.

## 7.10. Planowanie optymalnego eksperymentu

Wartości regresorów,  $x_{ij}$ , (elementów macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$ ) wpływają na własności estymatorów, a zwłaszcza na ich wariancję, por. wzór (7.41). Dobór takich wartości regresorów,  $x_{ij}$ , które zapewniają pożądane własności estymatorów nosi nazwę *planowania optymalnego eksperymentu*. Przedstawimy wybrane metody takiego doboru.

W punkcie 7.7 wykazano, że macierz kowariancji ocen  $\hat{\mathbf{a}}$  parametrów modelu określona jest wzorem  $\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}] = \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ , stąd wariancje  $D^2[\hat{a}_j]$  ocen są elementami przekątnej macierzy kowariancji. Planowanie eksperymentu polega zwykle na takim doborze wartości  $x_{ij}$ , które minimalizują wariancje ocen. Jednak określenie „optymalny plan eksperymentu”, czy minimalizacja wariancji ocen nie jest jednoznaczne, gdyż ocena może dotyczyć różnych wielkości, a zwłaszcza: łącznie wszystkich parametrów modelu, wyróżnionego parametru modelu, odpowiedzi układu dla założonych wartości zmiennych objaśniających, zadanej funkcji odpowiedzi układu, średniej wariancji wszystkich parametrów itd. Dlatego eksperymentator powinien sprecyzować kryterium optymalizacji odpowiednie do założonego celu analizy. Na przykład, gdy jeden z parametrów modelu jest stałą fizyczną, wówczas



podstawowym celem eksperymentu może być „najlepsza” ocena wartości tej stałej i odpowiednim kryterium optymalizacji jest minimalizacja wariancji tej oceny.

Jeśli nie określono własnego kryterium optymalizacji, to można odwołać się do jednego z kilku uniwersalnych kryteriów, z których najczęściej stosuje się:

- *plan D-optymalny* polegający na minimalizacji wyznacznika  $|D[\hat{\mathbf{a}}]|$  macierzy kowariancji estymatorów parametrów lub, co jest równoważne, maksymalizowaniu wyznacznika  $|\mathbf{X}^T \mathbf{X}|$ ,
- *plan A-optymalny* polegający na minimalizacji średniej wariancji estymatorów parametrów modelu, co sprowadza się do minimalizacji śladu macierzy  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ ,
- *plan E-optymalny* polegający na minimalizacji największej wariancji estymatorów parametrów modelu, co sprowadza się do minimalizacji maksymalnej wartości własnej macierzy  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ ,
- *plan G-optymalny* polegający na minimalizacji największej (średniej) wariancji wyrównanych odpowiedzi modelu  $\hat{\mathbf{y}}$ .

Pojęcie planu *D*-optymalnego wprowadził Kiefer [63]. Jego własności analizowane były przez wielu autorów i opracowano szereg algorytmów numerycznych realizujących *D* optymalne plany. Przegląd ich można znaleźć w pracach Fiedorowa [28]. Dla dużej liczby wielkości wejściowych wyznaczenie macierzy eksperymentu realizującej *D* optymalny plan jest złożonym zadaniem numerycznym, co ogranicza zastosowanie tej metody.

Plan *A*-optymalny oparty jest na minimalizacji śladu macierzy  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ , prowadzi, w większości przypadków do ortogonalnej macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$ , co wykazano w dalszej części. Ponadto wykazano, że estymacja parametrów dla ortogonalnej macierzy  $\mathbf{X}$  charakteryzuje się wieloma innymi pozytywnymi cechami. Te zalety powodują, że zalecaną metodą jest optymalizacja przez dobór ortogonalnej macierzy  $\mathbf{X}$ .

Plan *E*-optymalny jest stosowany w przypadkach, gdy celem optymalizacji jest minimalizowanie największej wariancji estymatorów parametrów. Kryterium to znajduje zastosowanie, gdy celem jest minimalizowanie elementu o największym błędzie. Zadanie jest złożone numerycznie.

Plan *G*-optymalny (nazywany również planem *Y*-optymalnym) polega na takim doborze macierzy eksperymentu, aby wariancja estymatorów odpowiedzi układu była minimalna. Plan *G* optymalny można realizować w różny sposób, a w szczególności minimalizować średnią wariancję wyrównanych ocen, co na mocy (7.43) sprowadza się do minimalizacji śladu macierzy  $\mathbf{P} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ , tj.  $\sum_{i=1}^n p_{ii}$ . Inną modyfikacją planu *G*-optymalnego jest minimalizacja warian-

cji dla założonej wartości wielkości wejściowej. Taki plan znajduje zastosowanie w prognozie. Realizacja planu  $G$ -optymalnego jest również złożonym numerycznym zadaniem.

Podsumowując ten krótki przegląd podstawowych planów, należy stwierdzić, że z praktycznych względów szczególnie korzystny jest plan  $A$ -optymalny. Wykazano, że zadanie sprowadza się, w wielu wypadkach, do stosowania „ortogonalnej macierzy eksperymentu”, a to pociąga za sobą kilka innych pozytywnych własności. Ponadto plan  $A$ -optymalny jest zwykle prostszy numerycznie niż pozostałe plany. Dlatego omówimy szerzej realizację tego planu.

Wykażemy najpierw, że można dowolnie zmniejszać wariancje estymatorów parametrów  $\hat{a}_j$  modelu, zwiększając wartości regresorów  $x_{ij}$ . Niech  $\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}]$  będzie macierzą kowariancji estymatorów  $\hat{\mathbf{a}}$  otrzymanych dla macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$ . Jeśli wszystkie elementy macierzy eksperymentu pomnoży się przez  $\lambda$ , to nowa, „powiększona”, macierz eksperymentu jest równa  $\mathbf{X}^* = \lambda\mathbf{X}$ , a macierz kowariancji estymatorów  $\hat{\mathbf{a}}^*$  wyznaczonych dla powiększonej macierzy wynosi

$$\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}^*] = \sigma^2(\lambda\mathbf{X}^T\lambda\mathbf{X})^{-1} = \sigma^2\frac{(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}}{\lambda^2}.$$

Więc elementy macierzy kowariancji, a zwłaszcza wariancje  $D^2[\hat{a}_j^*]$  estymatorów leżące na przekątnej, zmniejszyły się  $\lambda^2$  razy i jeśli  $\lambda \rightarrow \infty$ , to  $D^2[\hat{a}_j^*] \rightarrow 0$ ,  $j = 1, \dots, p$ .

Można zatem dowolnie zmniejszać wariancje estymatorów parametrów, zwiększając wartości regresorów  $x_{ij}$ . Jednak takie podejście nie rozwiązuje w pełni problemu, gdyż regresory są zwykle wielkościami fizycznymi i mogą przyjmować wartości tylko z ograniczonego obszaru. Ponadto w praktyce, gdy rośnie wartość wielkości  $x_{ij}$ , wtedy zwykle rośnie, co do modułu, wartość odpowiedzi  $y_i$ , a to zwykle pociąga za sobą wzrost wariancji pojedynczej obserwacji. Dlatego należy rozważyć również zagadnienie doboru regresorów, przy nałożeniu ograniczeń na ich wartości. Najczęściej narzuca się warunek, żeby suma kwadratów wszystkich wartości  $x_{1j}, \dots, x_{nj}$ ,  $j$ -tej wielkości,  $j = 1, \dots, p$ , nie przekraczała zadanej liczby, powiedzmy  $c_j^2$ . Zadanie to można sformułować następująco (por. np. Hotteling [55]):

**Twierdzenie 7.3.** Niech  $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_p]^T$  będzie macierzą eksperymentu, której kolumny  $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_p$ , spełniają warunki  $\mathbf{X}_j^T\mathbf{X}_j = \|\mathbf{X}_j\|^2 = c_j^2$ , wtedy wariancje estymatorów spełniają nierówność

$$D^2[\hat{a}_j] \geq \frac{\sigma^2}{c_j^2} = \frac{\sigma^2}{\|\mathbf{X}_j\|^2}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (7.49)$$

przy czym równość jest osiągnięta (wariancja jest minimalna), gdy kolumny macierzy  $\mathbf{X}$  są ortogonalne, tj. gdy  $\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_k = 0$ , jeśli  $j \neq k$ .

Dowód przeprowadzimy dla szczególnego przypadku, dwóch regresorów,  $p = 2$ ,  $\mathbf{a} = [a_1, a_2]^T$  (uogólnienie na dowolną liczbę regresorów jest naturalne). Wtedy macierz eksperymentu ma dwie kolumny  $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2]^T$ , gdzie  $\mathbf{X}_1 = [x_{11}, \dots, x_{p1}]^T$  jest pierwszą, a  $\mathbf{X}_2 = [x_{12}, \dots, x_{p2}]^T$  drugą kolumną macierzy  $\mathbf{X}$ . Iloczyn

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1^T \\ \mathbf{X}_2^T \end{bmatrix} [\mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2] = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2 \\ \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2 \end{bmatrix},$$

a macierz odwrotna

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2 - (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2)^2} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2 & -\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2 \\ -\mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_1 & \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 \end{bmatrix},$$

gdzie wykorzystano równość  $\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2 = \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_1$ . Wariancja  $D^2[\hat{a}_1]$  jest pierwszym elementem leżącym na przekątnej macierzy kowariancji  $\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}] = \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ , więc

$$D^2[\hat{a}_1] = \sigma^2 \frac{\mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2}{\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2 - (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2)^2}. \quad (7.50)$$

Obie składowe mianownika,  $\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1$ ,  $\mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2$  i  $(\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2)^2$ , są nieujemne, gdyż  $\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j = \|\mathbf{X}_j\|^2$ , ponadto  $\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j = c_j^2$ ,  $j = 1, 2$ .

Z nierówności Schwarza

$$(\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2)^2 \leq \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2, \quad (7.51)$$

wynika, że mianownik prawej strony równania (7.50) jest nieujemny, więc pomijając w nim wyrażenie  $(\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2)^2$ , otrzymano następujące dolne ograniczenie wariancji estymatora

$$D^2[\hat{a}_1] \geq \frac{\sigma^2}{\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1} = \frac{\sigma^2}{\|\mathbf{X}_1\|^2}, \quad (7.52)$$

co dowodzi nierówności (7.49) dla  $j = 1$ .

Wariancja  $D^2[\hat{a}_1]$  określona wzorem (7.50) osiąga minimum, przy nałożonych warunkach  $\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j = c_j^2$ ,  $j = 1, 2$ , gdy wyrażenie  $(\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2)^2$  osiąga minimum, a to następuje, gdy  $\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2 = 0$  – gdy kolumny  $\mathbf{X}_1$  i  $\mathbf{X}_2$  są ortogonalne.

Jeśli  $\mathbf{X}$  jest macierzą ortogonalną,  $\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_2 = 0$ , to uwzględniając ten warunek we wzorze (7.50), otrzymuje się

$$D^2[\hat{a}_1] = \frac{\sigma^2}{\|\mathbf{X}_1\|^2},$$

więc wariancja estymatora przyjmuje najmniejszą możliwą wartość (por. nierówność 7.52)).

To kończy dowód dla wariancji  $\hat{a}_1$ . Łatwo zauważyć, że ze względu na symetrię estymatorów  $\hat{a}_1$  i  $\hat{a}_2$  analogiczne wzory spełnione są dla wariancji  $D^2[\hat{a}_2]$ .

Podobnie można wykazać, że twierdzenie 7.3 jest prawdziwe dla dowolnej liczby parametrów  $p$ . Oznacza to, że dla każdej macierzy eksperymentu

$$D^2[\hat{a}_j] \geq \frac{\sigma^2}{\|\mathbf{X}_j\|^2}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (7.53)$$

natomiast dla ortogonalnej macierzy eksperymentu

$$D^2[\hat{a}_j] = \frac{\sigma^2}{\|\mathbf{X}_j\|^2}, \quad j = 1, \dots, p. \quad (7.54)$$

□

Z twierdzenia 7.3 i poprzednich rozważań wynika następujący ważny wniosek:

*Należy tak dobierać wartości elementów macierzy eksperymentu, aby jej kolumny miały maksymalne normy,  $\|\mathbf{X}_j\|^2 = c_j^2 = \max$  i jednocześnie były wzajemnie ortogonalne  $\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j = 0$  dla  $i \neq j$ . W przypadku gdy ze względu na warunki eksperymentu nie można zrealizować ortogonalnych kolumn, wówczas należy minimalizować moduł iloczynów skalarnych  $|\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j|$ .*

### 7.11. Estymacja parametrów dla ortogonalnej struktury macierzy eksperymentu

W modelu  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$  przedstawiono macierz eksperymentu w postaci  $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_p]$ , gdzie  $\mathbf{X}_j$ ,  $j = 1, \dots, p$  są kolejnymi kolumnami macierzy. Model  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$  może być teraz zapisany w postaci kombinacji liniowej kolejnych kolumn

$$\mathbf{y} = a_1 \mathbf{X}_1 + \dots + a_p \mathbf{X}_p + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (7.55)$$

Założmy, że kolumny  $\mathbf{X}_j$  macierzy  $\mathbf{X}$  są wzajemnie ortogonalne,  $\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_k = 0$ , jeśli  $j \neq k$ , to  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest macierzą diagonalną

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{X}_p^T \mathbf{X}_p \end{bmatrix},$$

a jej odwrotna

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2)^{-1} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\mathbf{X}_p^T \mathbf{X}_p)^{-1} \end{bmatrix}.$$

Natomiast drugi człon estymatora  $\hat{\mathbf{a}}$ , (por. (7.13)) można zapisać

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1^T \mathbf{y} \\ \mathbf{X}_2^T \mathbf{y} \\ \cdots \\ \mathbf{X}_p^T \mathbf{y} \end{bmatrix}.$$

Po podstawieniu tych wyników do  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  otrzymuje się

$$\hat{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \vdots \\ \hat{a}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\mathbf{X}_1^T \mathbf{X}_1)^{-1} \mathbf{X}_1^T \mathbf{y} \\ (\mathbf{X}_2^T \mathbf{X}_2)^{-1} \mathbf{X}_2^T \mathbf{y} \\ \vdots \\ (\mathbf{X}_p^T \mathbf{X}_p)^{-1} \mathbf{X}_p^T \mathbf{y} \end{bmatrix},$$

więc estymator każdego parametru  $a_j$  można wyznaczyć niezależnie od estymatorów pozostałych parametrów za pomocą wzoru

$$\hat{a}_j = \frac{\mathbf{X}_j^T \mathbf{y}}{\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (7.56)$$

natomiast wariancja estymatorów jest określona wyrażeniem (7.54).

Wykazano poprzednio, że estymatory w modelach z ortogonalną macierzą eksperymentu minimalizują wariancje ocen i są, pod tym względem, optymalne. Z otrzymanego teraz wyniku widać, że mają one kilka innych zalet, z których najważniejsze to:

- dla każdego  $j = 1, \dots, p$  estymator  $\hat{a}_j$  zależy tylko od odpowiadających mu regresorów – kolumny  $\mathbf{X}_j$ , a to oznacza, że ocena  $\hat{a}_j$  nie zmieni się jeśli dodamy parametr lub usuniemy pewien parametr,
- obliczenia numeryczne są wyjątkowo proste, odwracanie macierzy sprowadza się do liczenia odwrotności liczb (dla dowolnej macierzy eksperymentu odwracanie macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  łączy się często z dużymi problemami numerycznymi),

- estymatory  $\hat{a}_j$ ,  $j = 1, \dots, p$  nie są skorelowane, co wynika z tego, że macierz  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest diagonalna, więc odwrotna do niej jest również diagonalna.

Obliczymy teraz wartość różnicowej sumy kwadratów,  $RSS$ , która odgrywa ważną rolę w analizie dopasowania obserwacji do modelu. Na mocy wzoru (7.21) otrzymano

$$RSS = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - [\hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p] \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1^T \\ \dots \\ \mathbf{X}_p^T \end{bmatrix} \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j \mathbf{X}_j^T \mathbf{y}.$$

Jeśli przekształci się równość (7.56) do postaci  $\mathbf{X}_j^T \mathbf{y} = \hat{a}_j \mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j$  i podstawią ją do ostatniego członu podanego wzoru, to otrzymuje się następującą zależność

$$RSS = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j^2 \mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \sum_{j=1}^p \hat{a}_j^2 \|\mathbf{X}_j\|^2. \quad (7.57)$$

Wynika stąd, że obliczanie różnicowej sumy kwadratów,  $RSS$ , jest znacznie prostsze dla ortogonalnej macierzy eksperymentu niż dla dowolnej macierzy z ogólnego wzoru (7.22). Ponadto postać wzoru (7.57) pozwala na łatwą ocenę wpływu poszczególnych parametrów modelu na dokładność jego dopasowania do obserwacji. Wynika to z tego, że im większa jest wartość składnika  $\hat{a}_j^2 \|\mathbf{X}_j\|^2$ , tym w większym stopniu  $j$ -ty parametr „zmniejsza” wartość  $RSS$ , więc ma większy udział w dopasowaniu modelu do obserwacji. Wykorzystując tę własność wzoru (7.57), można uszeregować parametry  $a_j$  według kryterium ich wpływu na dopasowanie – od największej wartości  $\hat{a}_j^2 \|\mathbf{X}_j\|^2$  do najmniejszej, a to ułatwia wykrywanie nieistotnych (nadmiarowych) parametrów. Parametr  $a_j$ , dla którego wyrażenie  $\hat{a}_j^2 \|\mathbf{X}_j\|^2$  jest znacznie mniejsze od odpowiednich wyrażen dla pozostałych parametrów może być nieistotny i należy sprawdzić hipotezę, że jest on równy zeru. Zadaniem wykrywania nieistotnych parametrów zajęto się w dalszej części monografii.

**Przykład 7.5.** Chcemy wyznaczyć, możliwie najdokładniej, cztery masy  $a_1, a_2, a_3$  oraz  $a_4$  za pomocą wagi dwuszalkowej, dokonując czterech ważeń. Pomiary można przeprowadzić w różny sposób: mierzyć osobno każdą masę albo zmierzyć pewne kombinacje mas; np. sumę kilku mas, czy różnicę dwóch wybranych mas. Powstaje więc pytanie czy istnieje „optymalny” schemat ważeń, a jeśli tak, to jak go wyznaczyć. Wykażemy, że można taki schemat ważeń określić, wykorzystując do tego celu wnioski z twierdzenia 7.3.

Stosując równania regresji liniowej, można schemat  $i$ -tego pomiaru,  $i = 1, 2, 3, 4$ , zapisać za pomocą następującego równania eksperymentu

$$y_i = a_1x_{i1} + a_2x_{i2} + a_3x_{i3} + a_4x_{i4} + \varepsilon_i,$$

gdzie  $y_i$  jest wynikiem, a  $\varepsilon_i$  błędem,  $i$ -tego pomiaru. Regresory  $x_{ij}$  mogą tu przyjąć jedną z trzech wartości: 1,  $-1$  lub 0,  $x_{ij} \in \{-1, 0, 1\}$ , w zależności od udziału masy  $a_j$  w  $i$ -tym pomiarze. Jeśli w  $i$ -tym pomiarze masa  $a_j$  nie bierze udziału, to kładziemy  $x_{ij} = 0$ , jeśli bierze udział i jest położona po przeciwnej stronie niż odważniki, to kładziemy  $x_{ij} = 1$ , a jeśli po tej samej, to  $x_{ij} = -1$ . Jeśli na przykład w pierwszym pomiarze na lewej szalce znajduje się zarówno masa  $a_1$ , jak i odważniki wzorcowe, a na prawej masy  $a_2$  oraz  $a_3$ , to odpowiednie równanie eksperymentu przyjmie postać  $y_1 = -a_1 + a_2 + a_3 + \varepsilon_1$ , gdzie  $x_{11} = -1$ ,  $x_{12} = 1$ ,  $x_{13} = 1$ ,  $x_{14} = 0$ .

Ogólne równania eksperymentu w formie macierzowej, dla czterech ważeń, można zapisać

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \end{bmatrix}.$$

Optymalizacja eksperymentu polega tu na takim doborze elementów  $x_{ij}$  macierzy  $\mathbf{X}$ , aby otrzymać minimalną wariancję estymatorów parametrów. Na podstawie twierdzenia 7.3 należy maksymalizować normy wektorów (por. (7.54)), co w tym przypadku oznacza, że  $x_{ij}$  powinno być równe 1 lub  $-1$ . Ponadto należy tak dobrać elementy  $x_{ij}$ , aby kolumny macierzy  $\mathbf{X}$  tworzyły wektory wzajemnie ortogonalne. Wartości  $x_{ij}$  dobiera się, wypełniając kolejne kolumny macierzy  $\mathbf{X}$ . Najpierw wypełnia się pierwszą kolumnę jedynekami, stąd  $\mathbf{X}_1 = [1 \ 1 \ 1 \ 1]^T$ . Z warunku ortogonalności wynika, że każda następna kolumna powinna zawierać dwa elementy o wartości 1 i dwa o wartości  $-1$ . Zgodnie z tym druga kolumna może być następująca:  $\mathbf{X}_2 = [1 \ 1 \ -1 \ -1]^T$ , trzecia  $\mathbf{X}_3 = [1 \ -1 \ -1 \ 1]^T$ ; łatwo można sprawdzić, że jest ona ortogonalna zarówno do pierwszej, jak i do drugiej kolumny. Podobnie postępując, wyznacza się czwartą kolumnę  $\mathbf{X}_4 = [1 \ -1 \ 1 \ -1]^T$ . Stąd macierz eksperymentu

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (7.58)$$

Wiersze tej macierzy określają sposób przeprowadzania pomiarów (przypomnijmy, że kolumny odpowiadają parametrom, a wiersze pomiarom). Na przykład trzeci wiersz macierzy jest równy  $[x_{31}, x_{32}, x_{33}, x_{34}] = [1 - 1 - 1 \ 1]$ , co oznacza, że w trzecim pomiarze masy  $a_1$  oraz  $a_4$  umieszczone są na przeciwnej szalce niż są umieszczone odważniki wzorcowe, a masy  $a_2$  oraz  $a_3$  po tej samej stronie.

Stosując wzór (7.56), otrzymuje się następujące estymatory poszczególnych mas

$$\begin{aligned}\hat{a}_1 &= \frac{(y_1 + y_2 + y_3 + y_4)}{4}, \\ \hat{a}_2 &= \frac{(y_1 + y_2 - y_3 - y_4)}{4}, \\ \hat{a}_3 &= \frac{(y_1 - y_2 - y_3 + y_4)}{4}, \\ \hat{a}_4 &= \frac{(y_1 - y_2 + y_3 - y_4)}{4},\end{aligned}$$

natomiast ze wzoru (7.54) otrzymamy oceny wariancji tych estymatorów

$$D^2[\hat{a}_j] = \frac{\sigma^2}{4}, \quad j = 1, 2, 3, 4.$$

Wariancje ocen w planie ortogonalnym są cztery razy mniejsze niż wariancje bezpośrednich pomiarów, które są równe  $\sigma^2$ . Stosowanie ortogonalnej macierzy eksperymentu pozwoliło na czterokrotne zmniejszenie wariancji oceny (dwukrotne zmniejszenie odchylenia standardowego) w porównaniu z pomiarami bezpośrednimi.

Skonstruowanie ortogonalnego schematu ważeń jest tu możliwe, gdyż liczba parametrów  $p$  jest równa  $p = 2^k$ , gdzie  $k \in \mathbb{N}$ . Jeśli  $p \neq 2^k$ , to odpowiednia macierz ortogonalna nie istnieje i wtedy należy tak dobrać wartości regresorów  $x_{ij}$ , aby moduły iloczynów skalarnych kolumn macierzy  $\mathbf{X}$  były minimalne.  $\square$

## 7.12. Optymalny plan w regresji liniowej prostej

Zbadamy obecnie możliwość stosowania ortogonalnej macierzy eksperymentu przy estymowaniu parametrów linii prostej  $y = a_0 + a_1x$ . Dla ustalenia uwagi założono, że zmienna  $x$  przyjmuje wartości z przedziału  $\langle -1, 1 \rangle$ . Założenie to nie ogranicza ogólności rozważań, gdyż jeśli prosta wyznaczana jest w innym przedziale, powiedzmy  $\langle c, d \rangle$ , to można sprowadzić zadanie do przedziału  $\langle -1, 1 \rangle$ , stosując operację centrowania i skalowania, tj. przekształcając zmienną  $x$  na nową zmienną  $x^*$  za pomocą funkcji

$$x^* = \frac{2}{d-c}x - \frac{d+c}{d-c}. \quad (7.59)$$



Łatwo sprawdzić, że jeśli  $x \in \langle c, d \rangle$  to  $x^* \in \langle -1; 1 \rangle$ .

Założymy, że dokonano  $n$  obserwacji odpowiedzi  $y$  dla  $x = x_1, \dots, x_n$ , przy czym  $n$  jest liczbą parzystą. Otrzymane wyniki można zapisać w formie równań eksperymentu

$$y_i = a_0 + a_1 x_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

gdzie  $\varepsilon_i$  jest błędem pomiaru. Równania te przedstawimy w zapisie macierzowym  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , gdzie  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$  jest wektorem obserwacji, natomiast  $\mathbf{X} = [\mathbf{J}_n \ \mathbf{X}_1]$ , jest macierzą eksperymentu, w której  $\mathbf{J}_n$  jest  $n$ -wymiarowym wektorem złożonym z jedynek, natomiast  $\mathbf{X}_1 = [x_1, \dots, x_n]^T$  jest wektorem zawierającym kolejne wartości zmiennej objaśniającej  $x$ ,  $x_i \in \langle -1; 1 \rangle$ .

Na podstawie wniosku z twierdzenia 7.3 wyznaczenie optymalnej macierzy eksperymentu polega na takim wyborze wartości regresorów, aby normy kolumn macierzy  $\mathbf{X}$  były maksymalne i wzajemnie ortogonalne. Pierwsza kolumna,  $\mathbf{J}_n$ , macierzy  $\mathbf{X}$  ma wszystkie wartości równe 1, więc nie ma możliwości doboru jej elementów, natomiast elementy,  $x_i$ , drugiej kolumny,  $\mathbf{X}_1$ , powinny przyjmować maksymalne, co do modułu, wartości z przedziału  $\langle -1; 1 \rangle$ , więc 1 lub  $-1$ , zachowując ortogonalność do pierwszej kolumny  $\mathbf{J}_n$ . Wynika stąd, że  $n/2$  elementów  $x_i$  powinno być równe  $-1$  i  $n/2$  elementów równe 1; przy czym nie ma na tym etapie analizy przesłanek sugerujących, które elementy powinny być równe 1, a które  $-1$ . Na przykład można założyć, że pierwszych  $n/2$  wartości równa jest 1, a pozostałe  $-1$ , lub zmieniać na przemian 1 i  $-1$  w kolejnych pomiarach. Dalej przyjmiemy ten drugi wymieniony sposób<sup>3</sup> – regresory  $x_i$  o nieparzystych numerach równe są  $-1$ , a o parzystych 1, więc  $x_{2k-1} = -1$ , natomiast  $x_{2k} = 1$ ,  $k = 1, \dots, n/2$ . Stąd macierz eksperymentu

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Do obliczenia estymatorów parametrów  $a_0$  oraz  $a_2$  wyznaczono kolejno

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} n & 0 \\ 0 & n \end{bmatrix}, \quad (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} 1/n & 0 \\ 0 & 1/n \end{bmatrix},$$

<sup>3</sup> Pomiarzy na przemian dla  $+1$  i  $-1$  mogą być korzystniejsze, gdy występuje trend systematyczny.

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ n/2 \\ \sum_{k=1}^{n/2} (y_{2k} - y_{2k-1}) \end{bmatrix}.$$

Po podstawieniu tych wyrażeń do wzoru (7.56) otrzymano

$$\begin{bmatrix} \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \\ \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n/2} (y_{2k} - y_{2k-1}) \end{bmatrix}. \quad (7.60)$$

Estymator wyrazu wolnego  $a_0$  jest równy wartości średniej obserwacji

$$\hat{a}_0 = \bar{y},$$

natomiast estymator nachylenia  $a_1$  jest równy

$$\hat{a}_1 = \frac{1}{2}(\bar{y}_{(+1)} - \bar{y}_{(-1)}),$$

gdzie  $\bar{y}_{(+1)}$  jest średnią z parzystych obserwacji (dla  $x_i = 1$ ), natomiast  $\bar{y}_{(-1)}$  jest średnią z nieparzystych obserwacji (dla  $x_i = -1$ ). Dla dwóch obserwacji,  $n = 2$ , metoda NK sprowadza się do przeprowadzenia prostej przez dwa punkty  $(x_1, y_1) = (-1, y_1)$  oraz  $(x_2, y_2) = (1, y_2)$ , z podanych wzorów otrzymano oceny

$$\hat{a}_0 = \bar{y} = \frac{y_1 + y_2}{2}, \quad \hat{a}_1 = \frac{1}{2}(\bar{y}_{(+1)} - \bar{y}_{(-1)}) = \frac{1}{2}(y_2 - y_1),$$

co jest zgodne z wyznaczeniem prostej przechodzącej przez dwa punkty. Zauważmy, że wyprowadzone wzory na estymatory  $\hat{a}_0$  oraz  $\hat{a}_1$ , ważne dla dowolnej liczby  $n$  punktów pomiarowych ( $n$  jest parzyste), są równoważne metodzie polegającej na podzieleniu wszystkich punktów pomiarowych na pary, w których jeden pomiar jest przeprowadzony dla  $x = -1$ , a drugi dla  $x = +1$ ; wyznaczeniu prostych przechodzących przez te pary punktów (oceny  $a_0$  oraz  $a_1$  dla każdej pary), a następnie obliczenie końcowych ocen jako średnich arytmetycznych ze wszystkich prostych. Estymatory (7.60) można więc interpretować jako średnie arytmetyczne z  $n/2$  prostych, z których każda przechodzi przez dwa punkty.  $\square$

Z podanych rozważań wynika, że optymalnymi punktami pomiarowymi przy wyznaczaniu linii prostej są pary punktów leżących na granicy przedziału liczbowego, w którym wyznaczana jest prosta, a estymacja sprowadza się do wyznaczenia linii prostej dla każdej pary punktów i wyznaczeniu końcowych ocen jako

średnie arytmetyczne ze wszystkich prostych otrzymanych z par. Wynik ten jest zgodny z intuicją, gdyż dwa punkty leżące na krańcach przedziału określoności dokładniej wyznaczają prostą niż jakiegokolwiek punkty leżące wewnątrz tego przedziału. Jeśli więc chcemy zwiększyć dokładność estymacji przez dodanie nowych pomiarów, to powinny one być przeprowadzone również na końcach przedziału. Rodzi się więc pytanie, dlaczego zwykle realizujemy inną strategię rozmieszczając punkty, na ogół, równomiernie w całym przedziale, co w efekcie zmniejsza dokładność estymacji parametrów. Taka strategia jest odpowiednia, gdy nie ma pewności, że właściwym modelem jest linia prosta, więc żeby to sprawdzić, należy dokonać pomiarów rozmieszczonych w całym obszarze określoności prostej. Gdy zatem właściwym modelem jest linia prosta, optymalne punkty pomiarowe leżą na krańcach przedziału określoności, gdy natomiast założenie o liniowości modelu jest tylko hipotezą, sprawdzenie jej wymaga przeprowadzenia pomiarów w całym obszarze określoności modelu.

Rozważania pokazują jeszcze jedną ważną własność modeli regresji. Otrzymuje się optymalne rozwiązanie, jeśli założenia wyjściowe są spełnione. W jakim stopniu odpowiadają one warunkom rzeczywistym eksperymentu? W jakim stopniu badany model spełnia założenia? Na tego typu pytania musi odpowiedzieć eksperymentator i odpowiednio do wiedzy dobrać metodę estymacji i punkty pomiarowe.

### 7.13. Regresja grzbietowa

W poprzednich punktach wykazaliśmy, że jeśli w podstawowym modelu liniowym  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$  spełnione są założenia  $\mathcal{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0}$  i  $\mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2\mathbf{I}_n$ , to  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$  jest nieobciążonym estymatorem o minimalnej wariancji, gdy  $\boldsymbol{\varepsilon}$  ma rozkład normalny i jest estymatorem nieobciążonym o minimalnej wariancji w klasie estymatorów liniowych bez założenia o normalności. Chociaż wynika stąd, że  $\hat{a}_j$  są estymatorami o minimalnej wariancji, to fakt ten nie gwarantuje, że ich wariancje są małe. Wariancje  $D^2[\hat{a}_j]$  mogą być szczególnie duże, gdy  $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$  jest tak zwaną macierzą „źle uwarunkowaną”, to jest macierzą, która jest „bliska” macierzy osobliwej. Dla takich macierzy stosunek największej do najmniejszej wartości własnej jest bardzo duży. Jeśli  $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$  jest macierzą źle uwarunkowaną, to najmniejsza wartość własna, powiedzmy  $\lambda_1$ , jest w przybliżeniu równa zeru

(w porównaniu z największą wartością własną), więc na mocy (A.2)

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^p D^2[\hat{a}_j] &= \sigma^2 \text{tr}[(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}] \\ &= \sigma^2 \sum_{j=1}^p \lambda_j^{-1} \\ &> \sigma^2 \lambda_1^{-1}. \end{aligned}$$

Wynika stąd, że wariancja estymatorów  $\hat{a}_j$  może być bardzo duża – zbyt duża do celów praktycznych. Dlatego dla rozwiązania problemu estymacji, gdy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest macierzą źle uwarunkowaną, Hoerl i Kennard [51] wprowadzili nową klasę estymatorów

$$\tilde{\mathbf{a}}_{(\gamma)} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \gamma \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \quad \gamma \geq 0, \quad (7.61)$$

które nazwali *estymatorami krawędziowymi* (ang. *ridge estimators*)<sup>4</sup>. Jeśli we wzorze (7.61) podstawimy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}}$  w miejsce  $\mathbf{X}^T \mathbf{y}$ , to po przekształceniach otrzymuje się

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{a}}_{(\gamma)} &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \gamma \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}} \\ &= [\mathbf{I}_n + \gamma (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}]^{-1} \hat{\mathbf{a}} \\ &= \mathbf{C} \hat{\mathbf{a}}, \end{aligned}$$

gdzie  $\mathbf{C} = [\mathbf{I}_n + \gamma (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}]^{-1}$ . Wynika stąd, że gdy  $\gamma > 0$ , wtedy  $\tilde{\mathbf{a}}_{(\lambda)}$  dany wzorem (7.61), jest estymatorem obciążonym – co jest niekorzystne.

Powstaje więc pytanie, co przemawia za stosowaniem estymatorów krawędziowych. Hoerl i Kennard wykazali, że dla każdej macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$  istnieje taka wartość współczynnika  $\gamma$ , dla której suma wariancji estymatorów  $\tilde{a}_j$  i obciążenia jest mniejsza niż suma wariancji estymatorów  $\hat{a}_j$ . Natomiast Goldstein i Smith [38] oraz niezależnie Loweree [71] wykazali, że istnieje  $\gamma > 0$ , o tej własności, że dla każdego estymatora  $\tilde{a}_j$  jego błąd średniokwadratowy jest mniejszy niż odpowiedni błąd średniokwadratowy estymatora  $\hat{a}_j$ . Wyniki te wskazują, że można tak dobrać wartość  $\gamma$ , że wprowadzone obciążenie estymatora zostanie w pełni zrekompensowane przez zmniejszenie jego wariancji.

Pozostaje jeszcze problem doboru odpowiedniej wartości  $\gamma$ , która zapewni te korzyści. Hoerl i Kennard proponują w tym celu zbadanie zależności składowych estymatora  $\tilde{\mathbf{a}}_{(\lambda)}$  oraz  $RSS$  od  $\lambda$ . Pozwala to ocenić, czy macierz  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest na

<sup>4</sup> W literaturze technicznej ten rodzaj estymacji nazywany jest *regularyzacją Tichonowa*.

tyłe źle uwarunkowana, że należy zastosować estymatory krawędziowe. Podali oni również następujące wskazówki doboru wartości  $\gamma$ :

- system powinien być stabilny numerycznie,
- współczynniki regresji powinny mieć sensowne wartości,
- wartość RSS nie powinna być znacznie zwiększona.

Wskazówki te są jednak ogólne i dobór trafnej wartości  $\gamma$  wymaga od eksperymentatora przeprowadzenia analizy odpowiedniej do danego zagadnienia.

Warto tu wspomnieć o jeszcze jednej interesującej własności estymatorów krawędziowych, którą wykazali Lindley i Smith [69], a mianowicie dla pewnej wartości współczynnika  $\gamma = \sigma^2/\sigma_a^2$ , gdzie  $\sigma_a^2$  jest wariancją rozkładu a priori każdego parametru  $a_j$ , estymatory krawędziowe są również estymatorami bayesowskimi parametrów  $\mathbf{a}$ .

Na zakończenie analizy przedstawimy krótko jeszcze dwie sytuacje, które mogą wystąpić w praktyce, a mianowicie estymacja, gdy parametry  $a_j$  mogą przyjmować nieujemne wartości oraz występowanie tak zwanych „cenzurowanych obserwacji”. Estymację parametrów dla nieujemnych parametrów analizował Waterman [111] i wykazał, że można go sprowadzić do problemu estymacji bez ograniczeń.

Drugi przypadek cenzurowanych danych polega na tym, że występują w praktyce obserwacje, o których można stwierdzić jedynie, że są albo poniżej albo powyżej pewnych wartości. Sytuacja taka występuje, gdy przeprowadzany jest przyspieszony test zużycia elementów poprzez zwiększenie np. temperatury. Wtedy pewne elementy mogą ulec uszkodzeniu w czasie testu i nie można dla nich podać odpowiednich wartości liczbowych. W tej sytuacji typowe metody estymacji nie mogą być stosowane i należy odwołać się do specjalnych opracowań. Metody estymacji dla sytuacji, gdy występują cenzurowane dane, opracowali Nelson i Hahn [84] oraz Chen i Dixon [13].

## 7.14. Algorytmy obliczeniowe analizy regresji

Głównym zadaniem analizy regresji jest rozwiązywanie równań normalnych i związane z tym obliczenie macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  i jej odwrotnej. Często macierz  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest źle uwarunkowana, co prowadzi do znacznych błędów obliczeń. Dla przypadków o niezbyt dużej liczbie warunkowej najczęściej stosowane są: metoda eliminacji Gaussa, jej modyfikacja zwana operatorem wymiatania i dekompozycja Cholesky’ego. Jeśli liczba warunkowa macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest duża, to wykonanie mnożenia  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  związane jest z dużymi błędami numerycznymi. Zaleca się w tym przy-

padku wyznaczenie dekompozycji Cholesky'ego bezpośrednio z macierzy  $\mathbf{X}$  (bez obliczania iloczynu  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ ) poprzez faktoryzację QR zrealizowaną za pomocą: zmodyfikowanej metody ortogonalizacji Grama-Schmidta, odbicia Householdera lub obrotów Givensa. Szczegółowe omówienie tych metod znajdzie czytelnik w opracowaniach Björka [8], Goluba [36] i Householdera [56].

W przypadku źle uwarunkowanych zadań zaleca się stosowanie rozkładu macierzy  $\mathbf{X}$  względem wartości osobliwych (SVD). Metoda ta jest najbardziej kosztowna numerycznie, ale równocześnie najbardziej stabilna. W dalszej części omówiono metodę opartą na operatorze wymiatania oraz metodę opartą na SVD.

#### 7.14.1. Obliczenia oparte na operatorze wymiatania

Operator wymiatania został zdefiniowany w dodatku (por. A.1.7). Teraz podamy sposób jego wykorzystania w regresji liniowej. W tym celu tworzy się macierz

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}^T \mathbf{X} & \mathbf{X}^T \mathbf{y} \\ \mathbf{y}^T \mathbf{X} & \mathbf{y}^T \mathbf{y} \end{bmatrix}$$

o wymiarze  $(p+1) \times (p+1)$ . Można wykazać (por. [100]), że jeśli przeprowadzi się operacje wymiatania kolejno względem kolumn  $1, \dots, p$ , to otrzymuje się

$$\begin{bmatrix} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} & \hat{\mathbf{a}} \\ -\hat{\mathbf{a}} & \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} \end{bmatrix}.$$

W wyniku przekształceń otrzymuje się macierz blokową, której składowe  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ ,  $\hat{\mathbf{a}}$  oraz  $\text{RSS} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  są podstawowymi elementami wyznaczanymi w każdej analizie regresji.

#### 7.14.2. Obliczenia oparte na dekompozycji SVD

Jeśli  $\mathbf{X}$  jest macierzą o wymiarze  $n \times p$  ( $p \leq n$ ), rzędu  $k$  ( $k \leq p$ ), to istnieje (por. A.15) ortogonalna macierz  $\mathbf{U}$  o wymiarze  $n \times n$  i ortogonalna macierz  $\mathbf{V}$  o wymiarze  $p \times p$ , dla których

$$\mathbf{X} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \mathbf{D}_p \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathbf{V}^T, \quad (7.62)$$

gdzie  $\mathbf{D}_p = \text{diag}[d_{11}, \dots, d_{pp}]$  jest macierzą kwadratową, diagonalną rzędu  $k$ , której elementy  $d_{ii} = \sigma_i$  nazywane są *wartościami osobliwymi* macierzy  $\mathbf{X}$ , natomiast

$\mathbf{0}$  jest macierzą składającą się z zer o wymiarze  $(n - p) \times p$ . Elementy macierzy  $\mathbf{D}_p$  są zwykle uporządkowane według malejących wartości

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_k > \sigma_{k+1} = \dots = \sigma_p = 0.$$

Faktoryzacja (7.62) nazywana jest *rozkładem względem wartości osobliwych*. Wartości osobliwe są pierwiastkami wartości własnych macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ .

Reprezentacja (7.62) jest nadmiarowa i pełna informacja zawarta jest w  $k$ -pierwszych kolumnach macierzy  $\mathbf{U}$  i  $k$ -pierwszych kolumnach macierzy  $\mathbf{V}$  ( $k = \text{rank} \mathbf{X}$ ) odpowiadających niezerowym wartościom osobliwym. Tworząc macierz  $\mathbf{U}_k$  z  $k$ -pierwszych kolumn macierzy  $\mathbf{U}$ , macierz  $\mathbf{V}_k$  z  $k$ -pierwszych kolumn macierzy  $\mathbf{V}$  oraz macierz diagonalną  $\mathbf{D}_k$  otrzymaną z macierzy  $\mathbf{D}_p$  po eliminacji  $p - k$  ostatnich wierszy i kolumn otrzymamy równoważny rozkład  $\mathbf{X} = \mathbf{U}_k \mathbf{D}_k \mathbf{V}_k^T$ , który dla macierzy pełnego rzędu,  $k = p$ , przyjmuje postać

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}_p \mathbf{D}_p \mathbf{V}_p^T. \quad (7.63)$$

Po podstawieniu wyrażenia (7.63) do (7.13) i wykorzystaniu ortogonalności macierzy składowych, tj.  $\mathbf{U}_p^T \mathbf{U}_p = \mathbf{I}_n$  oraz  $\mathbf{V}_p^T \mathbf{V}_p = \mathbf{I}_p$  otrzymuje się

$$\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{V}_p \mathbf{D}_p^{-1} \mathbf{U}_p^T \mathbf{y}. \quad (7.64)$$

Zadanie obliczenia estymatorów  $\hat{\mathbf{a}}$  jest tu szczególnie proste numerycznie, gdyż  $\mathbf{D}_p^{-1}$  jest macierzą diagonalną i obliczanie jej odwrotności sprowadza się do obliczania odwrotności liczb.

Podobnie podstawiając rozkład (7.63) do wzoru (7.18), otrzymuje się wzór na macierz kapelusзовą

$$\mathbf{P} = \mathbf{U}_p \mathbf{U}_p^T. \quad (7.65)$$

Z kolei różnicowa suma kwadratów,  $RSS = \mathbf{r}^T \mathbf{r}$ , może być obliczona z zależności  $\mathbf{r} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}) \mathbf{y}$ . Jeśli korzysta się ze wzoru (7.65) i idempotentności macierzy  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$ , to otrzymuje się

$$RSS = \mathbf{y}^T (\mathbf{I}_n - \mathbf{U}_p \mathbf{U}_p^T) \mathbf{y}. \quad (7.66)$$

Obliczanie rozkładu SVD z definicji polega na obliczeniu iloczynu  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ , wyznaczeniu wartości własnych, a następnie wektorów własnych macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  i  $\mathbf{X} \mathbf{X}^T$ . Jednak w przypadku źle uwarunkowanych macierzy obliczenie tych iloczynów pogarsza dokładność obliczeń. Dlatego zalecane jest stosowanie specjalizowanych metod. Polegają one na redukcji macierzy  $\mathbf{X}$  do macierzy bidiagonalnej

$\mathbf{A}$  za pomocą przekształceń Householdera, a następnie wyznaczenie wartości własnej i wektorów własnych macierzy  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ , które są poszukiwanymi parametrami. Szczegółowy opis metod został przedstawiony przez Golube'a [36], Björka [8] oraz Watkina [112].



## Rozdział 8

# Uogólniona metoda najmniejszych kwadratów

Dotychczas analizowaliśmy podstawowy model,  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , regresji liniowej, w którym obserwacje: nie są obciążone błędem systematycznym,  $\mathcal{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0}$ , są jednakowej dokładności i nie są skorelowane,  $\mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ . Ponadto, o macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$  założyliśmy, że ma *pełny rząd*,  $\text{rank}[\mathbf{X}] = p$ , gdzie  $p$  jest liczbą kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ , przy czym  $p \leq n$ , ( $n$  jest liczbą wierszy macierzy  $\mathbf{X}$ ). Przy tych założeniach podstawową metodą estymacji jest *zwykła metoda NK*<sup>1</sup>. Jeśli odstępujemy się od wymienionych założeń, to estymatory otrzymane zwykłą metodą NK mogą być dalekie od optymalnych i należy zastosować uogólnioną metodę NK.

Podstawy i obszerny przegląd możliwych rozwiązań uogólnionej metody najmniejszych kwadratów podali Goldman i Zelen [35]. Analizowali oni kilka odstępstw od zwykłej metody; a zwłaszcza macierz eksperymentu  $\mathbf{X}$  niepełnego rzędu, macierz eksperymentu z losowymi parametrami, macierz kowariancji niepełnego rzędu itd. Opis różnych wariantów uogólnionej metody podali Rao [89] i Searle [97]. Ograniczymy się do najważniejszego szczególnego przypadku uogólnionej metody NK, w której uogólnienie polega na odstąpieniu od założenia o jednakowej wariancji obserwacji i braku korelacji między nimi.

### 8.1. Estymacja parametrów modelu liniowego dla skorelowanych obserwacji

Założymy, że macierz kowariancji błędów obserwacji  $\boldsymbol{\varepsilon}$  jest równa  $\mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \boldsymbol{\Sigma}$ , gdzie  $\boldsymbol{\Sigma}$  jest macierzą symetryczną i dodatnio określoną. Znajomość elementów macierzy  $\boldsymbol{\Sigma}$  (wariancji i kowariancji obserwacji) umożliwia obliczenie estymatorów NK. Jednak zwykle nie są one znane, a wyznaczenie ich drogą eksperymentalną wymaga przeprowadzenia bardzo dużej liczby pomiarów, często kosztownych. Dlatego rozważymy możliwość wyznaczenia estymatorów przy słabszych założeniach.

<sup>1</sup> Zazwyczaj określenie „zwykła” jest pomijane.

W pomiarach jednakowej dokładności również nie zakładano znajomości wariancji  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji, a jedynie, że wszystkie wariancje są takie same. Analogicznie postępując założymy teraz, że macierz kowariancji błędów obserwacji jest znana z dokładnością do stałego współczynnika proporcjonalności  $\sigma^2$ , tj. że

$$\Sigma = \sigma^2 V,$$

gdzie  $V$  jest symetryczną dodatnio określoną macierzą  $n \times n$ , o znanych elementach  $v_{ij}$ . Współczynnik proporcjonalności został tu oznaczony symbolem wariancji, ponieważ przy odpowiednim przyjęciu wartości elementów  $V$  jest on wariancją. Na przykład w pomiarach jednakowej dokładności i nieskorelowanych macierz kowariancji  $\Sigma = \text{diag}[\sigma^2, \sigma^2, \dots, \sigma^2]$ , jeśli więc przyjmie się:  $V = I_n$ , to współczynnik proporcjonalności  $\sigma^2$  jest wariancją pojedynczej obserwacji.

Poprzez odpowiednią transformację obserwacji i macierzy eksperymentu sprowadza się zadanie do zwykłej metody NK (pomiarów jednakowej dokładności i nieskorelowanych). Dla pojedynczej zmiennej losowej, taka transformacja polega na podzieleniu zmiennej losowej przez odchylenie standardowe. Wykorzystuje się tu następującą własność: jeśli  $y$  jest zmienną losową o wariancji  $\sigma^2$ , to  $y/\sigma$  jest zmienną losową o wariancji 1. Dzielnikiem jest tu odchylenie standardowe  $\sigma$  – pierwiastek z wariancji. Podobnie postąpimy z wektorem losowym obserwacji. Odpowiednikiem wariancji  $\sigma^2$  zmiennej losowej jest dla wektora losowego, jego macierz kowariancji  $\Sigma$ . Macierz tę rozłożymy na iloczyn pewnej macierzy i macierzy do niej transponowanej, co jest możliwe jedynie dla macierzy symetrycznej dodatnio określonej, a takie własności mają macierze kowariancji.

Ponieważ  $V$  jest dodatnio określoną nieosobliwą macierzą symetryczną rzędu  $n$ , więc istnieje nieosobliwa macierz kwadratowa  $K$  o wymiarze  $n \times n$  spełniająca równanie (por. [98], A4.2)

$$V = K K^T.$$

Łatwo sprawdzić, że  $K$  jest macierzą nieosobliwą, bo gdyby było przeciwnie, wówczas jej wyznacznik byłby równy zero  $|K| = 0$ , stąd wyznacznik  $V$  również musiałby być równy zero, gdyż  $|V| = |K K^T| = |K| |K^T| = |K|^2 = 0$ , a to przeczy założeniu o nieosobliwości macierzy  $V$ .

Transformację równań eksperymentu przeprowadzimy, mnożąc je lewostronnie przez  $K^{-1}$ , skąd

$$K^{-1}y = K^{-1}Xa + K^{-1}\varepsilon. \quad (8.1)$$

Kładąc

$$\mathbf{z} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{y}, \quad (8.2)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{X}, \quad (8.3)$$

$$\boldsymbol{\delta} = \mathbf{K}^{-1}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (8.4)$$

otrzymuje się nowe, macierzowe równanie eksperymentu

$$\mathbf{z} = \mathbf{B}\mathbf{a} + \boldsymbol{\delta}, \quad (8.5)$$

gdzie  $\mathbf{z}$  jest transformowanym losowym wektorem obserwacji,  $\mathbf{B}$  transformowaną macierzą eksperymentu, natomiast  $\boldsymbol{\delta}$  transformowanym losowym wektorem błędów.

Wektor wartości oczekiwanych transformowanych błędów obserwacji jest równy

$$\mathcal{E}[\boldsymbol{\delta}] = \mathcal{E}[\mathbf{K}^{-1}\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{K}^{-1}\mathcal{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{0} = \mathbf{0}, \quad (8.6)$$

tak więc transformowane obserwacje nie są obciążone błędem systematycznym.

Macierz kowariancji transformowanych błędów oblicza się, korzystając z „prawa propagacji błędów”,  $\mathcal{D}[\mathbf{C}\mathbf{y}] = \mathbf{C}\mathcal{D}[\mathbf{y}]\mathbf{C}^T$ , stąd

$$\mathcal{D}[\boldsymbol{\delta}] = \mathcal{D}[\mathbf{K}^{-1}\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{K}^{-1}\mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}]\mathbf{K}^{-1T} = \mathbf{K}^{-1}\sigma^2\mathbf{V}\mathbf{K}^{-1T} = \sigma^2\mathbf{K}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{K}^T\mathbf{K}^{-1T} = \sigma^2\mathbf{I}_n, \quad (8.7)$$

więc transformowane pomiary nie są skorelowane i są tej samej dokładności. Ze wzorów (8.6) i (8.7) wynika, że transformowany model (8.5) spełnia założenia zwykłej metody NK, więc można do estymacji jego parametrów stosować podstawowy wzór  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ , skąd otrzymuje się

$$\hat{\mathbf{a}}^* = (\mathbf{B}^T\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{z}. \quad (8.8)$$

Znak \* zastosowano tu dla odróżnienia estymatora uogólnionej metody NK od estymatora zwykłej metody NK. Jeśli podstawimy do (8.8) wyrażenia (8.2), (8.3) oraz (8.4), to otrzymuje się

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}^* = (\mathbf{B}^T\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{z} &= \left( (\mathbf{K}^{-1}\mathbf{X})^T(\mathbf{K}^{-1}\mathbf{X}) \right)^{-1} (\mathbf{K}^{-1}\mathbf{X})^T\mathbf{K}^{-1}\mathbf{y} \\ &= \left( \mathbf{X}^T(\mathbf{K}\mathbf{K}^T)^{-1}\mathbf{X} \right)^{-1} \left( \mathbf{X}^T\mathbf{K}\mathbf{K}^T \right)^{-1}\mathbf{y} \\ &= \left( \mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X} \right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (8.9)$$

W przekształceniach wykorzystano następujące własności iloczynu macierzy, transpozycji i odwrotności  $(\mathbf{C}^T)^{-1} = (\mathbf{C}^{-1})^T$  oraz  $(\mathbf{CD})^T = \mathbf{D}^T \mathbf{C}^T$ .

Wyrażenie (8.9) jest podstawowym wzorem służącym do oceny parametrów uogólnioną metodą najmniejszych kwadratów. Zauważmy przy tym, że jeśli w (8.9) zastąpimy macierz  $\mathbf{V}$  macierzą  $\alpha \mathbf{V}$ , to estymator  $\hat{\mathbf{a}}^*$  nie ulegnie zmianie. Stąd wynika ważny wniosek, że elementy macierzy  $\mathbf{V}$  wystarczy wyznaczyć z dokładnością do współczynnika proporcjonalności.

Wektor wartości oczekiwanych ocen uogólnionego modelu wynosi

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\hat{\mathbf{a}}^*] &= \mathcal{E}[(\mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{y}] \\ &= (\mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathcal{E}[\mathbf{y}] \\ &= (\mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \mathbf{a} \\ &= \mathbf{a}, \end{aligned}$$

więc  $\hat{\mathbf{a}}^*$  jest nieobciążonym estymatorem parametrów  $\mathbf{a}$ . Wyznaczymy estymatory kowariancji ocen  $\hat{\mathbf{a}}^*$ . W zwykłej metodzie NK  $\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}] = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ , więc dla modelu uogólnionego  $\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}^*] = \sigma^2 (\mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1}$ , stąd po uwzględnieniu (8.3)

$$\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}^*] = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1}. \quad (8.10)$$

Różnicową sumę kwadratów obliczymy, wykorzystując również model po transformacji, stąd

$$\begin{aligned} RSS &= (\mathbf{z} - \mathbf{B}\hat{\mathbf{a}}^*)^T (\mathbf{z} - \mathbf{B}\hat{\mathbf{a}}^*) \\ &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}^*)^T \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}^*). \end{aligned} \quad (8.11)$$

Można wykazać, (por. [89]), że nieobciążonym estymatorem współczynnika proporcjonalności  $\sigma^2$  jest

$$s^2 = \frac{RSS}{n-p} = \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}^*)^T \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}^*)}{n-p}. \quad (8.12)$$

Podobnie jak estymator  $\hat{\mathbf{a}}$  zwykłej metody NK, również estymator  $\hat{\mathbf{a}}^*$  uogólnionej metody NK jest „najlepszym liniowym nieobciążonym estymatorem” (BLUE estymatorem).

Nasuwa się pytanie: na ile istotne jest uwzględnianie macierzy  $\mathbf{V}$  w uogólnionej metodzie NK – dla jakich warunków estymator  $\hat{\mathbf{a}}^*$  jest taki sam jak  $\hat{\mathbf{a}}$ ; lub równoważne pytanie: kiedy można nie uwzględniać faktu, że  $\mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ , a nie  $= \sigma^2 \mathbf{V}$ ? Zagadnienie to badali McElroy [74] oraz Kruskal [64]. Otrzymane przez nich wyniki można krótko zapisać za pomocą twierdzenia 8.1.

**Twierdzenie 8.1.** Warunkiem koniecznym i wystarczającym, aby estymatory  $\hat{\mathbf{a}}^*$  oraz  $\hat{\mathbf{a}}$  były takie same jest

$$\mathcal{R}[\mathbf{V}\mathbf{X}] = \mathcal{R}[\mathbf{X}],$$

gdzie  $\mathcal{R}[*]$  oznacza przestrzeń wektorową rozpiętą na kolumnach macierzy  $[*]$ .

Ponadto, Watson [113] zbadał warunki dla których oba estymatory  $\hat{\mathbf{a}}$  oraz  $\hat{\mathbf{a}}^*$  nachylenia prostej  $y = ax$  są takie same i wykazał, że zachodzi twierdzenie 8.2

**Twierdzenie 8.2.** Jeśli  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_n]^T$ , to estymatory  $\hat{\mathbf{a}}^*$  oraz  $\hat{\mathbf{a}}$  są identyczne dla każdego  $\mathbf{X}$  wtedy i tylko wtedy, gdy  $\mathbf{V} = \alpha \mathbf{I}_n$ .

Z podanych twierdzeń wynika, że jeśli nie są spełnione założenia zwykłej metody NK, to należy stosować uogólnioną metodę NK, gdyż w przeciwnym przypadku estymatory nie będą optymalne.

Stosowanie estymatorów uogólnionej metody NK wymaga znajomości macierzy  $\mathbf{V}$ , czyli macierzy kowariancji z dokładnością do współczynnika proporcjonalności  $\sigma^2$ , a to w praktyce następuje znaczne trudności. Są dwa ważne przypadki, w których macierz  $\mathbf{V}$  można wyznaczyć relatywnie łatwo. Pierwszy jest wtedy, gdy pomiary są próbkami pobieranymi w jednakowych odcinkach czasu i wtedy mamy do czynienia z pomiarami skorelowanymi jednakowej dokładności i drugi, gdy pomiary nie są skorelowane, ale są różnej dokładności, a to prowadzi do „ważonej metody NK”.

## 8.2. Pomiary skorelowane jednakowej dokładności

Założmy, że kolejne pomiary  $y_i$  są próbkami pobieranymi w równych odstępach czasu. Jeśli kolejne próbki są skorelowane i reprezentują stacjonarny proces stochastyczny, to można zastosować model autoregresji. W szczególności, jeśli współczynnik korelacji między sąsiednimi próbkami  $y_i$  oraz  $y_{i+1}$ ,  $i = 1, \dots, n-1$ , wynosi  $\rho$ ,  $\text{corr}[y_i, y_{i+1}] = \rho$ , to z założenia o stacjonarności wynika, że  $\text{corr}[y_i, y_j] = \rho^{|i-j|}$ , więc

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 1 & \rho & \rho^2 & \dots & \rho^n \\ \rho & 1 & \rho & \dots & \rho^{n-1} \\ \rho^2 & \rho & 1 & \dots & \rho^{n-2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \rho^n & \rho^{n-1} & \rho^{n-2} & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (8.13)$$

Do wyznaczenia macierzy  $V$  wystarczy w tym przypadku ocena współczynnika korelacji  $\rho$  między sąsiednimi próbkami (po wykazaniu, że próbki spełniają warunki stacjonarności).

**Estymacja wartości oczekiwanej stacjonarnego procesu stochastycznego.** Często wykonuje się bezpośrednio pomiary  $y_i = a + \varepsilon_i$  tej samej wielkości prawdziwej  $a$  z tą samą dokładnością  $D^2[y_i] = \sigma^2$ . Za ocenę wartości prawdziwej przyjmuje się wartość średnią arytmetyczną. Wykazaliśmy, że jeśli pomiary  $y_i$  nie są skorelowane i są tej samej dokładności, to średnia arytmetyczna jest najefektywniejszym estymatorem parametru  $a$ . Jednak w wielu wypadkach, zwłaszcza w próbkowaniu sygnału w krótkim czasie pomiary są skorelowane i powstaje pytanie czy średnia arytmetyczna pozostaje w takim przypadku najefektywniejszym estymatorem parametru  $a$ ? Zbadamy zachowanie się tego estymatora dla dwóch, a potem trzech pomiarów, co pozwoli na wyciągnięcie ogólniejszych wniosków.

Założymy, że wykonano dwa pomiary  $y_1$  i  $y_2$  wielkości  $a$ . Wtedy macierz eksperymentu  $X = [1 \ 1]^T$ , natomiast

$$V = \begin{bmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{bmatrix}. \quad (8.14)$$

Po podstawieniu tych danych do (8.9) otrzymano następującą ocenę

$$\hat{a}^* = 0,5y_1 + 0,5y_2$$

parametru  $a$ . Jak widać ocena ta nie jest zależna od wartości współczynnika korelacji  $\rho$ , który się zredukował i jest równa wartości średniej  $\hat{a}^* = \bar{y} = \hat{a}$ , a stąd wynika wniosek:

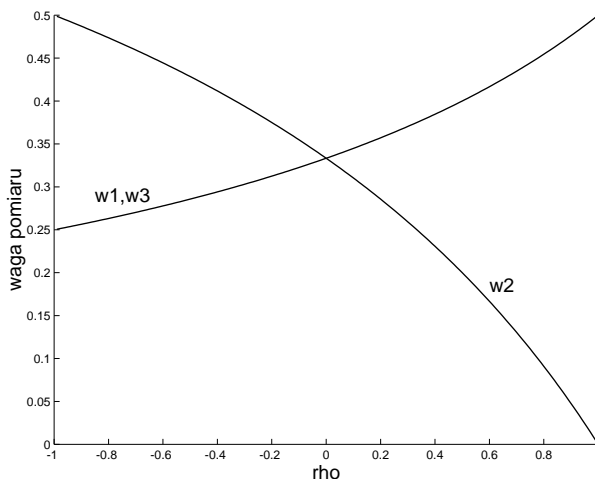
*Dla dwóch pomiarów bezpośrednich skorelowanych, jednakowej dokładności wartość średnia arytmetyczna jest najefektywniejszym estymatorem.*

Zbadamy przypadek trzech pomiarów  $y_1, y_2, y_3$  parametru  $a$ ,  $X = [1 \ 1 \ 1]^T$ . Jeśli są to realizacje procesu stacjonarnego, to

$$V = \begin{bmatrix} 1 & \rho & \rho^2 \\ \rho & 1 & \rho \\ \rho^2 & \rho & 1 \end{bmatrix}. \quad (8.15)$$

Po podstawieniu (8.15) do (8.9) otrzymano ocenę, która jest złożonym wyrażeniem zależnym od  $\rho$ , dlatego podamy wyniki obliczeń numerycznych. Rozwiązanie można przedstawić w formie kombinacji liniowej pomiarów

$$\hat{a}^* = w_1y_1 + w_2y_2 + w_3y_3,$$



Rys. 8.1. Zależność wag estymatora od współczynnika korelacji  $\rho$  (rho) stacjonarnego procesu

w której wagi  $w_j$  zależą od wartości  $\rho$ , a ich suma wynosi  $w_1 + w_2 + w_3 = 1$ . Wartości wag  $w_j$  wyznaczone dla różnych współczynników korelacji  $\rho$  podano w tabeli i przedstawiono na rysunku 8.1.

$\rho$	-0,9999	-0,9	-0,5	0,0	0,5	0,9	0,9999
$w_1, w_2$	0,2500	0,2564	0,2857	0,3333	0,4000	0,4762	0,5000
$w_2$	0,5000	0,4872	0,4386	0,3333	0,2000	0,0476	0,0000

Wynika z tego, że współczynnik korelacji w znaczącym stopniu wpływa na postać estymatora. Waga  $w_2$  zmienia się od wartości 0,5 dla  $\rho \approx -1$  do 0 dla  $\rho \approx 1$ , a to oznacza, że waga pomiaru  $y_2$  zmienia się od dominującej do pomijalnie małej. Wagi  $w_1$  i  $w_3$  ( $w_1 = w_3$ ) zmieniają się od 0,25 dla  $\rho \approx -1$  do 0,5 dla  $\rho \approx 1$ . Dla pomiarów nieskorelowanych,  $\rho = 0$ , wszystkie wagi są takie same i wynoszą  $w_1 = w_2 = w_3 = 1/3$ ; natomiast gdy  $\rho \rightarrow 1$ , wówczas  $\hat{\mathbf{a}}^* \rightarrow (y_1 + y_2)/2$ , a gdy  $\rho \rightarrow -1$ , wtedy  $\hat{\mathbf{a}}^* \rightarrow (y_1 + y_2)/2$ .

Z analizy wynika, że w przypadku silnie skorelowanych pomiarów należy uwzględnić korelacje między nimi – stosowanie średniej arytmetycznej może dać oceny odległe od optymalnych.

Można wykazać, że uwzględnienie współczynnika korelacji (użycie estymatora  $\hat{\mathbf{a}}^*$  zamiast  $\hat{\mathbf{a}}$ ) jest szczególnie istotne, gdy współczynnik korelacji  $\rho$  jest ujemny.

Jednak w większości przypadków praktycznych wyznaczenie macierzy  $\mathbf{V}$  jest obarczone dużymi „kosztami”, co utrudnia stosowanie uogólnionej metody NK.

Dlatego najczęściej rozpatruje się szczególny przypadek tej metody, w którym zakłada się, że obserwacje nie są skorelowane, ale o różnej wariancji, a to prowadzi do tak zwanej „ważonej metody najmniejszych kwadratów”.

### 8.3. Ważona metoda najmniejszych kwadratów

Założymy, że obserwacje nie są skorelowane, wtedy  $\mathbf{V}$  jest macierzą diagonalną,  $\mathbf{V} = \text{diag}[v_1, \dots, v_n]$ , której elementy oznaczono pojedynczymi indeksami  $v_i = v_{ii}$ ,  $i = 1, \dots, n$ . W estymatorach parametrów oraz macierzy kowariancji występuje odwrotność macierzy  $\mathbf{V}$ , dlatego wygodnie jest posługiwać się *macierzą wag*

$$\mathbf{W} = \mathbf{V}^{-1}. \quad (8.16)$$

W sformułowanych założeniach  $\mathbf{V}$  jest macierzą diagonalną, więc również  $\mathbf{W} = \text{diag}[w_1, \dots, w_n]$  jest macierzą diagonalną, a jej elementy,  $w_i = w_{ii}$ , nazywane *wagami obserwacji*, są równe

$$w_i = \frac{1}{v_i}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Kładąc w (8.9)  $\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{W}$ , otrzymuje się wzór

$$\hat{\mathbf{a}}^* = (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{y}, \quad (8.17)$$

na ocenę parametrów w *ważonej metodzie NK*, a ze wzoru (8.10) macierz kowariancji

$$\mathcal{D}[\hat{\mathbf{a}}^*] = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1}. \quad (8.18)$$

Rozpatrzmy szczególne przypadki ważonej metody NK.

**Linia prosta przechodząca przez początek układu współrzędnych.** Wyznamy estymator parametru  $a$  nachylenia prostej  $y = ax$ , przechodzącej przez początek układu współrzędnych (w poprzednim rozdziale model ten został wykorzystany do wyznaczenia gęstości właściwej  $\rho$  ze wzoru  $m = \rho v$ ). Równania eksperymentu są następujące

$$y_i = ax_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (8.19)$$



a w zapisie macierzowym  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , gdzie  $\mathbf{a} = a$ ,  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$ ,  $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_n]^T$  oraz  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n]^T$ . Załóżmy, że  $\mathcal{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0}$  oraz  $\mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 \mathbf{V} = \sigma^2 \text{diag}[v_1, \dots, v_n]$ , więc  $\mathbf{W} = \text{diag}[w_1, \dots, w_n] = \text{diag}[v_1^{-1}, \dots, v_n^{-1}]$ .

Poszczególne elementy wzoru (8.17) wynoszą

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X} &= \sum_{i=1}^n w_i x_i^2, \\ \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{y} &= \sum_{i=1}^n w_i x_i y_i.\end{aligned}$$

Na mocy (8.17) estymator  $\hat{a}^*$ , a na mocy (8.18) jego wariancje są odpowiednio równe

$$\hat{a}^* = \frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i y_i}{\sum_{i=1}^n w_i x_i^2}, \quad (8.20)$$

$$D^2[\hat{a}^*] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n w_i x_i^2}. \quad (8.21)$$

Wzory te wskazują, że wagi obserwacji w istotny sposób wpływają na wartość estymatora parametru i wariancji, więc powinny być uwzględniane w analizie.

**Pomiary bezpośrednie niejednakowej dokładności.** Załóżmy, że dokonano  $n$  bezpośrednich pomiarów  $y_1, \dots, y_n$  parametru  $a$ . Przyjęto, że pomiary te nie są skorelowane i mają różne wariancje. Dla tych założeń  $\mathbf{V} = \text{diag}[v_1, \dots, v_n]$ , przy czym wartości  $v_i$  elementów tej macierzy lub, co jest równoważne, wagi  $w_1, \dots, w_n$ ,  $w_i = 1/v_i$ , są znane. Wyznamy ocenę  $a$  ważoną metodą NK. Równania eksperymentu  $y_i = a + \varepsilon_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Model ten może być traktowany jako szczególny przypadek analizowanego modelu linii prostej (8.19) przechodzącej przez początek układu współrzędnych, w którym  $x_i = 1$ , dla  $i = 1, \dots, n$ . Kładąc  $x_i = 1$  w (8.20), otrzymuje się estymator

$$\hat{a}^* = \tilde{y} = \frac{\sum_{i=1}^n w_i y_i}{\sum_{i=1}^n w_i}, \quad (8.22)$$

który jest *średnią ważoną*,  $\tilde{y}$ , obserwacji  $y_1, \dots, y_n$ .

Analogicznie postępując, ze wzoru (8.21), otrzymuje się ocenę wariancji tego estymatora

$$D^2[\tilde{y}] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n w_i}. \quad (8.23)$$

Występujący tu parametr  $\sigma^2$  można wyznaczyć ze wzoru (8.12), który przyjmuje postać

$$s_1^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n w_i (y_i - \tilde{y})^2. \quad (8.24)$$

Pomiary bezpośrednio jednakowej dokładności można traktować jako szczególny przypadek analizowanych, w tym przykładzie, pomiarów niejednakowej dokładności, w których wszystkie wagi są równe 1. Kładąc w podanych wzorach  $w_i = 1$ ,  $i = 1, \dots, n$ , otrzymuje się znane wyrażenia

$$\begin{aligned} \hat{a}^* = \hat{a} = \bar{y} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i, \\ D^2[\hat{a}^*] = D^2[\hat{a}] &= \frac{\sigma^2}{n}, \\ s_1^2 &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2, \end{aligned}$$

które pokrywają się z ocenami pomiarów bezpośrednich, co potwierdza poprawność analizy.

**Przykład 8.1.** Wykorzystamy wyprowadzone wyrażenia do analizy bezpośrednich pomiarów parametru  $a$  o jednakowej dokładności, przy czym pomiary wykonywane są seriami o różnej długości. Taka sytuacja jest w przypadku, gdy każdego dnia wykonuje się serię pomiarów pewnej ustalonej wielkości  $a$  i po zakończeniu każdej serii analizuje się jej wyniki. Założymy, że wykonano  $k$  serii pomiarów, a liczba pomiarów w  $j$ -tej serii,  $j = 1, \dots, k$ , wynosi  $n_j$ . Otrzymuje się w ten sposób następujący zbiór danych

$$\begin{array}{cccc} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1n_1} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2n_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_{k1} & y_{k2} & \cdots & y_{kn_k}, \end{array} \quad (8.25)$$

w którym w kolejnych wierszach zapisane są kolejne serie pomiarów; pierwszy wiersz zawiera pierwszą serię pomiarów; drugi wiersz drugą serię itd. Tak więc, symbol  $y_{ji}$  oznacza  $i$ -ty pomiar w  $j$ -tej serii. Pojedyncze pomiary są jednakowej dokładności, co oznacza, że  $D^2[y_{ji}] = \sigma^2$ , oraz nie są skorelowane  $\text{cov}[y_{ji}, y_{pq}] = 0$ , jeśli  $j \neq p$  lub  $i \neq q$ .

W każdej serii występują pomiary jednakowej dokładności, więc optymalną oceną parametru  $a$  w  $j$ -tej serii jest średnia arytmetyczna

$$\bar{y}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} y_{ji}, \quad j = 1, \dots, n_j.$$

Każda średnia może być traktowana jako „nowy” wynik pomiaru wielkości  $a$ . Wykonując tę operację dla wszystkich średnich, otrzymuje się wektor „nowych” obserwacji  $\bar{\mathbf{y}} = [\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_k]^T$ , które nie są skorelowane ( $\text{cov}[\bar{y}_m, \bar{y}_n] = 0$ , gdy  $m \neq n$ ), a ich wariancje są równe

$$D^2[\bar{y}_j] = \frac{\sigma^2}{n_j}, \quad j = 1, \dots, k.$$

Nowe obserwacje  $\bar{y}_j$ , w odróżnieniu od  $y_i$ , nie są obserwacjami jednakowej dokładności. Macierz kowariancji  $\mathcal{D}[\bar{\mathbf{y}}]$  wektora losowego  $\bar{\mathbf{y}}$  jest więc macierzą diagonalną  $\mathcal{D}[\bar{\mathbf{y}}] = \sigma^2 \text{diag}[1/n_1, \dots, 1/n_k]$ , a to oznacza, że  $\mathbf{V} = \text{diag}[1/n_1, \dots, 1/n_k]$ , oraz

$$\mathbf{W} = \mathbf{V}^{-1} = \text{diag}[n_1, \dots, n_k].$$

Tak więc otrzymaliśmy interesujący wynik, że waga  $w_j$   $j$ -tej, nowej obserwacji  $\bar{y}_j$ ,  $j = 1, \dots, k$ , jest równa liczbie obserwacji  $n_j$  w  $j$ -tej serii pomiarów. Po podstawieniu obliczonej wagi do (8.22) otrzymuje się ocenę

$$\hat{a} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^k n_j \bar{y}_j,$$

gdzie  $n = n_1 + \dots + n_k$  jest liczbą wszystkich obserwacji, a z (8.23) ocenę wariancji  $D^2[\hat{a}] = \sigma^2/n$ . Łatwo sprawdzić, że rezultaty te są zgodne z wynikami otrzymanymi z bezpośredniej analizy wszystkich pomiarów.  $\square$

#### 8.4. Szacowanie wag z niepewności pomiarów

Wyznaczanie wag  $w_i$  pomiarów, lub w ogólnym przypadku elementów  $v_{ij}$  macierzy  $\mathbf{V}$ , sprowadza się zwykle do estymacji pomiarów i współczynników korelacji,

a to pociąga za sobą konieczność przeprowadzania „planowanego eksperymentu”, w którym dla każdego ciągu wartości wielkości wejściowych należy wykonać odpowiednią liczbę pomiarów wielkości wyjściowej – przynajmniej kilkanaście. W rezultacie nawet dla niedużej liczby wielkości wejściowych liczba wszystkich pomiarów potrzebnych do estymacji elementów  $v_{ij}$  może być bardzo duża, a zadanie praktycznie niewykonalne.

W pomiarach wielkości fizycznych wyznaczane są niepewności poszczególnych pomiarów na podstawie informacji podanych przez producentów narzędzi pomiarowych. Powstaje więc pytanie czy można te wyniki wykorzystać do szacowania wag pomiarów? Pewną przeszkodę stanowi fakt, że pojęcie niepewności pomiaru nie ma jednoznacznej, ściśle określonej definicji. Uznawany w metrologii dokument „ISO Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement” [42] definiuje niepewność pomiaru następująco:

*Niepewność pomiaru* – parametr, związany z wynikiem pomiaru, charakteryzujący rozrzut wartości, które można w uzasadniony sposób przypisać wartości mierzonej pomiaru<sup>2</sup>.

Autorzy dokumentu podają kilka interpretacji niepewności, że „niepewność może być odchyleniem standardowym, jego wielokrotnością lub połową szerokości przedziału ufności”. Jednak te informacje odwołują się do języka rachunku prawdopodobieństwa, natomiast popularnym, stosowanym przez producentów aparatury pomiarowej sposobem określania niepewności pomiarów jest „błąd graniczny pomiaru”  $\Delta$ , który definiowany jest nierównościami (2.7). Błąd graniczny, zgodnie z definicją 2.1 jest również rodzajem niepewności pomiaru. Producenci aparatury pomiarowej podają w specyfikacji narzędzia pomiarowego sposób obliczenia błędów granicznych, więc można uznać, że są one znane.

Definicja błędu granicznego nie jest oparta na pojęciach rachunku prawdopodobieństwa, więc wykorzystanie błędów granicznych do wyznaczenia wag pomiarów, które definiuje się na gruncie rachunku prawdopodobieństwa, wymaga dodatkowych założeń i komentarza.

**Uwaga.** Dalsze rozważania przeprowadzono po założeniu, że rozrzut obserwacji (czynnik losowy  $\varepsilon$ ) w addytywnym modelu równania pomiarowego  $y = x_a + \varepsilon$ , wzór (2.4), spowodowany jest głównie własnościami narzędzia pomiarowego – rozrzut wartości badanego obiektu jest pomijalnie mały, przypadek (a) (por. punkt 2.1).

Założmy, że błąd graniczny można w przybliżeniu określić jako nieujemną liczbę  $\Delta$ , dla której prawdopodobieństwo

$$P\{|y - a| \leq \Delta\} \approx 1, \quad (8.26)$$

<sup>2</sup> Tłumaczenie z angielskiego oryginału – Przewodnik, Główny Urząd Miar, Warszawa 1999.

lub w równoważnej formie  $P\{|y - a| > \Delta\} = \alpha \approx 0$  (W języku potocznym mówimy, że prawdopodobieństwo  $\alpha$  jest „pomijalnie małe”). Często wartość błędu granicznego  $\Delta$  przedstawia się jako wielokrotność  $k$  odchylenia standardowego  $\sigma$  obserwacji  $y$

$$\Delta = k\sigma. \quad (8.27)$$

Określenie „pomijalnie mały” poziom prawdopodobieństwa nie jest jednoznaczne i zwykle zakłada się, że oznacza ono liczbę z przedziału  $\alpha \in \langle 0, 003; 0, 05 \rangle$ . Dla obserwacji o rozkładzie normalnym odpowiada to wartości współczynnika  $k \in \langle 2; 3 \rangle$ , wzór (8.27). Producenci aparatury pomiarowej nie informują, na podstawie jakiej procedury wyznaczyli błąd graniczny swoich narzędzi pomiarowych, jak również nie podają przyjętej przez nich wartości współczynnika  $k$ . Jednak można założyć, że dany producent ma ustaloną procedurę wyznaczania błędów granicznych, w której przyjmuje taką samą wartość współczynnika  $k$  dla wszystkich produkowanych przez siebie narzędzi pomiarowych. Wykazano, że założenia te wystarczają do oszacowania wag pomiarów.

Niech  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$  będzie wektorem wyników pomiarów, natomiast  $\mathbf{\Delta} = [\Delta_1, \dots, \Delta_n]^T$  wektorem ich niepewności — błędów granicznych, którego elementy  $\Delta_i$  są znane. Założono ponadto, że obserwacje  $y_i$  nie są skorelowane, więc ich macierz kowariancji wynosi  $\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \mathbf{\Sigma} = \text{diag}[\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2]$ , gdzie  $\sigma_i^2$  jest wariancją  $i$ -tej obserwacji. Przypomnijmy, że  $\mathbf{\Sigma} = \sigma^2 \mathbf{V} = \sigma^2 \mathbf{W}^{-1}$ , gdzie  $\sigma^2$  jest współczynnikiem proporcjonalności, więc wariancja  $i$ -tej obserwacji

$$\sigma_i^2 = v_i \sigma^2 = \frac{\sigma^2}{w_i}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (8.28)$$

Obliczając z (8.27) wartość wariancji  $\sigma_i^2$  dla  $i$ -tej obserwacji i wstawiając ją do (8.28) otrzymuje się

$$\frac{\Delta_i^2}{k^2} = \frac{\sigma^2}{w_i}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (8.29)$$

gdzie współczynniki  $\sigma^2$  oraz  $k$  nie są znane. Można jednak przyjąć, że współczynniki te są takie same dla wszystkich pomiarów (co wynika z tego, że każdy producent ma ustaloną procedurę wyznaczania niepewności swoich narzędzi pomiarowych). Jeśli napisze się równanie (8.29) dla dowolnej obserwacji  $j \neq i$  i podzieli je stronami z (8.29), to otrzymuje się następującą relację między błędami granicznymi i wagami poszczególnych pomiarów

$$\frac{\Delta_i^2}{\Delta_j^2} = \frac{w_j}{w_i}, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (8.30)$$

gdzie nieznanne współczynniki  $k$  oraz  $\sigma^2$  się uprościły.

Wagi wystarczy wyznaczyć z dokładnością do współczynnika proporcjonalności (pomnożenie wszystkich wag przez tę samą liczbę nie zmienia estymatora parametrów), więc jeśli przyjmie się wartość jednej wybranej wagi, na przykład  $w_1$ , to pozostałe wagi można obliczyć ze wzoru (8.30), kładąc w nim  $j = 1$ , skąd

$$w_i = w_1 \left( \frac{\Delta_1}{\Delta_i} \right)^2, \quad i = 2, 3, \dots, n. \quad (8.31)$$

Na przykład dla  $w_1 = 1$  ze wzoru (8.31)  $w_i = (\Delta_1/\Delta_i)^2$ .

Ze wzoru (8.30) wynika, że stosunek wag jest równy kwadratowi stosunku błędów granicznych. Stąd obserwacja o błędzie granicznym większym przynajmniej 4 razy od błędów granicznych pozostałych obserwacji może być pominięta, gdyż wpływa ona w pomijalnie małym stopniu na wynik końcowy. Na przykład, jeśli zmierzmy średnicę wałka suwmiarką o błędzie granicznym 0,1 mm i śrubą mikrometryczną o błędzie 0,01 mm, to stosunek wag jest jak 1 : 100 i pomiary wykonane suwmiarką można pominąć.

**Przykład 8.2.** Zmierzono siłę elektromotoryczną wzorcowego, stabilnego źródła napięcia jednocześnie dwoma różnymi woltomierzami W1 oraz W2 (tego samego producenta). Woltomierz W1 wskazał wartość  $U_1 = 1,9997 V$  na zakresie  $U_{z1} = 10 V$ , natomiast woltomierz W2 wartość  $U_2 = 1,9995 V$  na zakresie  $U_{z1} = 2 V$ . Zakładając, że pomiary te nie są skorelowane, wyznaczmy ocenę mierzonego napięcia.

Błędy graniczne wyznacza się na podstawie następujących formuł (podanych przez producenta woltomierzy).

$$\text{W1: } \Delta_1 = 0,01\%U_1 + 0,01\%U_{z1},$$

$$\text{W2: } \Delta_2 = 0,02\%U_2 + 0,01\%U_{z2}.$$

Ze wzorów tych wynika, że błąd graniczny pierwszego pomiaru wynosi  $\Delta_1 \simeq 12 \times 10^{-4} V$ , natomiast drugiego  $\Delta_2 \simeq 6 \times 10^{-4} V$ . Kładąc w (8.31)  $w_1 = 1$ , otrzymano wagę drugiego pomiaru  $w_2 = 12^2/6^2 = 4$ , a po podstawieniu do (8.22) ocenę mierzonego napięcia

$$\tilde{U} = \frac{w_1 U_1 + w_2 U_2}{w_1 + w_2} = \frac{1 \times 1,9997 + 4 \times 1,9995}{1 + 4} = 1,99955V.$$

Zgodnie z oczekiwaniami ocena  $\tilde{U}$  jest „bliższa” pomiarowi  $U_2$  – o mniejszym błędzie niż  $U_1$ .  $\square$

## Rozdział 9

# Regresja nieliniowa

W rozdziałach 7 i 8 omówiono model regresji liniowej (wzór (7.1)), w którym zależność między odpowiedzią  $y$  a pobudzeniem  $x_1, \dots, x_p$  określona jest funkcją liniową względem parametrów  $a_1, \dots, a_p$ . W tym rozdziale rozpatrzono ogólniejszy model (6.10), w którym odstąpiono od tego założenia. Podobnie jak w modelu liniowym podstawową metodą estymacji parametrów jest również metoda NK. Jednak w odróżnieniu od liniowego modelu regresji, w którym minimum sumy kwadratów wyznacza się przez rozwiązanie układu równań liniowych, dla nieliniowych modeli regresji nie można zwykle sprowadzić problemu do równań liniowych i wyznaczenie minimum sumy kwadratów może stwarzać znaczne problemy numeryczne. W rozdziale tym przedstawiono: ogólną koncepcję modelu regresji nieliniowej; funkcje, które można sprowadzić do liniowego modelu regresji za pomocą prostych przekształceń oraz podstawowe metody obliczeń numerycznych.

### 9.1. Model regresji nieliniowej

Podstawowy model regresji określający relację między odpowiedzią  $y$  badanego obiektu a jego pobudzeniem  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_k]^T$  prezentuje wzór

$$y = f(\mathbf{x}; \mathbf{a}) + \varepsilon, \quad (9.1)$$

w którym  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$  jest wektorem parametrów, natomiast  $\varepsilon$  składnikiem losowym (np. błędy pomiaru). Założenie, że  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  jest liniową funkcją parametrów  $a_j$  definiuje liniowy model regresji, natomiast założenie, że  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  nie jest liniową funkcją parametrów prowadzi do *nieliniowych modeli regresji*. W modelu regresji nieliniowej liczba parametrów może być różna od liczby regresorów (we wzorze (9.1)  $k$  jest liczbą regresorów, a  $p$  liczbą parametrów), podczas, gdy w modelu regresji liniowej liczby te są takie same.

Duża popularność modelu regresji liniowej jest efektem wielu jej zalet, a przede wszystkim szerokim obszarem zastosowań, prostotą obliczeń i łatwością konstru-

owania testów statystycznych. Praktycznie każdą ciągłą funkcję można aproksymować z dowolną dokładnością modelem regresji liniowej. Wynika to stąd, że wielomiany są przykładami modelu regresji liniowej. Może więc zrodzić się pytanie, czy wobec tak dużej elastyczności i tak szerokiego obszaru zastosowań liniowych modeli regresji jest potrzeba stosowania modeli nieliniowych? Odpowiedź jest twierdząca, istnieje bowiem wiele sytuacji, które przemawiają za modelami nieliniowymi. Przede wszystkim, gdy model nieliniowy wynika bezpośrednio z analizy teoretycznej badanego zjawiska – *modelu mechanistycznego*. W takich modelach parametry mają często interpretację fizyczną, a ich estymacja może stanowić główny cel eksperymentu. Należy rozważyć stosowanie modelu nieliniowego również wtedy, gdy ma on „prostsza strukturę” – mniejszą liczbę parametrów – niż równie dokładny model liniowy. Warto tu odwołać się do zasady zwanej „brzytwą Ockhamy”<sup>1</sup>, według której nie należy bez konieczności komplikować modelu. Istotną trudnością w stosowaniu modeli nieliniowych jest znaczna złożoność obliczeniowa estymatorów w porównaniu z estymatorami modeli liniowych.

Istnieją funkcje nieliniowe, które można za pomocą prostych transformacji przekształcić do zależności liniowej, co umożliwia wykorzystanie aparatu matematycznego regresji liniowej. Przedstawimy niektóre z tych funkcji znajdujące zastosowanie w praktyce.

## 9.2. Funkcje transformowalne do modelu liniowego

**Funkcja Cobba–Douglasa.** W ekonometrii stosowana jest tzw. funkcja *Cobba–Douglasa*, której ogólna postać jest następująca

$$y = a_0 x_1^{a_1} x_2^{a_2} \dots x_k^{a_k}, \quad (9.2)$$

przy czym zwykle  $k \leq 2$ . Funkcja ta wykorzystywana jest do modelowania wielkości produkcji  $y$  w zależności od różnych czynników, a zwłaszcza od nakładu pracy  $x_1$  i nakładu kapitału  $x_2$ . Parametry  $a_0, a_1$  oraz  $a_2$  są stałymi modelu; parametr  $a_1$  nosi nazwę współczynnika elastyczności produkcji względem nakładu pracy, a parametr  $a_2$  współczynnika elastyczności produkcji względem kapitału. Obserwacje wielkości produkcji  $y$ , przy danych nakładach pracy  $x_1$  i nakładach kapitału  $x_2$ , obarczone są rozrzutem losowym. Logarytmując obie strony równości (9.2), otrzymuje się liniowy model regresji

<sup>1</sup> *Pluralitas non est ponenda sine necessitate* = *Plurality should not be posited without necessity* tłum. na ang. wg Encyclopedia Britannica.



$$y' = c_0 + a_1x'_1 + a_2x'_2 + \dots + a_kx'_k + \varepsilon, \quad (9.3)$$

gdzie  $y' = \ln y$ ,  $c_0 = \ln a_0$ ,  $x'_i = \ln x_i$ ,  $i = 1, \dots, k$ .

Jeśli błąd w tym modelu ma rozkład normalny,  $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ , to model wyjściowy można zapisać

$$y = a_0x_1^{a_1}x_2^{a_2} \dots x_k^{a_k} \rho, \quad (9.4)$$

gdzie  $\ln \rho = \varepsilon$ . Tak więc błędy w modelu (9.2) mają charakter multiplikatywny, a nie addytywny jak to jest w rozpatrywanym dotychczas liniowym modelu regresji. Rozkład błędu jest rozkładem lognormalnym. Alternatywny model, często stosowany w praktyce, jest określony następującą funkcją

$$y = f(x; a_0, a_1) = a_0e^{a_1x}. \quad (9.5)$$

**Bioassay model.** W badaniach wpływu leków, witamin, hormonów i innych czynników na żywe organizmy stosowany jest często tzw. *bioassay model*<sup>2</sup>, który umożliwia analizę wpływu czynnika na organizm poprzez porównanie z przyjętym wzorcem.

Model ten opisany za pomocą funkcji

$$y = f(x; a_0, a_1) = \frac{a_0x}{a_1 + x} \quad (9.6)$$

jest nieliniowym modelem regresji. Porównując odwrotności obu stron równania i kładąc  $b_0 = 1/a_0$  oraz  $b_1 = a_1/a_0$ , otrzymuje się model liniowy

$$y' = b_0 + b_1x', \quad (9.7)$$

w którym nową odpowiedzią jest  $y' = 1/y$ , a nowym regresorem  $x' = 1/x$ .

**Model logistyczny.** W analizie wzrostu organizmów żywych stosowany jest *model logistyczny* określony wzorem

$$y = f(x; a_0, a_1) = \frac{e^{a_0+a_1x}}{1 + e^{a_0+a_1x}}. \quad (9.8)$$

Porównując odwrotności obu stron równania (9.8), po przekształceniach i logarytmowaniu, otrzymuje się model liniowy

$$y' = a_0 + a_1x, \quad (9.9)$$

w którym nową odpowiedzią jest  $y' = \ln[y/(1-y)]$ .

<sup>2</sup> Skrót od określenia w języku ang. *biological assay = biological standardization*.

**Przykład 9.1.**<sup>3</sup> W rolnictwie badana jest skuteczność preparatów służących do zwalczania owadów. Należy wyznaczyć model określający skuteczność nowego preparatu w zależności od jego stężenia  $x$ . Poszukiwana jest więc funkcja, która określa frakcję owadów,  $y = f(x)$ , które nie przeżywają zadanej dawki preparatu. Przed badaniami można, na podstawie wstępnych rozważań, przewidzieć ogólny kształt funkcji  $f(x)$ . Jest ona funkcją niemalejącą, co wynika z tego, że jeśli stężenie preparatu rośnie, to frakcja owadów, które nie przeżywają również rośnie. Ponadto, założono, że jeśli nie stosuje się preparatu, to wszystkie owady przeżywają, stąd  $f(0) = 0$ ; a jeśli stosujemy maksymalne stężenie,  $x = 1$ , to wszystkie owady giną,  $f(1) = 1$ .

Kandydatem na model może być funkcja

$$y = f(x; a_0, a_1) = \frac{1}{1 - e^{-(a_0 + a_1 x)}}, \quad a_0, a_1 > 0,$$

która należy do klasy modeli logistycznych. □

Przedstawione w tym punkcie funkcje transformowalne do modelu liniowego są raczej wyjątkami niż normą. W następnym punkcie omówiono estymację parametrów modeli nieliniowych.

### 9.3. Estymacja parametrów modelu nieliniowego

#### 9.3.1. Sformułowanie problemu

Podstawowym celem nieliniowej analizy regresji jest estymacja parametrów  $a_j$  modelu (9.1) na podstawie odpowiedzi układu. Założymy, podobnie jak w modelu liniowym, że dla  $n$  ciągów  $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, \dots, x_{ik}]$  wartości wielkości wejściowych,  $n \geq p$ , wykonano pomiary odpowiedzi  $y_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , a stąd otrzymuje się równania eksperymentu

$$y_i = f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (9.10)$$

w których analogicznie do modelu liniowego odpowiedzi  $y_i$  są zmiennymi losowymi, natomiast  $\varepsilon_i$  są składnikami losowymi.

Założymy również, że obserwacje  $y_i$  nie są obciążone błędem systematycznym, co oznacza, że  $E[\varepsilon_i] = 0$ ; a ponadto, że  $y_i$  nie są skorelowane i są tej samej dokład-

<sup>3</sup> Na podstawie [121].

ności ( $\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ ). Przy tych założeniach estymator najmniejszych kwadratów  $\hat{\mathbf{a}}$  parametrów  $\mathbf{a}$  minimalizuje różnicową sumę kwadratów  $RSS$  (funkcję kryterialną)

$$Q(\mathbf{a}) = RSS = \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})]^2. \quad (9.11)$$

Jeśli funkcje  $f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})$ ,  $i = 1, \dots, n$ , są różniczkowalne względem parametrów  $a_j$ , to estymatory  $\hat{a}_j$  spełniają równania

$$\frac{\partial Q(\mathbf{a})}{\partial a_j} = 0, \quad j = 1, \dots, p. \quad (9.12)$$

Po wprowadzeniu oznaczenia

$$\mathbf{f}(\mathbf{a}) = [f(\mathbf{x}_1; \mathbf{a}), \dots, f(\mathbf{x}_n; \mathbf{a})]^T, \quad (9.13)$$

różnicową sumę kwadratów  $RSS$ , wzór (9.11), można zapisać w formie

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{a}) &= [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{a})]^T [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{a})] \\ &= \|\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{a})\|^2 \end{aligned} \quad (9.14)$$

wygodnej do dalszej analizy.

### 9.3.2. Metody iteracyjne wyznaczania minimum

Wyznaczanie minimum funkcji  $Q(\mathbf{a})$  jest szczególnym przypadkiem zadań optymalizacyjnych. Można więc stosować zarówno ogólne metody minimalizacji funkcji, jak i specjalne przeznaczone dla metody NK. Minimum funkcji  $Q(\mathbf{a})$  tylko w wyjątkowych sytuacjach można wyznaczyć metodami analitycznymi. Zazwyczaj musimy do tego celu wykorzystać numeryczne metody iteracyjne.

Zanim przejdziemy do omówienia podstawowych metod iteracyjnych przedstawimy krótko dwa proste algorytmy optymalizacyjne, które mogą być przydatne dla modeli mających małą liczbę parametrów. Są nimi przeszukiwanie siatek (ang. *grid search*) oraz losowe przeszukiwanie (ang. *random search*). *Przeszukiwanie siatek* polega na skonstruowaniu siatki w przestrzeni  $\mathbb{R}^p$  wyznaczającej  $p$ -wymiarowe prostopadłościany pokrywające obszar, w którym znajduje się rozwiązanie  $\mathbf{a}^*$  – minimum funkcji. W każdym punkcie siatki wyznacza się wartości funkcji kryterialnej  $Q(\mathbf{a})$  i przyjmuje za ocenę  $\hat{\mathbf{a}}$  rozwiązania  $\mathbf{a}^*$ , ten punkt siatki, w którym wartość funkcji  $Q(\mathbf{a})$  jest najmniejsza. Szerokość siatki określa dokładność wyznaczenia minimum. W celu osiągnięcia założonej dokładności siatka musi być

odpowiednio gęsta, to jest taka, żeby w prostopadłościanie otaczającym minimum wartość funkcji  $Q(\mathbf{a})$  była „prawie stała”. Zagęszczanie siatki przez przepołowienie ścian prostopadłościanów zwiększa liczbę punktów do obliczeń  $2^p$  razy.

*Losowe przeszukiwanie* polega na losowym wyborze kolejnych punktów w przestrzeni rozwiązań, aż otrzymamy odpowiednio dokładne przybliżenie minimum. Bardziej dokładnie algorytm można opisać następująco: niech  $\mathbf{a}^c$  będzie bieżącym punktem przeszukiwania. Losuje się nowy punkt  $\mathbf{a}^+$  leżący na hipersferze o środku w punkcie  $\mathbf{a}^c$  i zadanym promieniu  $r$ , a następnie sprawdza się, czy jest on lepszy od bieżącego,  $Q(\mathbf{a}^+) < Q(\mathbf{a}^c)$ ; jeśli tak, to nowy punkt przyjmuje się za bieżący  $\mathbf{a}^c = \mathbf{a}^+$  i powtarza proces, a jeśli nie, to losuje nowy punkt  $\mathbf{a}^+$  na tej hipersferze. Proces kontynuuje się, aż osiągnie odpowiednio dokładne przybliżenie minimum. Jeśli w kilku kolejnych losowaniach, dla ustalonego  $\mathbf{a}^c$ , nie otrzymuje się „lepszego” punktu, to zmniejsza się promień hipersfery i powtarza losowanie. Proces przeszukiwania można usprawnić, stosując algorytmy genetyczne.

Obie metody przeszukiwania są proste numerycznie, lecz „ekstremalnie kosztowne”, ponieważ niezbędne jest w nich wyznaczenie wartości funkcji kryterialnej w ogromnej liczbie punktów, których nie można wykorzystać w późniejszych obliczeniach. W rezultacie metody przeszukiwania znajdują zastosowanie do funkcji o małej liczbie parametrów.

Najważniejsze znaczenie praktyczne w zagadnieniach optymalizacyjnych mają metody iteracyjne, w których kierunek poruszania określony jest za pomocą pochodnych lub innych technik. Pierwszym krokiem w tych metodach jest określenie, „odgadnięcie”, przybliżenia początkowego  $\mathbf{a}^{(1)}$  rozwiązania  $\mathbf{a}^*$ . Następnie konstruuje się algorytm iteracyjny, który z bieżącej oceny  $\mathbf{a}^c$  oblicza następną ocenę  $\mathbf{a}^+$ , „lepszą” od poprzedniej. Wykorzystując ten algorytm i ocenę początkową, generuje się ciąg rozwiązań (wektorów)  $\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \dots$ , który powinien być zbieżny do minimum.

Startując z różnych, odpowiednio rozłożonych, punktów początkowych  $\mathbf{a}^{(1)}$ , można wyznaczyć wszystkie lokalne minima, a następnie wybrać najmniejsze z nich jako minimum globalne. Odpowiedni algorytm powinien zapewniać redukcję wartości funkcji kryterialnej  $Q(\mathbf{a})$  w kolejnym kroku iteracyjnym:  $Q(\mathbf{a}^{(k+1)}) < Q(\mathbf{a}^{(k)})$ ,  $k = 1, 2, \dots$ . Metoda iteracyjna, która zapewnia ten warunek, nazywana jest *metodą spadku* (ang. *descent method*). Proces iteracyjny jest zatrzymywany po skończonej liczbie kroków, kiedy bieżąca ocena jest wystarczająco blisko rozwiązania. Określenie momentu zatrzymania algorytmu (*stopowanie algorytmu*) zależy od analizowanego problemu i może być złożonym zadaniem. Ogólne wskazówki i wykaz opracowań na ten temat podali Dennis i Schnabel [20].

Metody iteracyjne, a zwłaszcza metoda spadku, polegają umownie na poruszaniu się w przestrzeni  $\mathbb{R}^p$  od bieżącego punktu  $\mathbf{a}^c$  do kolejnego  $\mathbf{a}^+$  wzdłuż linii prostej, co można zapisać

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + \boldsymbol{\delta}^c, \quad (9.15)$$

gdzie  $\boldsymbol{\delta}^c \in \mathbb{R}^p$  jest bieżącym *krokiem* iteracji. Krok ten wyznaczany jest zwykle w dwóch etapach: w pierwszym obliczany jest bieżący kierunek  $\mathbf{d}^c$  ( $\mathbf{d}^c \in \mathbb{R}^p$ ), w którym poszukiwane jest następne rozwiązanie, a w drugim określana jest „długość kroku”  $\rho^c \in \mathbb{R}^+$ , więc

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + \rho^c \mathbf{d}^c. \quad (9.16)$$

Proces doboru długości kroku  $\rho^c$  nazywany jest *śledzeniem linii* (ang. *line search*). Szczególny jego przypadek, polegający na znajdowaniu minimum funkcji  $f(\mathbf{x}, \mathbf{a})$  wzdłuż linii określonej przez bieżący punkt  $\mathbf{a}^c$  oraz kierunek  $\mathbf{d}^c$ , nazywany jest *dokładnym śledzeniem linii*. Metoda dokładnego śledzenia linii wydaje się być optymalnym algorytmem. Jednak związana jest ona zwykle z dużą liczbą obliczeń i dlatego stosowane są często inne metody doboru kierunku i kroku, a zwłaszcza

- metoda Gaussa–Newtona (GN),
- metoda Newtona (N) nazywana również w statystyce metodą Newtona–Raphsona.

Każda z tych metod ma wiele modyfikacji praktycznych. Obszerne omówienie problematyki można znaleźć w literaturze, por. [20, 34, 62, 94, 99].

### 9.3.3. Metoda Gaussa–Newtona

Metoda GN opiera się na zastąpieniu funkcji  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  jej przybliżeniem liniowym  $l(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  w otoczeniu bieżącej oceny  $\mathbf{a}^c$  i wyznaczeniu estymatorów parametrów metodą regresji liniowej dla tego modelu. Jeśli model  $l(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  jest dobrym przybliżeniem  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ , a bieżące oszacowanie  $\mathbf{a}^c$  jest „odpowiednio blisko” minimum  $\mathbf{a}^*$ , to można się spodziewać, że nowe oszacowanie  $\mathbf{a}^+$  jest lepsze niż  $\mathbf{a}^c$ ,  $Q(\mathbf{a}^+) < Q(\mathbf{a}^c)$ . Można więc wykorzystać aparat regresji liniowej do wyznaczenia nowej lepszej oceny. Przybliżenie liniowe konstruuje się na podstawie rozwinięcia w szereg Taylora funkcji  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  względem bieżącego punktu  $\mathbf{a}^c$ . Proces ten należy kontynuować, aż do uzyskania wystarczająco dokładnego przybliżenia minimum. Omówiono go bardziej szczegółowo.

Niech  $\mathbf{a}^c = [a_1^c, \dots, a_p^c]^T$  będzie wektorem bieżących ocen rozwiązania  $\mathbf{a}^*$  otrzymanych w  $k$ -tym kroku iteracji, wtedy stosując liniowe rozwinięcie w szereg Tay-

lora względem  $\mathbf{a}^c$  można funkcję  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  aproksymować w otoczeniu tego punktu modelem liniowym

$$l(\mathbf{x}; \mathbf{a}) = f(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c) + \frac{\partial f}{\partial a_1}(a_1 - a_1^c) + \cdots + \frac{\partial f}{\partial a_p}(a_p - a_p^c). \quad (9.17)$$

Zakładając, że w rozpatrywanym obszarze model  $l(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  jest dobrym przybliżeniem funkcji  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ , tj.  $l(\mathbf{x}; \mathbf{a}) \approx f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ ,  $i$ -tą obserwację można zapisać

$$y_i = f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a}^c) + \left. \frac{\partial f}{\partial a_1} \right|_{\mathbf{x}_i} (a_1 - a_1^c) + \cdots + \left. \frac{\partial f}{\partial a_p} \right|_{\mathbf{x}_i} (a_p - a_p^c) + \varepsilon_i, \quad (9.18)$$

gdzie

$$\left. \frac{\partial f}{\partial a_j} \right|_{\mathbf{x}_i} = \left. \frac{\partial f(\mathbf{x}; \mathbf{a})}{\partial a_j} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\mathbf{x}_i \\ \mathbf{a}=\mathbf{a}^c}}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, p, \quad (9.19)$$

jest skróconym zapisem pochodnej w punkcie  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ ,  $\mathbf{a} = \mathbf{a}^c$ . W notacji macierzowej równanie (9.18) ma postać

$$y_i = l(\mathbf{x}; \mathbf{a}) + \varepsilon_i = f(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c) + [\nabla f(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c)]^T (\mathbf{a} - \mathbf{a}^c) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (9.20)$$

gdzie  $\nabla f(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c)$  jest wektorem pochodnych funkcji  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  w punkcie  $\mathbf{a} = \mathbf{a}^c$  (por. A.2.1). Po wprowadzeniu oznaczenia

$$x_{ij}^c = \left. \frac{\partial f(\mathbf{x}; \mathbf{a})}{\partial a_j} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\mathbf{x}_i \\ \mathbf{a}=\mathbf{a}^c}}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, p, \quad (9.21)$$

pochodne  $x_{ij}^c$  utworzą  $n \times p$ -wymiarową macierz eksperymentu modelu liniowego  $l(\mathbf{x}; \mathbf{a})$

$$\mathbf{X}^c = [x_{ij}^c]. \quad (9.22)$$

Pozwala to na zapisanie równań eksperymentu (9.18) w postaci macierzowej

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c) + \mathbf{X}^c (\mathbf{a} - \mathbf{a}^c) + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (9.23)$$

gdzie  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$  jest wektorem obserwacji, natomiast

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c) = [f(\mathbf{x}_1; \mathbf{a}^c), \dots, f(\mathbf{x}_n; \mathbf{a}^c)]^T$$

wektorem wartości funkcji  $f$  w punktach  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  (por. (9.13)).

Równanie (9.23) można sprowadzić do podstawowego modelu regresji liniowej ( $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ ), przenosząc  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c)$  na lewą stronę, zastępując wektor obserwacji  $\mathbf{y}$  wektorem różnic

$$\mathbf{r}^c = \mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c) \quad (9.24)$$

i wprowadzając wektor korekty

$$\mathbf{c}^c = \mathbf{a} - \mathbf{a}^c, \quad (9.25)$$

który pełni rolę wektora parametrów (poszczególne różnice są równe  $r_i^c = y_i - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{a}^c)$ ,  $i = 1, \dots, n$ ; natomiast korekty  $c_j = a_j - a_j^c$ ,  $j = 1, \dots, p$ ). Otrzymuje się w ten sposób nowe macierzowe równanie eksperymentu

$$\mathbf{r}^c = \mathbf{X}^c \mathbf{c}^c + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (9.26)$$

stąd estymator  $\hat{\mathbf{c}}^c$  wektora korekty określony jest wzorem

$$\hat{\mathbf{c}}^c = (\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c)^{-1} \mathbf{X}^{cT} \mathbf{r}^c, \quad (9.27)$$

a nowe przybliżenie  $\mathbf{a}^+$  rozwiązania, na mocy (9.25), wynosi

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + \hat{\mathbf{c}}^c = \mathbf{a}^c + (\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c)^{-1} \mathbf{X}^{cT} \mathbf{r}^c, \quad (9.28)$$

gdzie wektor bieżącej korekty  $\boldsymbol{\delta}^c$  jest równy  $\hat{\mathbf{c}}^c$ . Oceny poszczególnych parametrów wynoszą

$$a_j^+ = a_j^c + \hat{c}_j^c, \quad j = 1, \dots, p. \quad (9.29)$$

Tak więc stosując metodę GN wyznaczono nie tylko kierunek, ale i długość kroku. Nowa ocena została obliczona na podstawie lokalnego modelu liniowego funkcji  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$ , dlatego należy sprawdzić, czy funkcja kryterialna uległa zmniejszeniu, tj. czy

$$Q(\mathbf{a}^+) < Q(\mathbf{a}^c). \quad (9.30)$$

Jeśli nierówność (9.30) jest spełniona, to przyjmuje się nową ocenę jako lepszą, a jeśli nie, to należy zmniejszyć długość kroku korekty stosując metodę *wstecznej śledzenia* (ang. *back tracking*). Sprowadza się to do wyznaczenia nowej oceny ze wzoru

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + \mu \hat{\mathbf{c}}^c, \quad (9.31)$$

gdzie  $\mu \in (0; 1)$ . Takie rozwiązanie wynika stąd, że jak wykazał Hartley [46] funkcja kryterialna  $Q(\mathbf{a})$  zmniejsza się, w pewnym obszarze, jeśli poruszamy się z bieżącego rozwiązania  $\mathbf{a}^c$  w kierunku  $\hat{\mathbf{c}}^c$ . Hartley zaproponował również metodę

wyznaczania wartości współczynnika  $\mu$  we wzorze (9.31), dla którego funkcja kryterialna osiąga wartość minimalną. Jednak sposób ten prowadzi do złożonych obliczeń i dlatego należy rozważyć zastosowanie następującej strategii. Jeśli dla nowego przybliżenia  $\mathbf{a}^+$  wyznaczonego ze wzoru (9.28) (lub wzoru (9.31) dla  $\mu = 1$ ) funkcja kryterialna nie ulegnie zmniejszeniu, to należy przyjąć we wzorze (9.31)  $\mu = 1/2$ . Jeśli i dla tej wartości nie otrzyma się zmniejszenia funkcji kryterialnej, to należy jeszcze bardziej zmniejszyć współczynnik  $\mu$ , np.  $\mu = 1/4$ . Proces ten należy kontynuować, aż do uzyskania zmniejszenia funkcji kryterialnej. Z twierdzenia udowodnionego przez Hartleya [46] wynika, że taka wartość współczynnika  $\mu$  istnieje. Przedstawimy przykład ilustrujący zastosowanie metody GN.

**Przykład 9.2.** Wyznamy podstawowe człony estymatora GN parametrów modelu obiektu opisanego funkcją

$$f(\mathbf{x}; \mathbf{a}) = e^{a_1 x} + e^{a_2 x},$$

w której  $\mathbf{x} = x$  jest wielkością wejściową (np. czasem), a  $\mathbf{a} = [a_1, a_2]^T$  jest dwuelementowym wektorem parametrów. Załóżmy, że dla czterech wartości  $x_1, \dots, x_4$  wielkości wejściowej  $x$  wyznaczono odpowiedzi  $y_1, \dots, y_4$ , i że spełniają one założenia zwykłej metody NK. Do oceny  $\mathbf{a}$  zastosowano metodę Gaussa–Newtona.

Pochodna wektorowa funkcji  $f(\mathbf{x}; \mathbf{a})$  względem parametrów  $\mathbf{a}$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{a}} = \nabla f(\mathbf{x}; \mathbf{a}) = [x e^{a_1 x}, x e^{a_2 x}]^T.$$

Niech bieżące przybliżenie parametrów  $\mathbf{a}$  wynosi  $\mathbf{a}^c = [a_1^c, a_2^c]^T$ . Model liniowy (9.17) w otoczeniu punktu  $\mathbf{a}^c$  jest określony wzorem  $l(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c) = f(\mathbf{x}; \mathbf{a}^c) + x e^{a_1^c x} (a_1 - a_1^c) + x e^{a_2^c x} (a_2 - a_2^c)$ . Równania eksperymentu modelu liniowego wyznaczonego punkcie  $\mathbf{a}^c$  są następujące

$$y_i = e^{a_1^c x_i} + e^{a_2^c x_i} + x_i e^{a_1^c} (a_1 - a_1^c) + x_i e^{a_2^c} (a_2 - a_2^c) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, 3, 4,$$

elementy  $r_i$  wektora różnic  $\mathbf{r}^c$

$$r_i^c = y_i - f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a}^c) = y_i - (e^{a_1^c x_i} + e^{a_2^c x_i}), \quad i = 1, 2, 3, 4;$$

natomiast bieżąca macierz eksperymentu (por. wzór (9.21))

$$\mathbf{X}^c = \begin{bmatrix} x_1 e^{a_1^c x_1} & x_1 e^{a_2^c x_1} \\ x_2 e^{a_1^c x_2} & x_2 e^{a_2^c x_2} \\ x_3 e^{a_1^c x_3} & x_3 e^{a_2^c x_3} \\ x_4 e^{a_1^c x_4} & x_4 e^{a_2^c x_4} \end{bmatrix},$$



stąd

$$\mathbf{X}^{c^T} \mathbf{X}^c = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{2a_1^c x_i} & \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{(a_1^c + a_2^c) x_i} \\ \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{(a_1^c + a_2^c) x_i} & \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{2a_2^c x_i} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{X}^{c^T} \mathbf{r}^c = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^4 r_i x_i e^{a_1^c x_i} \\ \sum_{i=1}^4 r_i x_i e^{a_2^c x_i} \end{bmatrix}.$$

Po podstawieniu do (9.28) otrzymuje się, nową ocenę  $\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + \hat{\mathbf{c}}^c$ . Należy jeszcze sprawdzić czy różnicowa suma kwadratów  $RSS = Q(\mathbf{a})$  uległa zmniejszeniu – to znaczy czy spełniony jest warunek  $Q(\mathbf{a}^+) < Q(\mathbf{a}^c)$  (por. (9.30)). Jeśli tak, to akceptuje się nową ocenę, a jeśli nie, to skraca krok  $\hat{\mathbf{c}}^c$  (por. 9.31) zwykle o połowę; zamiast  $\hat{\mathbf{c}}^c$  stosuje się krok  $0,5\hat{\mathbf{c}}^c$ , i kontynuuje proces iteracyjny aż otrzyma się odpowiednio dokładne przybliżenie rozwiązania.

#### 9.3.4. Metoda Newtona

Metoda Newtona polega na bezpośrednim wyznaczeniu minimum funkcji kryterialnej  $Q(\mathbf{a})$ , (9.11), względem  $\mathbf{a}$ . W tym celu konstruuje się lokalny model kwadratowy  $q(\mathbf{a})$  funkcji kryterialnej  $Q(\mathbf{a})$  w otoczeniu bieżącego rozwiązania  $\mathbf{a}^c$ , wykorzystując liniowy i kwadratowy człon rozwinięcia funkcji w szereg Taylora. Model  $q(\mathbf{a})$  jest „funkcją kwadratową”, która ma jednoznacznie określone i łatwo wyznaczane minimum. Minimum to przyjmowane jest jako następne przybliżenie,  $\mathbf{a}^+$ , w procesie iteracyjnym. Przedstawimy teraz ten proces bardziej szczegółowo.

Kwadratowy model  $q(\mathbf{a})$  funkcji  $Q(\mathbf{a})$  w otoczeniu punktu  $\mathbf{a}^c$  otrzymamy, stosując jej rozwinięcie w szereg Taylora, skąd (por. [20], s. 73)

$$q(\mathbf{a}) = Q(\mathbf{a}^c) + \nabla Q(\mathbf{a}^c)^T (\mathbf{a} - \mathbf{a}^c) + \frac{1}{2} (\mathbf{a} - \mathbf{a}^c)^T \mathbf{H}(\mathbf{a}^c) (\mathbf{a} - \mathbf{a}^c), \quad (9.32)$$

gdzie  $\nabla Q(\mathbf{a}^c)$  jest operatorem nabra (pochodną wektorową), a

$$\mathbf{H}(\mathbf{a}^c) = \nabla^2 Q(\mathbf{a}^c) = \left[ \frac{\partial^2 Q(\mathbf{a})}{\partial a_i \partial a_j} \right]$$

Hessianem funkcji  $Q(\mathbf{a})$  w punkcie  $\mathbf{a} = \mathbf{a}^c$ .

Minimum funkcji kwadratowej  $q(\mathbf{a})$  otrzymuje się po obliczeniu pochodnych względem parametrów  $a_j$  dla  $j = 1, \dots, p$  i po przyrównaniu ich do zera. Proces ten z zastosowaniem pochodnych wektorowych zapisuje się jednym równaniem  $\nabla Q(\mathbf{a}) = \partial Q(\mathbf{a})/\partial \mathbf{a} = \mathbf{0}$ . Stosując reguły obliczania pochodnych wektorowych (por. A.2.1), otrzymuje się równanie

$$\nabla q(\mathbf{a}) = \nabla Q(\mathbf{a}^c) + \mathbf{H}(\mathbf{a}^c)(\mathbf{a} - \mathbf{a}^c) = \mathbf{0}, \quad (9.33)$$

którego rozwiązanie względem  $\mathbf{a}$

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c - \mathbf{H}(\mathbf{a}^c)^{-1} \nabla Q(\mathbf{a}^c) \quad (9.34)$$

jest następną oceną minimum funkcji  $Q(\mathbf{a})$ .

Korzystając ze wzoru (9.34) można, podobnie jak w metodzie GN, skonstruować ciąg rozwiązań  $\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \dots$ , sprawdzając w każdym kroku iteracyjnym nierówność  $Q(\mathbf{a}^+) < Q(\mathbf{a}^c)$ . Jeśli nierówność ta nie jest spełniona na pewnym etapie, zwykle pierwszym lub drugim, to podobnie jak w metodzie GN stosuje się skrócenie kroku – „back tracking”. Można wykazać, że przy spełnieniu pewnych warunków, skonstruowany w ten sposób ciąg  $\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \dots$  jest  $q^2$  zbieżny [20] do rozwiązania  $\mathbf{a}^*$  (na przykład ciąg  $\{x_k = 1 + 2^{-2k}\}$  jest  $q^2$  zbieżny).

Otrzymaliśmy w ten sposób ogólny algorytm Newtona – dla dowolnej różniczkowalnej funkcji kryterialnej. Obecnie wyznaczymy elementy wzoru iteracyjnego (9.34) dla metody NK – funkcji kryterialnej

$$Q(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n r_i(\mathbf{a})^2, \quad (9.35)$$

gdzie

$$r_i(\mathbf{a}) = y_i - f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a}), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (9.36)$$

jest różnicą między  $i$ -tą obserwacją  $y_i$  a odpowiedzią  $f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})$  dla pobudzenia  $\mathbf{x}_i$ . Pochodna wektorowa,  $\nabla Q(\mathbf{a})$ , funkcji kryterialnej wynosi

$$\begin{aligned} \nabla Q(\mathbf{a}) &= \frac{\partial Q(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = 2 \sum_{i=1}^n r_i(\mathbf{a}) \frac{\partial r_i(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} \\ &= 2\mathbf{J}^T \mathbf{r}, \end{aligned} \quad (9.37)$$

gdzie

$$\mathbf{r} = [r_1(\mathbf{a}), r_2(\mathbf{a}), \dots, r_n(\mathbf{a})]^T, \quad (9.38)$$

natomiast

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \mathbf{J}(\mathbf{a}) \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1(\mathbf{a})}{\partial a_1} & \cdots & \frac{\partial r_1(\mathbf{a})}{\partial a_p} \\ \frac{\partial r_2(\mathbf{a})}{\partial a_1} & \cdots & \frac{\partial r_2(\mathbf{a})}{\partial a_p} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial r_n(\mathbf{a})}{\partial a_1} & \cdots & \frac{\partial r_n(\mathbf{a})}{\partial a_p} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (9.39)$$

Istnieje następujący związek

$$\mathbf{J} = -\mathbf{X}, \quad (9.40)$$

między zdefiniowaną tu macierzą  $\mathbf{J}$  a macierzą eksperymentu  $\mathbf{X}$  zdefiniowaną wzorem (9.22) dla modelu liniowego, której elementy  $x_{ij}$  określone są następująco (por. 9.21)

$$x_{ij} = \frac{\partial f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})}{\partial a_j}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, p. \quad (9.41)$$

Zależność (9.40) wynika bezpośrednio z definicji różnicy  $r_i(\mathbf{a})$ , wzór (9.36), stąd  $\partial r_i(\mathbf{a})/\partial a_j = -\partial f_i(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})/\partial a_j$ .

Hessian  $\mathbf{H}$  funkcji kryterialnej  $Q(\mathbf{a})$  jest macierzą drugich pochodnych mieszanych funkcji  $Q(\mathbf{a})$ , stąd jego  $(r, s)$ -ty element jest równy

$$\begin{aligned} h_{rs} &= \frac{\partial^2 Q(\mathbf{a})}{\partial a_r \partial a_s} \\ &= 2 \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial r_i(\mathbf{a})}{\partial a_r} \frac{\partial r_i(\mathbf{a})}{\partial a_s} + r_i \frac{\partial^2 r_i(\mathbf{a})}{\partial a_r \partial a_s} \right), \quad r, s = 1, \dots, p. \end{aligned} \quad (9.42)$$

Korzystając z macierzy  $\mathbf{J}$ , można Hessian  $\mathbf{H}$  funkcji  $Q(\mathbf{a})$  określić w następujący sposób

$$\mathbf{H} = 2(\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mathbf{A}), \quad (9.43)$$

gdzie  $\mathbf{A}$  jest  $p \times p$  macierzą o elementach (por. (9.42))

$$a_{rs} = \sum_{i=1}^n r_i(\mathbf{a}) \frac{\partial^2 r_i(\mathbf{a})}{\partial a_r \partial a_s} \quad (9.44)$$

$$= \sum_{i=1}^n (y_i - f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})) \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})}{\partial a_r \partial a_s}, \quad r, s = 1, \dots, p. \quad (9.45)$$

Po uwzględnieniu zależności (9.40) można również wyrazić Hessian w funkcji macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$  modelu linowego

$$\mathbf{H} = 2(\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \mathbf{A}). \quad (9.46)$$

Korzystając z wzorów (9.37) oraz (9.43) w powyższym równaniu, po przekształceniach, otrzymamy nową ocenę

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c - (\mathbf{J}^{cT} \mathbf{J}^c + \mathbf{A}^c)^{-1} \mathbf{J}^{cT} \mathbf{r}^c, \quad (9.47)$$

gdzie  $\mathbf{J}^c$ ,  $\mathbf{A}^c$  oraz  $\mathbf{r}^c$  wyznaczone są dla  $\mathbf{a} = \mathbf{a}^c$ . Wyrażając to równanie w funkcji macierzy eksperymentu  $\mathbf{X} = -\mathbf{J}$ , otrzymuje się równoważny wzór na kolejny krok iteracyjny w metodzie Newtona

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + (\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c + \mathbf{A}^c)^{-1} \mathbf{X}^{cT} \mathbf{r}^c. \quad (9.48)$$

Przypomnijmy, że kolejny krok iteracyjny w metodzie Gaussa–Newtona jest określony wyrażeniem (9.28)

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + (\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c)^{-1} \mathbf{X}^{cT} \mathbf{r}^c. \quad (9.49)$$

Tak więc kroki iteracyjne w obu metodach Newtona i Gaussa–Newtona określone są analogicznymi wzorami. Różnią się jedynie macierzą  $\mathbf{A}$ , która występuje w metodzie Newtona, a nie ma jej w metodzie Gaussa–Newtona. Zaletą procedury Newtona jest szybka zbieżność w otoczeniu lokalnego minimum (dokładnie dowodzi się, że metoda Newtona jest *q-kwadratowo zbieżna* [20]).

Podstawową wadą metody Newtona jest to, że obliczenie wartości elementów macierzy  $\mathbf{A}$  wymaga znajomości drugich pochodnych funkcji  $Q(\mathbf{a})$ , a to w wielu zastosowaniach jest problemem. Znacznie prostsza rachunkowo jest metoda Gaussa–Newtona, ale jest wolniej zbieżna i wymaga dokładniejszego przybliżenia początkowego niż metoda Newtona.

**Przykład 9.3.** Rozwiążemy zadanie z przykładu 9.2 metodą Newtona. W metodzie tej występuje dodatkowo macierz  $\mathbf{A}$ , której elementy są mieszanymi pochodnymi cząstkowymi określonymi wzorem (9.44). Pochodne cząstkowe funkcji  $f(x_i; \mathbf{a})$  wynoszą

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_1 \partial a_1} &= x_i^2 e^{a_1 x_i}, \\ \frac{\partial^2 f(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_2 \partial a_2} &= x_i^2 e^{a_2 x_i}, \\ \frac{\partial^2 f(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_1 \partial a_2} &= \frac{\partial^2 f(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_2 \partial a_1} = 0, \end{aligned}$$

więc na mocy (9.44)

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^4 r_i x_i^2 e^{a_1^c x_i} & 0 \\ 0 & \sum_{i=1}^4 r_i x_i^2 e^{a_2^c x_i} \end{bmatrix},$$

a stąd

$$\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c + \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{a_1^c x_i} (r_i(\mathbf{a}) + e^{a_1^c x_i}) & \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{x_i(a_1^c + a_2^c)} \\ \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{x_i(a_1^c + a_2^c)} & \sum_{i=1}^4 x_i^2 e^{a_2^c x_i} (r_i(\mathbf{a}) + e^{a_2^c x_i}) \end{bmatrix},$$

wyrażenie to podstawiamy do (9.48) i wyznaczamy następną ocenę  $\mathbf{a}^+$ .  $\square$

### 9.3.5. Uwagi o wyborze metod minimalizacji funkcji w metodzie NK

Przedstawione metody wyznaczania minimum funkcji kryterialnej  $Q(\mathbf{a})$  stanowią podstawę do opracowania praktycznych algorytmów będących zwykle modyfikacjami metod podstawowych. Rozróżnia się trzy sytuacje: *zerowe-różnice*, *małe-różnice* oraz *duże-różnice*. Terminy te odnoszą się do wartości różnic  $r_i(\mathbf{a})$  występujących we wzorze (9.35). Zerowe-różnice występują wtedy, gdy model jest dokładnie dopasowany do obserwacji  $y_i$  w każdym punkcie. Wtedy macierz  $\mathbf{A} = \mathbf{0}$  i obie metody GN oraz N pokrywają się. Małe-różnice występują wtedy, gdy elementy macierzy  $\mathbf{A}$  są znacznie mniejsze niż elementy macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ . Wtedy zbieżność ciągów iteracyjnych obu metod, GN i N, jest podobna i zalecane jest stosowanie metody GN lub jej modyfikacji jako prostszej rachunkowo. W przypadku dużych różnic metoda GN może być wolno zbieżna lub nawet rozbieżna. Zalecana jest wtedy metoda Newtona i jej modyfikacje, a zwłaszcza metoda Levenberga–Marquardta, która zostanie omówiona poniżej. Metoda ta jest również zalecana, gdy występują problemy z wyznaczeniem drugich pochodnych cząstkowych. Omawiane metody mogą być rozbieżne i wtedy należy rozważyć stosowanie innych metod, przegląd metod i ocenę ich zakresu zastosowań można znaleźć w cytowanej literaturze [20, 99].

Najczęściej stosowane są dwie modyfikacje metody GN. Pierwsza z nich, zaproponowana przez Hartleya [46], polega na określeniu długości kroku przez wyznaczenie minimum funkcji kryterialnej wzdłuż prostej przechodzącej przez bieżące

rozwiązanie  $\mathbf{a}^c$  o „kierunku Gaussa–Newtona”. To sprowadza się do wyznaczenia współczynnika  $\lambda$ , dla którego funkcja kryterialna wzdłuż linii

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + \lambda^c (\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c)^{-1} \mathbf{X}^c \mathbf{r}^c \quad (9.50)$$

osiąga minimum, a nowy punkt określony jest wyrażeniem (9.50).

Dużą popularność zdobyła druga z wymienionych modyfikacja metody GN zaproponowana przez Levenberga w 1944 r. [67] (jej uproszczoną wersję opublikował Marquardt w 1963 r. [73]) nazywana *metodą Levenberga–Marquardta*. Przedstawimy teraz jej podstawy.

Modyfikacja Levenberga polega na tym, że do wyrazów leżących na przekątnej macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ , w wyrażeniu  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  dodawane są nieujemne liczby. Pozwala to na dopuszczenie również rozwiązań dla źle uwarunkowanych macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  (pomysł ten był już wcześniej wykorzystywany w regresji liniowej w postaci tak zwanej „regresji krawędziowej” (por. [98])). Wtedy zamiast wyznaczania nowego przybliżenia  $\mathbf{a}^+$  ze wzoru Gaussa–Newtona (9.28) oblicza się nowe przybliżenie ze wzoru

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + (\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c + \mu \mathbf{D})^{-1} \mathbf{X}^{cT} \mathbf{r}^c, \quad (9.51)$$

gdzie  $\mathbf{D}$  jest macierzą diagonalną złożoną z nieujemnych elementów, natomiast  $\mu$  jest nieujemnym współczynnikiem liczbowym. Zwykle przyjmuje się, że  $\mathbf{D}$  jest macierzą jednostkową, ( $\mathbf{D} = \mathbf{I}_p$ ) i wtedy

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{a}^c + (\mathbf{X}^{cT} \mathbf{X}^c + \mu^c \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbf{X}^{cT} \mathbf{r}^c. \quad (9.52)$$

Gdy zachodzi ten warunek, kierunek Levenberga–Marquardta „interpoluje” między kierunkiem Gaussa–Newtona, gdy  $\mu^c \rightarrow 0$  oraz kierunkiem największego spadku (Newtona), gdy  $\mu^c \rightarrow \infty$  (por. wzór (9.48)).

Opracowano różne warianty metody Levenberga–Marquardta, które głównie zależą od strategii doboru wartości współczynnika  $\mu^c$  w kolejnych krokach iteracyjnych. Najprostsza metoda doboru  $\mu^c$  została zaproponowana przez Marquardta. W pierwszym kroku tej strategii przyjmuje się relatywnie małą wartość współczynnika  $\mu^c$ , powiedzmy 0,01. Jeśli w bieżącym,  $k$ -tym, kroku iteracyjnym nowa wartość przybliżenia  $\mathbf{a}^+$  określona wzorem (9.52) charakteryzuje się mniejszą wartością funkcji kryterialnej niż poprzednia,  $Q(\mathbf{a}^+) < Q(\mathbf{a}^c)$ , wtedy przyjmuje się nową ocenę  $\mathbf{a}^+$  za bieżącą i zmniejsza wartość współczynnika  $\mu$ , np.  $\mu^{(k+1)} = \mu^{(k)}/10$ . W ten sposób „zbliża się” algorytm do metody Gaussa–Newtona i równocześnie zwiększa krok następnej iteracji.

Jeżeli jednak bieżący krok iteracji nie spowodował zmniejszenia wartości funkcji kryterialnej, to zwiększa się wartość współczynnika  $\mu^c$ , np.  $\mu^{(k)} \rightarrow 10\mu^{(k)}$ , za

każdym razem, obliczając krok  $\delta^{(k)}$ . Proces ten powtarza się, aż doprowadzi do zmniejszenia funkcji kryterialnej i wtedy ponownie zmniejsza się wartość współczynnika  $\mu^{(k)}$ .

Opracowano kilka innych modyfikacji metody Levenberga–Marquardta. Dennis i Schnabel ([20], s. 228) rekomendują algorytm opracowany przez Moré’a [76], który wykorzystuje tzw. „śledzenie linii”. Istnieje ogólna zgoda, że algorytmy oparte na metodzie Levenberga–Marquardta są odpowiednie do nieliniowej metody najmniejszych kwadratów. Są one dość odporne na nietypowe sytuacje [99]. Jak wykazał Nazareth [82] dla dużych różnic algorytm może być zbyt wolno zbieżny lub nawet rozbieżny. Opracowano kilka algorytmów przeznaczonych do zadań z dużymi różnicami. Przegląd takich algorytmów i innych bardziej uniwersalnych, ich klasyfikację oraz metody doboru przedstawili Gill i Murray [33, 34]. Z tych metod szczególnie dużą popularnością cieszy się metoda simpleksów.

**Metoda simpleksów.** Interesującą metodą wykorzystującą ciekawy pomysł jest opracowana przez Neldera i Meada [83] *metoda simpleksów*. Jest ona relatywnie prosta w implementacji, nie wymaga obliczania pochodnych, ale jest wolno zbieżna, co ogranicza jej zastosowanie do modeli o małej liczbie parametrów. Przedstawimy krótko koncepcję tej metody.

Dany jest układ  $n + 1$  punktów  $x_0, x_1, \dots, x_n$  w przestrzeni euklidesowej  $\mathbb{R}^n$ . Przez *simpleks*  $x_0x_1 \dots x_n$  rozumie się zbiór wszystkich punktów  $x$  postaci

$$x = \lambda_0 x_0 + \lambda_1 x_1 + \dots + \lambda_n x_n, \quad (9.53)$$

gdzie

$$\lambda_0 + \dots + \lambda_n = 1, \quad \lambda_i > 0,$$

a mnożenie punktu przez liczbę i dodawanie punktów należy rozumieć tak jak w przestrzeni wektorowej. Punkty  $x_i$  nazywamy wierzchołkami simpleksu. Zakłada się, że punkty  $x_0, x_1, \dots, x_n$  są liniowo niezależne, tj. że nie leżą na jednej hiperpłaszczyźnie  $(n + 1)$ -wymiarowej. Oznacza to, że w  $\mathbb{R}^2$  punkty  $x_0, x_1, x_2$  nie leżą na jednej prostej, czyli simpleks  $x_0x_1x_2$  jest trójkątem (bez obwodu); analogicznie w  $\mathbb{R}^3$  simpleks  $x_0x_1x_2x_3$  jest wnętrzem niezdegenerowanego czworościanu – punkty  $x_0, x_1, x_2, x_3$  nie leżą na jednej płaszczyźnie.

Wyznaczanie minimum metodą simpleksów polega na skonstruowaniu ciągu simpleksów, który „zmierza” do szukanego optimum. Zaczyna się od propozycji simpleksu początkowego, który otrzymuje się, typując  $(n + 1)$ -punktów, a następnie przekształca go w kolejnych krokach, tak aby się przemieszczał w kierunku minimum i jednocześnie się zmniejszał. Ogólnie przekształcanie simpleksów polega na „uciekaniu” od punktu (wierzchołka simpleksu), w którym funkcja kryterialna

jest maksymalna w kierunku punktów (wierzchołków simpleksu) o małej wartości funkcji kryterialnej. Ten proces uważany jest za zakończony, gdy simpleks zawiera minimum, a jednocześnie długość maksymalnej krawędzi jest mniejsza od zadanego błędu oszacowania. Nalder zaproponował cztery przekształcenia: odbicie, rozciąganie, spłaszczenie i kontrakcja. Szczegółowe omówienie tych przekształceń, jak również propozycje innych rozwiązań, można znaleźć w literaturze, por. [12, 83].

Przedstawiono tu ogólny przegląd iteracyjnych algorytmów optymalizacyjnych. Wiele z nich ma kilka szczegółowych wariantów. W złożonych sytuacjach należy dokonać wyboru najbardziej odpowiedniego do rozważanego problemu. Wiele zalet mają algorytmy Levenberga–Marquardta, więc należy w pierwszym podejściu sprawdzić ich efektywność. W przypadkach gdy istnieje problem z wyznaczeniem pochodnych, należy sprawdzić przydatność metody simpleksów.



## Rozdział 10

# Ocena parametrów modeli w obecności liniowych ograniczeń

W wielu sytuacjach praktycznych parametry  $a_1, \dots, a_p$  modelu matematycznego mogą przyjmować wartości tylko z ograniczonego zbioru,  $\mathbf{a} \in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^p$ . Taka sytuacja prowadzi do zadania „wyznaczania minimum z ograniczeniami”. W praktycznych sytuacjach mogą występować ograniczenia różnego rodzaju; na przykład pewne parametry mające interpretację fizyczną przyjmują tylko nieujemne wartości. Z kolei w wielu modelach dopuszczalne są tylko takie wartości, które spełniają pewien układ równań, będący konsekwencją praw rządzących analizowanym zjawiskiem. Klasycznym przykładem są kąty trójkąta,  $\alpha, \beta, \gamma$ , które spełniają równanie  $\alpha + \beta + \gamma = \pi$ .

Jako inny przykład mogą służyć cztery wzorcowe źródła napięcia o wartościach  $e_1, e_2, e_3$  oraz  $e_4$ . Jeśli bada się różnice  $d_{ij} = e_i - e_j$ , między wartościami poszczególnych wzorców, to sumy tych różnic, które tworzą zamknięte „figury geometryczne” równe są zeru; na przykład dla wzorców  $e_1, e_2, e_3$  spełniony jest warunek „trójkąta”  $d_{12} + d_{23} + d_{31} = 0$ .

Ogólne zadanie wyznaczania minimum funkcji kryterialnej metody NK z ograniczeniami jest złożone i nie ma uniwersalnych metod jego rozwiązania. W rozdziale tym ograniczono się do omówienia podstawowego przypadku, gdy ograniczenia są określone za pomocą układu równań liniowych.

### 10.1. Model liniowy z ograniczeniami

Rozważono zwykły liniowy model regresji postaci  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , w którym  $\mathcal{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = 0$ ,  $D[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ ; a więc są to obserwacje nieskorelowane o tej samej „dokładności”. Przypomnijmy, że macierz eksperymentu  $\mathbf{X}$  ma wymiar  $n \times p$ , rząd  $p$ , przy czym  $p \leq n$ .

Założmy, że parametry modelu  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$  spełniają następujący układ  $q$  równań liniowych

$$\begin{aligned} g_{11}a_1 + g_{12}a_2 + \dots + g_{1p}a_p &= g_1 \\ g_{21}a_1 + g_{22}a_2 + \dots + g_{2p}a_p &= g_2 \\ \dots & \\ g_{q1}a_1 + g_{q2}a_2 + \dots + g_{qp}a_p &= g_q \end{aligned} \quad (10.1)$$

nazywanych *równaniami więzów*, które zapisano w formie macierzowej

$$\mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{g}, \quad (10.2)$$

gdzie  $\mathbf{G} = [g_{ij}]$  jest znaną macierzą o wymiarze  $q \times p$  rzędu  $q$ , przy czym  $q < p$ ;  $\mathbf{g} = [g_1, \dots, g_q]^T$  jest znanym wektorem współczynników równań liniowych, natomiast  $\mathbf{a}$  jest wektorem wyznaczanych parametrów. Założono, że  $\mathbf{G}$  jest macierzą pełnego rzędu:  $\text{rank}[\mathbf{G}] = q$ . Jeśli ten warunek nie jest spełniony, to pewne równania więzów są kombinacją liniową pozostałych i należy dokonać ich redukcji.

Estymacja parametrów  $a_j$  metodą NK polega tu na minimalizacji funkcji kryterialnej  $Q(\mathbf{a}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})$ , dla warunku, że estymatory parametrów spełniają równania więzów (10.2). Jest to więc problem wyznaczania minimum warunkowego formy kwadratowej dla liniowych ograniczeń. Do rozwiązania tego zadania mogą być stosowane dwie metody: „metoda elementów” zwana również, dla pewnych ograniczeń, „metodą redukcji zmiennych” oraz „metoda mnożników Lagrange’a”. Obie metody prowadzą do tego samego optymalnego rozwiązania, jednak ich własności numeryczne i wynikający stąd zakres zastosowań są różne. Metodę elementów stosuje się, gdy liczba równań więzów  $q$  spełnia nierówność  $q > p/2$ ; natomiast gdy liczba równań więzów jest mała,  $q < p/2$ , stosuje się metodę mnożników Lagrange’a [70].

## 10.2. Wyznaczenie estymatorów metodą redukcji zmiennych

Metoda redukcji zmiennych polega na wykorzystaniu równań więzów do redukcji liczby zmiennych  $a_j$ . Macierz  $\mathbf{G}$ , zgodnie z założeniem, ma rząd  $q$ , więc można wybrać  $q$  parametrów spośród  $a_1, \dots, a_p$  i wyrazić je jako kombinację liniową pozostałych parametrów. W tym celu macierz  $\mathbf{G}$  przedstawimy w postaci macierzy blokowej

$$\mathbf{G} = [\mathbf{G}_1 | \mathbf{G}_2],$$

gdzie  $\mathbf{G}_1$  jest macierzą złożoną z pierwszych  $p - q$  kolumn macierzy  $\mathbf{G}$ , natomiast  $\mathbf{G}_2$  jest nieosobliwą macierzą kwadratową o wymiarze  $q \times q$  (rzędu  $q$ ) złożoną z pozostałych kolumn tej macierzy. Istnienie nieosobliwej macierzy  $\mathbf{G}_2$  wynika z tego, że  $\text{rank} \mathbf{G} = q$  (jeśli ostatnie kolumny są liniowo zależne, to należy zmienić odpowiednio numerację parametrów – przestawić kolumny macierzy  $\mathbf{X}$ ). Równanie więzów można teraz zapisać

$$[\mathbf{G}_1 | \mathbf{G}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{bmatrix} = \mathbf{g},$$

gdzie wektor parametrów  $\mathbf{a}$  został podzielony zgodnie z podziałem macierzy  $\mathbf{G}$ , tj.  $\mathbf{a}_1 = [a_1, \dots, a_{p-q}]^T$  oraz  $\mathbf{a}_2 = [a_{p-q+1}, \dots, a_p]^T$ , więc

$$\mathbf{G}_1 \mathbf{a}_1 + \mathbf{G}_2 \mathbf{a}_2 = \mathbf{g}.$$

Rozwiązując powyższe równanie względem  $\mathbf{a}_2$ , otrzymano

$$\mathbf{a}_2 = \mathbf{G}_2^{-1}(\mathbf{g} - \mathbf{G}_1 \mathbf{a}_1). \quad (10.3)$$

Wynik ten wykorzystuje się do eliminacji parametrów  $\mathbf{a}_2$  z równań eksperymentu  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ . W tym celu dzieli się macierz eksperymentu  $\mathbf{X}$  w tej samej proporcji, jakiej podzielona została macierz  $\mathbf{G}$ , więc

$$\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1 | \mathbf{X}_2],$$

gdzie  $\mathbf{X}_1$  jest macierzą utworzoną z  $(p - q)$ -pierwszych kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ , natomiast  $\mathbf{X}_2$  jest macierzą utworzoną z pozostałych  $q$ -kolumn tej macierzy. Równanie eksperymentu można teraz zapisać

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= [\mathbf{X}_1 | \mathbf{X}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{bmatrix} + \boldsymbol{\varepsilon} \\ &= \mathbf{X}_1 \mathbf{a}_1 + \mathbf{X}_2 \mathbf{a}_2 + \boldsymbol{\varepsilon}. \end{aligned} \quad (10.4)$$

Po podstawieniu do wzoru (10.4) zamiast  $\mathbf{a}_2$  wyrażenie (10.3), po przekształceniach, otrzymuje się równanie  $\mathbf{y} - \mathbf{X}_2 \mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{g} = (\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2 \mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{G}_1) \mathbf{a}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}$ , które jest nowym macierzowym równaniem eksperymentu

$$\mathbf{y}_r = \mathbf{X}_r \mathbf{a}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (10.5)$$

gdzie wektor

$$\mathbf{y}_r = \mathbf{y} - \mathbf{X}_2 \mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{g} \quad (10.6)$$

reprezentuje transformowane obserwacje, natomiast

$$\mathbf{X}_r = \mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2 \mathbf{G}_2^{-1} \mathbf{G}_1 \quad (10.7)$$

jest transformowaną macierzą eksperymentu.

Na mocy wzoru  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  estymator NK parametrów  $\mathbf{a}_1$  jest równy

$$\hat{\mathbf{a}}_1 = (\mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r)^{-1} \mathbf{X}_r^T \mathbf{y}_r, \quad (10.8)$$

natomiast estymator pozostałych parametrów,  $\mathbf{a}_2$ , otrzymano po podstawieniu do wyrażenia (10.3) powyższego wzoru, stąd

$$\hat{\mathbf{a}}_2 = \mathbf{G}_2^{-1}(\mathbf{g} - \mathbf{G}_1 \hat{\mathbf{a}}_1). \quad (10.9)$$

**Przykład 10.1.** Zilustrujemy metodę na przykładzie wyznaczania kątów trójkąta. Wprawdzie w przykładzie tym występuje tylko jedno równanie więzów i trzy parametry, więc można go rozwiązać krócej omówioną w dalszej części rozdziału metodą mnożników Lagrange'a, to pouczające jest rozwiązanie zadania również metodą redukcji zmiennych.

Założono wykonanie pomiarów kątów trójkąta  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , z taką samą dokładnością, a wyniki wynoszą, odpowiednio  $y_1, y_2, y_3$ . Równanie więzów jest określone wzorem  $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = \pi$ . W macierzowym równaniu eksperymentu,  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , wektor obserwacji  $\mathbf{y} = [y_1, y_2, y_3]^T$ , wektor parametrów  $\mathbf{a} = [\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3]^T$ , natomiast macierz eksperymentu jest macierzą jednostkową  $\mathbf{X} = \mathbf{I}_3$  (co wynika z tego, że są to bezpośrednie pomiary parametrów).

Elementy macierzowego równania więzów (10.2) wynoszą:  $\mathbf{G} = [1 \ 1 \ 1]$  oraz  $\mathbf{g} = [\pi] = \pi$ . W przykładzie tym jest tylko jedno równanie więzów,  $q = 1$ , więc  $\mathbf{G}_1 = [1 \ 1]$ ,  $\mathbf{G}_2 = 1$ ,  $\mathbf{a}_1 = [\alpha_1, \alpha_2]^T$ ,  $\mathbf{a}_2 = [\alpha_3]^T$ ,

$$\mathbf{X}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (10.10)$$

Transformowane obserwacje  $\mathbf{y}_r$ , wyrażenie (10.6), oraz transformowana macierz eksperymentu  $\mathbf{X}_r$ , wyrażenie (10.7) są równe

$$\mathbf{y}_r = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 - \pi \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}_r = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (10.11)$$

Po podstawieniu tych wartości do (10.8) otrzymuje się estymatory parametrów  $\mathbf{a}_1$

$$\hat{\mathbf{a}}_1 = \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_1 \\ \hat{\alpha}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 + \frac{[\pi - (y_1 + y_2 + y_3)]}{3} \\ y_2 + \frac{[\pi - (y_1 + y_2 + y_3)]}{3} \end{bmatrix}, \quad (10.12)$$

a po wstawieniu wyznaczonego tu estymatora  $\mathbf{a}_1$  do wyrażenia (10.9) estymator

$$\hat{\mathbf{a}}_2 = \hat{\alpha}_3 = y_3 + \frac{[\pi - (y_1 + y_2 + y_3)]}{3}. \quad (10.13)$$

Tak więc estymator  $\hat{\alpha}_j$  kąta  $\alpha_j$ ,  $j = 1, 2, 3$ , jest równy wynikowi pomiaru  $y_j$  tego kąta plus człon korekcyjny  $[\pi - (y_1 + y_2 + y_3)]/3$ , który jest równy różnicy między dokładną wartością sumy wszystkich kątów równą  $\pi$ , a rzeczywistą wartością sumy obserwacji  $y_1 + y_2 + y_3$  podzieloną przez trzy. Korekcja polega więc na takiej transformacji wartości pomiarów, aby suma estymatorów była równa  $\pi$ . Zauważmy, że człon korekcyjny jest taki sam dla wszystkich kątów, co jest efektem założenia, że pomiary są jednakowej dokładności.  $\square$

**Przykład 10.2.** Dane są cztery wzorce napięcia o nieznanych wartościach  $e_1, e_2, e_3$  i  $e_4$ . Dokonano pomiarów pewnych różnic  $d_{ij}$ , a wyniki wynoszą  $d_{ij} = e_i - e_j + \varepsilon_{ij}$ . Zadanie polega na tym, aby korzystając z warunku, że sumy różnic po zamkniętych figurach są równe zeru, wyznaczyć estymatory różnic spełniające ten warunek. Schemat pomiarów różnic przedstawiono na rysunku 10.1, gdzie mierzone różnice  $d_{21}, d_{31}, d_{41}, d_{32}, d_{43}$  oznaczone są strzałkami. Spełniają one następujące równania więzów

$$\begin{aligned} d_{21} + d_{32} - d_{31} &= 0, \\ d_{31} + d_{43} - d_{41} &= 0, \\ d_{21} + d_{32} + d_{43} - d_{41} &= 0. \end{aligned}$$

Jeśli doda się stronami pierwsze równanie do drugiego, to otrzymamy trzecie równanie. Więc jest ono funkcją pozostałych równań i należy je usunąć. Otrzymuje się układ dwóch niezależnych równań więzów

$$\begin{aligned} d_{21} - d_{31} + d_{32} &= 0, \\ d_{31} - d_{41} + d_{43} &= 0. \end{aligned}$$

Elementy macierzowego równania więzów, (10.2), są równe

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$



gdzie symbol  $\mathbf{0}$  oznacza macierz złożoną z zer. Macierz  $\mathbf{X}_1$  ma wymiar  $2 \times 3$ , natomiast  $\mathbf{X}_2$  wymiar  $3 \times 2$ . Po podstawieniu tych wyników do (10.7) otrzymano

$$\mathbf{X}_r = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_3 \\ -\mathbf{G}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix},$$

skąd

$$\mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r = \mathbf{I}_3 + \mathbf{G}_1^T \mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix},$$

$$(\mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r)^{-1} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 5 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{X}_r^T \mathbf{y}_r = \mathbf{X}_r^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_{21} - y_{32} \\ y_{31} + y_{32} - y_{43} \\ y_{41} + y_{43} \end{bmatrix}.$$

Na mocy (10.8)

$$\hat{\mathbf{a}}_1 = \begin{bmatrix} \hat{d}_{21} \\ \hat{d}_{31} \\ \hat{d}_{41} \end{bmatrix} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} 5y_{21} + 2y_{31} + 1y_{41} - 3y_{32} - 1y_{43} \\ 2y_{21} + 4y_{31} + 2y_{41} + 2y_{32} - 2y_{43} \\ 1y_{21} + 2y_{31} + 5y_{41} + 1y_{32} + 3y_{43} \end{bmatrix}.$$

Estymatory pozostałych parametrów otrzymuje się ze wzoru (10.9), po uwzględnieniu zależności  $\mathbf{G}_2 = \mathbf{0}$  oraz  $\mathbf{g} = \mathbf{0}$

$$\hat{\mathbf{a}}_2 = \begin{bmatrix} \hat{d}_{32} \\ \hat{d}_{43} \end{bmatrix} = -\mathbf{G}_1 \hat{\mathbf{a}}_1 = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} -3y_{21} + 2y_{31} + 1y_{41} + 5y_{32} - 1y_{43} \\ -1y_{21} - 2y_{31} + 3y_{41} - 1y_{32} + 5y_{43} \end{bmatrix}.$$

Zauważmy, że we wszystkich estymatorach współczynniki liczbowe przy obserwacjach odpowiadających ocenianej różnicy (te same indeksy) są największe, a najmniejsze są współczynniki, które nie mają wspólnych indeksów z estymowaną różnicą, co jest zgodne z intuicją.  $\square$

### 10.3. Wyznaczenie estymatorów metodą mnożników Lagrange'a

Omówimy metodę mnożników Lagrange'a. Jej podstawy matematyczne podano w dodatku (A.2.2).

Niech  $\mathbf{G}_j = [g_{j1} \ g_{j2} \ \dots \ g_{jp}]$  oznacza  $j$ -ty wiersz macierzy  $\mathbf{G}$ , wtedy  $j$ -te równanie więzów (10.1) można zapisać

$$F_j(\mathbf{a}) = g_{j1}a_1 + \dots + g_{jp}a_p - g_j = \mathbf{G}_j\mathbf{a} - g_j = 0, \quad j = 1, \dots, q.$$

Funkcja Lagrange'a w tym przypadku jest równa

$$\Psi(\mathbf{a}) = Q(\mathbf{a}) - \lambda_1(\mathbf{G}_1\mathbf{a} - g_1) - \dots - \lambda_q(\mathbf{G}_q\mathbf{a} - g_q),$$

gdzie  $\lambda_1, \dots, \lambda_q$  są mnożnikami Lagrange'a (pomocniczymi zmiennymi). Definiując wektor  $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \dots, \lambda_q]^T$ , można funkcję Lagrange'a zapisać w postaci

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{a}) &= Q(\mathbf{a}) - \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g}) \\ &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}) - \boldsymbol{\lambda}^T(\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g}) \\ &= \mathbf{y}^T\mathbf{y} - \mathbf{a}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} - \mathbf{y}^T\mathbf{X}\mathbf{a} + \mathbf{a}^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{a} - \boldsymbol{\lambda}^T\mathbf{G}\mathbf{a} + \boldsymbol{\lambda}^T\mathbf{g}. \end{aligned} \quad (10.14)$$

Do wyznaczenia minimum funkcji Lagrange'a,  $\Psi$ , należy obliczyć jej pochodne względem parametrów  $a_j$  i przyrównać je do zera. Korzystając z własności pochodnych wektorowych (por. Dodatek A.2.1), po przekształceniach, otrzymuje się równanie

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = -2\mathbf{X}^T\mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{a} + \mathbf{G}^T\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}, \quad (10.15)$$

w którym uwzględniono równości  $\mathbf{a}^T\mathbf{X}^T\mathbf{y} = \mathbf{y}^T\mathbf{X}\mathbf{a}$  oraz  $\boldsymbol{\lambda}^T\mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{a}^T\mathbf{G}^T\boldsymbol{\lambda}$ . Równości te wynikają z tego, że poszczególne człony są liczbami (macierzami o wymiarze  $1 \times 1$ ), a transpozycja liczb nie zmienia ich wartości. Dwa człony z prawej strony równania (10.15) mają mnożnik 2, natomiast trzeci mnożnik 1. W trzecim członie występuje wektor  $\boldsymbol{\lambda}$  współczynników Lagrange'a, które są jedynie zmiennymi pomocniczymi. Jeśli więc zmniejszymy się dwukrotnie ich wartości, to w członie  $\mathbf{G}^T\boldsymbol{\lambda}$  wzoru (10.15) pojawi się mnożnik 2. Dzieląc, po tej zmianie, obie strony równania (10.15) przez 2 otrzymuje się

$$-\mathbf{X}^T\mathbf{y} + \mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{a} + \mathbf{G}^T\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}. \quad (10.16)$$

Dołączając (10.2) do (10.16), otrzymuje się, po przekształceniach, układ równań macierzowych

$$\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{X}^T\mathbf{y} - \mathbf{G}^T\boldsymbol{\lambda}, \quad (10.17)$$

$$\mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{g}. \quad (10.18)$$



Jest to układ  $p + q$  równań liniowych z  $p + q$  niewiadomymi:  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$  oraz  $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \dots, \lambda_q]^T$ , których rozwiązania oznaczono symbolami  $\hat{\mathbf{a}}_H$  oraz  $\hat{\boldsymbol{\lambda}}_H$ . Rozwiązując pierwsze równanie, (10.17), względem  $\mathbf{a}$ , otrzymuje się

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{a}}_H &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T \hat{\boldsymbol{\lambda}}_H \\ &= \hat{\mathbf{a}} - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T \hat{\boldsymbol{\lambda}}_H.\end{aligned}\quad (10.19)$$

Przy przejściu do ostatniej równości wykorzystano fakt, że człon  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  jest równy estymatorowi  $\hat{\mathbf{a}}$  parametrów  $\mathbf{a}$ , w zwykłej metodzie NK – bez ograniczeń. Wzór (10.19) nie nadaje się bezpośrednio do wyznaczania estymatorów parametrów  $\mathbf{a}$ , gdyż nie są znane estymatory  $\hat{\boldsymbol{\lambda}}_H$  mnożników Lagrange'a. Można je wyznaczyć, jeśli podstawią się do równań więzów (10.19) powyżej obliczony estymator  $\hat{\mathbf{a}}_H$ , skąd

$$\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T \hat{\boldsymbol{\lambda}}_H = \mathbf{G} \hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g}.$$

Po rozwiązaniu tego równania względem  $\hat{\boldsymbol{\lambda}}_H$  i podstawieniu wyniku do (10.19), otrzymuje się

$$\hat{\mathbf{a}}_H = \hat{\mathbf{a}} + (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T \left[ \mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T \right]^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{G} \hat{\mathbf{a}}).\quad (10.20)$$

Estymator  $\hat{\mathbf{a}}_H$  jest więc sumą estymatora  $\hat{\mathbf{a}}$  (parametrów bez ograniczeń) i członu korekcyjnego, który jest proporcjonalny do różnicy  $(\mathbf{g} - \mathbf{G} \hat{\mathbf{a}})$ , czyli dokładności spełnienia równań więzów.

We wzorze (10.20) występują odwrotności macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  oraz  $\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T$ . Ich istnienie wynika z założenia, że zarówno  $\mathbf{X}$ , jak i  $\mathbf{G}$  są macierzami pełnego rzędu.

**Bezpośrednie pomiary z liniowymi ograniczeniami.** Ważnym szczególnym przypadkiem analizowanego zagadnienia są bezpośrednie pomiary (obserwacje) parametrów, tj. gdy równania eksperymentu są postaci  $y_i = a_i + \varepsilon_i$   $i = 1, \dots, n$ . Wtedy macierz eksperymentu  $\mathbf{X}$  jest macierzą jednostkową  $\mathbf{X} = \mathbf{I}_n$ , a oceny parametrów są bezpośrednio równe obserwacjom  $\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{y}$ . Po uwzględnieniu tych wyników w (10.20) otrzymuje się następujący wzór na estymatory pomiarów bezpośrednich w obecności liniowych ograniczeń (10.2)

$$\hat{\mathbf{a}}_H = \mathbf{y} + \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{G}^T)^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{G} \mathbf{y}).\quad (10.21)$$

Oceny w tym przypadku wyznacza się, dodając człon korekcyjny  $\mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{G}^T)^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{G} \mathbf{y})$  do bezpośrednich obserwacji  $\mathbf{y}$ .

**Przykład 10.3.** Rozwiążemy zadanie wyznaczenia estymatorów kątów trójkąta z przykładu 10.1 metodą mnożników Lagrange'a. Jest to przypadek pomiarów bezpośrednich i należy zastosować wzór (10.21). Obliczymy poszczególne człony tego wzoru. Macierz  $\mathbf{G} = [1 \ 1 \ 1]$  (por. przykład 10.1), stąd

$$\mathbf{G}\mathbf{G}^T = 3 \quad \Rightarrow \quad (\mathbf{G}\mathbf{G}^T)^{-1} = \frac{1}{3}.$$

Wektor obserwacji  $\mathbf{y} = [y_1, y_2, y_3]^T$ , natomiast  $\mathbf{g} = \pi$ , stąd

$$\mathbf{g} - \mathbf{G}\mathbf{y} = \pi - [1 \ 1 \ 1] \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \pi - (y_1 + y_2 + y_3).$$

Po podstawieniu tych wyrażeń do (10.21) i przekształceniach otrzymuje się końcowe oceny

$$\hat{\mathbf{a}}_H = \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_1 \\ \hat{\alpha}_2 \\ \hat{\alpha}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} + \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \pi - (y_1 + y_2 + y_3) \\ \pi - (y_1 + y_2 + y_3) \\ \pi - (y_1 + y_2 + y_3) \end{bmatrix},$$

które są, zgodnie z oczekiwaniami, takie same jakie otrzymano metodą elementów (przykład 10.1 wzory (10.12) i (10.13)). Jednak obliczenia są teraz prostsze, co wynika głównie z tego, że zachodzi nierówność  $q < p/2$  ( $q = 1$ ,  $p = 3$ ), a to oznacza, że preferowana powinna być tu metoda mnożników Lagrange'a.  $\square$

**Przykład 10.4.** Pouczające jest rozwiązanie przykładu 10.2 metodą mnożników Lagrange'a i porównanie procedury i wyników z metodą elementów. Podano tu jedynie szkic rozwiązania, pozostawiając pełne rozwiązanie przykładu czytelnikowi.

Mamy do czynienia z pomiarami bezpośrednimi, więc stosujemy wzór (10.21), w którym  $\mathbf{g} = \mathbf{0}$ , stąd

$$\hat{\mathbf{a}}_H = [I_5 - \mathbf{G}^T(\mathbf{G}\mathbf{G}^T)^{-1}\mathbf{G}] \mathbf{y}.$$

Jeśli podstawimy się do tego wzoru

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

to po przekształceniach otrzymuje się

$$I_5 - \mathbf{G}^T(\mathbf{G}\mathbf{G}^T)^{-1}\mathbf{G} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} 5 & 2 & 1 & -3 & -1 \\ 2 & 4 & 2 & 2 & -2 \\ 1 & 2 & 5 & 1 & 3 \\ -3 & 2 & 1 & 5 & -1 \\ -1 & -2 & 3 & -1 & 5 \end{bmatrix}.$$

Wektor obserwacji  $\mathbf{y} = [y_{21}, y_{31}, y_{41}, y_{32}, y_{43}]^T$ , więc ze wzoru (10.21) można wyznaczyć oceny różnic  $d_{ij}$ , stąd na przykład estymator różnicy  $d_{21}$  wynosi

$$\hat{a}_1 = \hat{d}_{21} = \frac{1}{8}(5y_{21} + 2y_{31} + 1y_{41} - 3y_{32} - 1y_{43}),$$

czyli taki sam wzór jak w rozwiązaniu metodą redukcji zmiennych (por. przykład 10.2).  $\square$

#### 10.4. Własności estymatorów z ograniczeniami

Wykażemy, że estymator (10.20) minimalizuje różnicową sumę kwadratów  $\boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon} = \| \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{X}\mathbf{a} \|^2$ , przy założeniu, że spełniają one równania więzów (10.2). W tym celu przekształcimy następująco to wyrażenie

$$\begin{aligned} \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2 &= (\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{a}) \\ &= (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H + \hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{a})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H + \hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{a}) \\ &= (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H)^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H) + (\hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{a})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{a}) \\ &= \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H\|^2 + \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2. \end{aligned} \quad (10.22)$$

Przy przejściu od drugiego do trzeciego równania wykorzystano przekształcenie

$$(\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H)^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{a}) = \hat{\boldsymbol{\lambda}}_H^T \mathbf{G} (\hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{a}) = \hat{\boldsymbol{\lambda}}_H^T (\mathbf{g} - \mathbf{g}) = 0,$$

oraz równanie (10.19), z którego wynika, że  $(\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H)^T = \hat{\boldsymbol{\lambda}}_H^T \mathbf{G} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ .

W rozdziale 7 wykazano, por. rys. 7.1, że dla estymatora  $\hat{\mathbf{a}}$  bez ograniczeń, zachodzi wzór

$$Q(\mathbf{a}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}\|^2 + \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2, \quad (10.23)$$

więc na mocy (10.22)

$$Q(\mathbf{a}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}\|^2 + \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H\|^2 + \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H - \mathbf{X}\mathbf{a}\|^2. \quad (10.24)$$

Różnicowa suma kwadratów  $Q(\mathbf{a})$  osiąga minimum, względem parametrów  $a_j$ , gdy ostatni człon prawej strony wyrażenia (10.24) równy jest zeru, stąd  $\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H \Rightarrow \mathbf{a} = \hat{\mathbf{a}}_H$  (co wynika również stąd, że rząd macierzy  $\mathbf{X}$  równy jest liczbie jej kolumn  $p$ ).

Kładąc  $\mathbf{a} = \hat{\mathbf{a}}_H$  w (10.24), otrzymuje się użyteczny wzór

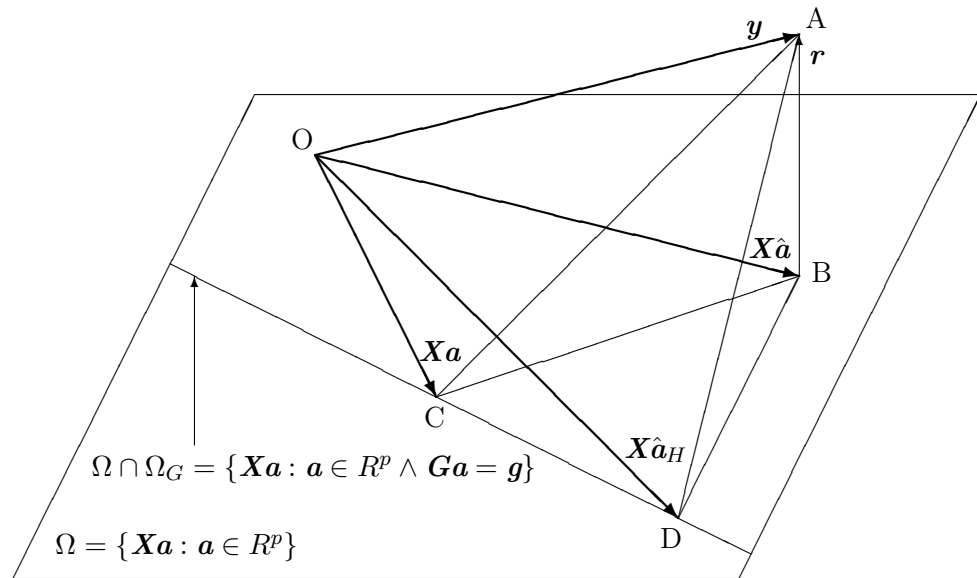
$$\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}\|^2 + \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H\|^2, \quad (10.25)$$

który po wprowadzeniu oznaczeń  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}$  oraz  $\hat{\mathbf{y}}_H = \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H$  ma postać

$$\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}_H\|^2 = \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 + \|\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_H\|^2. \quad (10.26)$$

Znaczenie tego wzoru będzie bardziej zrozumiałe, jeśli przedstawi się go w formie geometrycznej,

**Geometryczna interpretacja metody NK z ograniczeniami.** Na rysunku 10.2 przedstawiono geometryczną ilustrację metody NK z równaniami więzów (10.2). Powstał on z rozwinięcia rysunku 7.1 reprezentującego podstawową metodę NK (bez równań więzów). W metodzie NK bez ograniczeń wyznacza się minimalną



Rys. 10.2. Geometryczna ilustracja metody NK z równaniami więzów – minimalizacja odległości wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  (punktu A), od podprzestrzeni  $\Omega \cap \Omega_G$

odległość wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  od hiperpłaszczyzny  $\Omega = \{\mathbf{X}\mathbf{a} : \mathbf{a} \in R^p\}$ , a rozwiązaniem jest wektor  $\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}$ , który jest rzutem ortogonalnym wektora  $\mathbf{y}$  na hiperpłaszczyznę  $\Omega$ . Po dołączeniu liniowych ograniczeń poszukiwana jest minimalna odległość spośród tych wektorów z hiperpłaszczyzny  $\Omega$  (podprzestrzeni liniowej), które dodatkowo spełniają równania więzów. Równania więzów określają podprzestrzeń liniową  $\Omega_G$ . Oba warunki równania eksperymentu i równania więzów określają podzbiór  $\Omega \cap \Omega_G$  przestrzeni  $\Omega$  (podzbiór ten jest również podprzestrzenią liniową). Na rysunku zaznaczono go za pomocą linii prostej przechodzącej przez punkty C i D.

Zgodnie z metodą NK należy wyznaczyć wektor należący do  $\Omega \cap \Omega_G$ , który realizuje minimalną odległość wektora obserwacji  $\mathbf{y}$  od tej podprzestrzeni. Wynikiem jest rzut ortogonalny  $\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H$  wektora  $\mathbf{y}$  na  $\Omega \cap \Omega_G$ . Wektor  $\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H$  jest prostopadły do podprzestrzeni  $\Omega \cap \Omega_G$  (reprezentowanej na rysunku przez linię prostą przechodzącą przez punkty C i D). Ponadto wektor  $\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H$  (odcinek OD) jest rzutem ortogonalnym wektora  $\mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}$  (odcinka OB) na podprzestrzeń  $\Omega \cap \Omega_G$ . Stąd ADB, ABC, BDC oraz ABO są trójkątami prostokątnymi, a wzory (10.22), (10.23), (10.24), (10.25) oraz (10.26) wynikają z bezpośredniego zastosowania twierdzenia Pitagorasa dla tych trójkątów i tak:

- wzór (1.21) z trójkąta BCD; odcinek BC jest przeciwprostokątną,
- wzór (1.22) z trójkąta ABC; odcinek AC jest przeciwprostokątną,
- wzór (1.23) wynika ze wzoru (1.22), w którym wykorzystano fakt, że bok BC jest przeciwprostokątną trójkąta BCD.

Przedstawiona tu ilustracja geometryczna metody jest przydatna przy wyrowadzeniu wielu wzorów i w badaniu hipotezy o poprawności założonego modelu. Zagadnienie to omówiono w następnym rozdziale.



## Rozdział 11

# Testowanie hipotezy o wartościach parametrów modelu

Ważnym elementem analizy danych jest sprawdzenie czy założony model matematyczny badanego obiektu jest „zgodny” z obserwacjami. Zwykle zakłada się wstępnie, że model obiektu należy do określonej klasy funkcji „numerowanej” parametrami, na przykład, że jest wielomianem stopnia trzeciego. Następnie przeprowadza się eksperyment i za pomocą metod estymacji wyznacza się oceny parametrów założonego modelu na podstawie otrzymanych w eksperymencie obserwacji (pomiarów). Należy sprawdzić, czy założona hipoteza o klasie modeli jest słuszna. W wymienionym tu przykładzie może to oznaczać pytanie czy wielomian trzeciego stopnia jest właściwym modelem – czy nie należy rozważyć wielomianu innego stopnia: niższego lub wyższego. Może się również okazać, że założono wstępnie poprawny model, ale otrzymana wartość jednego parametru (lub kilku parametrów) jest mała, zbliżona do zera w porównaniu z innymi parametrami i wtedy pojawia się następne pytanie: czy powinno się przyjąć, że parametr ten jest równy zeru? Właściwym narzędziem matematycznym do badania tego typu hipotez jest test Fishera. W rozdziale tym omówiono podstawy matematyczne tego testu i podano przykłady zastosowań.

### 11.1. Test Fishera

#### 11.1.1. Podstawy matematyczne testu

Założono, że przedmiotem analizy jest podstawowy model regresji liniowej  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , w którym  $\mathbf{X}$  jest macierzą eksperymentu o wymiarze  $n \times p$ ,  $n \geq p$ , rzędu  $p$ ;  $\mathbf{y}$  jest  $n$ -wymiarowym wektorem obserwacji;  $\mathbf{a}$  jest  $p$ -wymiarowym wektorem parametrów modelu, natomiast  $\boldsymbol{\varepsilon}$  jest  $n$ -wymiarowym wektorem losowym, o którym założono, że ma  $n$ -wymiarowy rozkład normalny, tj.  $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ . Przedmiotem analizy jest testowanie hipotezy  $H$ , że wybrane parametry  $a_j$  speł-

niając założone równania liniowe. Na przykład, jeśli  $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]^T$  to hipoteza  $H$  może mieć postać:  $H : a_1 = 0$ . Innym bardziej złożonym przykładem hipotezy liniowej może być układ równań:  $2a_1 - a_3 = 0$  oraz  $a_1 + a_2 = 1$ .

Ogólnie dowolną hipotezę liniową  $H$  możemy wyrazić w formie układu  $q$  równań liniowych. Wykorzystując notację macierzową, hipotezę  $H$  można zapisać

$$H : \mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{g}, \quad (11.1)$$

gdzie  $\mathbf{G}$  jest znaną macierzą o wymiarze  $q \times p$  rzędu  $p$ ,  $q \leq p$ , natomiast  $\mathbf{g}$  znanym wektorem liczbowym o wymiarze  $q$ . Macierz  $\mathbf{G}$  oraz wektor  $\mathbf{g}$  dla drugiego z wymienionych przykładów,  $2a_1 - a_3 = 0$  oraz  $a_1 + a_2 = 1$ , wynoszą

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Jak wynika z równania (11.1) hipotezę liniową  $H$  zapisuje się w postaci równań więzów używanych do estymacji parametrów z ograniczeniami. Umożliwia to wykorzystanie wyników tej analizy do testowania hipotezy.

Istota testu Fishera polega na porównaniu różnicowej sumy kwadratów

$$RSS = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}\|^2, \quad (11.2)$$

wyznaczonej dla estymatora  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ , bez warunku (11.1), z różnicową sumą kwadratów

$$RSS_H = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H)^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}_H\|^2 \quad (11.3)$$

wyznaczoną dla estymatora (por. 10.20)

$$\hat{\mathbf{a}}_H = \hat{\mathbf{a}} + (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T [\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{a}}) \quad (11.4)$$

z warunkami (10.2). Dla powyższych założeń statystyka  $F$  służąca do testowania hipotezy  $H$ , określona jest twierdzeniem 11.1 (por. [98])

**Twierdzenie 11.1.** Jeśli spełnione są podane założenia, to

- $RSS_H - RSS = (\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g})^T [\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} (\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g})$ ,
- $E[RSS_H - RSS] = \sigma^2 q + (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g})^T [\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g})$ ,
- jeśli hipoteza  $H$  jest prawdziwa, to statystyka

$$F = \frac{(RSS_H - RSS)/q}{RSS/(n-p)} = \frac{(\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g})^T [\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} (\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g})}{qs^2}$$



ma rozkład Fishera z  $q$  i  $(n - p)$ -stopniami swobody,  $F = F_{q, n-p}$ , gdzie  $s^2 = RSS/(n - p) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})/(n - p)$  jest estymatorem wariancji  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji.

**Dowód.** (a) Ze wzoru (10.25)  $RSS_H - RSS = (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H)^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H)$  (por. również rys. 10.2); podstawiając w miejsce  $\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}_H$  wyrażenie

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T \left[ \mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T \right]^{-1} (\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g}),$$

które wynika z (11.4), po przekształceniach, otrzymuje się równanie (a).

(b) Zgodnie z przyjętymi założeniami estymator  $\hat{\mathbf{a}}$  ma rozkład normalny,  $\hat{\mathbf{a}} \sim N_p(\mathbf{a}, \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1})$ . Ponadto macierz  $\mathbf{G}$  ma pełny rząd, a stąd wynika, że wektor losowy  $\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}}$  ma również rozkład normalny,  $\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} \sim N_q(\mathbf{G}\mathbf{a}, \sigma^2 \mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T)$ . Wprowadzono pomocnicze oznaczenia  $\mathbf{z} = \mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g}$  oraz  $\mathbf{C} = \mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T$ , wtedy wektor wartości oczekiwanych wynosi

$$\mathcal{E}[\mathbf{z}] = \mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g},$$

natomiast macierz kowariancji

$$\mathcal{D}[\mathbf{z}] = \mathcal{D}[\mathbf{z}] = \mathcal{D}[\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}}] = \sigma^2 \mathbf{C}.$$

Dalej na mocy twierdzenia o wartości oczekiwanej formy kwadratowej (por. (B.6)) otrzymano

$$\begin{aligned} E[RRS_H - RSS] &= E[\mathbf{z}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{z}] \\ &= \text{tr}[\sigma^2 \mathbf{C}^{-1} \mathbf{C}] + (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g}) \\ &= \text{tr}[\sigma^2 \mathbf{I}_q] + (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g}) \\ &= \sigma^2 q + (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g}). \end{aligned} \quad (11.5)$$

(c) Dowód tego punktu wykracza poza omawiany tu materiał i go pominięto; znajduje się on, między innymi, w monografii Rao [89].  $\square$

Jeżeli hipoteza  $H$  jest prawdziwa, to iloczyn  $\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}}$  jest bliski  $\mathbf{g}$ , więc różnica  $\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g}$  jest mała, a stąd różnica  $RSS_H - RSS$  występująca w statystyce  $F$  (por. wyrażenie (c) w twierdzeniu 11.1) jest również mała. Jeśli  $\mathbf{G}\mathbf{a}$  znacznie różni się od  $\mathbf{g}$ , to różnica  $RSS_H - RSS$ , a w konsekwencji statystyka  $F$  ma tendencję do przyjmowania dużych wartości.

### 11.1.2. Własności testu $F$

Przedstawimy obecnie przesłanki, które przemawiają za stosowaniem testu  $F$ . Rozważmy licznik

$$s_H^2 = \frac{RSS_H - RSS}{q}$$

statystyki  $F$  (por. punkt (c) twierdzenia 11.1). Z punktu (b) twierdzenia wynika, że

$$E[s_H^2] = \sigma^2 + \frac{(\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g})^T [\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} (\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g})}{q} = \sigma^2 + \delta,$$

gdzie  $\sigma^2$  jest wariancją pojedynczej obserwacji, więc wartość oczekiwana  $E[s_H^2]$  może być przedstawiona jako suma dwóch składowych: wariancji  $\sigma^2$  pomiarów oraz nieujemnej liczby  $\delta$  ( $\delta \geq 0$ , gdyż macierz  $[\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1}$  jest dodatnio określona), której wartość zależy od tego, czy spełniona jest hipoteza.

Jeśli hipoteza  $H$  jest prawdziwa,  $\mathbf{G}\mathbf{a} - \mathbf{g} = \mathbf{0}$ , to  $\delta = 0$  i statystyka  $s_H^2$  jest nieobciążonym estymatorem wariancji  $\sigma^2$ . Jak wykazano w rozdziale 7 również statystyka  $s^2 = RSS/(n - p)$ , mianownik statystyki  $F$ , por. punkt (c) twierdzenia, jest nieobciążonym estymatorem wariancji  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji. Z tego wynika, że jeśli hipoteza  $H$  jest prawdziwa, to

$$F = \frac{s_H^2}{s^2} \approx 1,$$

natomiast jeśli hipoteza  $H$  nie jest prawdziwa, to  $\delta > 0$  i statystyka  $F$  ma tendencję do przyjmowania wartości większych od 1. Dla rozstrzygnięcia wyników testu należy jeszcze określić wartość *krytyczną* statystyki  $F$ , to jest taką liczbę, powyżej której odrzucamy hipotezę.

W celu wyznaczenia liczby krytycznej należy przyjąć poziom istotności  $\alpha$  testu i dla tego poziomu odczytać wartość krytyczną  $\gamma(\alpha)$  z tablic rozkładu Fishera o  $q$  i  $n - p$  stopniach swobody. Liczba krytyczna  $\gamma(\alpha)$  jest fraktylem, tj. liczbą spełniającą warunek  $F_F(\gamma(\alpha)) = \alpha$ , gdzie  $F_F$  jest dystrybuantą rozkładu Fishera. Jeśli statystyka  $F$ , obliczona ze wzoru podanego w twierdzeniu 11.1 punkt (c), dla otrzymanych w eksperymencie danych, przyjmuje wartość większą niż  $\gamma(\alpha)$ , to odrzuca się hipotezę, a jeśli mniejszą, to stwierdza się, że „nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy  $H$ ”. Sposób przeprowadzania testu zilustrowano przykładami (por. [98]).

**Przykład 11.1.** Założono, że w celu sprawdzenia czy dwa obiekty mają taką samą masę wykonano za pomocą wagi dwuszalkowej trzy pomiary: masy  $a_1$ , różnicy mas  $a_1 - a_2$  oraz sumy mas  $a_1 + a_2$ , stąd równania eksperymentu są następujące:

$$\begin{aligned} y_1 &= a_1 + \varepsilon_1, \\ y_2 &= a_1 - a_2 + \varepsilon_2, \\ y_3 &= a_1 + a_2 + \varepsilon_3. \end{aligned}$$

Założono, że spełniają one podstawowe założenia testu, a błędy mają rozkład normalny  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3]^T \sim N_3(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_3)$ .

Hipotezę  $H$  o równości mas zapisano w formie równania

$$H : a_1 = a_2.$$

Wyznamy teraz kolejno elementy statystyki  $F$  – wzoru (c) twierdzenia (11.1). Rozpocznemy od wyznaczenia estymatorów parametrów  $a_1$  oraz  $a_2$ . Elementy macierzewego równania eksperymentu są następujące: wektor obserwacji  $\mathbf{y} = [y_1, y_2, y_3]^T$ , wektor parametrów  $\mathbf{a} = [a_1, a_2]^T$ , wektor błędów  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3]^T$  i macierz eksperymentu

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Hipoteza  $H$  jest równoważna warunkowi (11.1), w którym

$$\mathbf{G} = [1 \quad -1], \quad \mathbf{g} = 0,$$

co można zapisać

$$[1 \quad -1] \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = 0.$$

Liczba obserwacji wynosi  $n = 3$ , liczba parametrów  $p = 2$ , a liczba równań więzów  $q = 1$ .

Macierz

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix},$$

więc estymatory parametrów są określone wzorem

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{a}} &= \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{bmatrix} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 + y_2 + y_3 \\ -y_2 + y_3 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{1}{3}(y_1 + y_2 + y_3) \\ \frac{1}{2}(-y_2 + y_3) \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

Na mocy (7.21)

$$\begin{aligned}RSS &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}} \\ &= y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 - 3\hat{a}_1^2 - 2\hat{a}_2^2,\end{aligned}$$

a stąd estymator  $\sigma^2$

$$\begin{aligned}s^2 &= RSS/(n-p) \\ &= y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 - 3\hat{a}_1^2 - 2\hat{a}_2^2,\end{aligned}$$

gdyż  $n - p = 3 - 2 = 1$ .

Pozostały jeszcze do wyznaczenia dwa człony  $\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g}$  oraz  $\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T$  występujące w liczniku statystyki  $F$ . Pierwszy z nich wynosi

$$\begin{aligned}\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g} &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{bmatrix} - 0 \\ &= \hat{a}_1 - \hat{a}_2,\end{aligned}$$

natomiast drugi

$$\begin{aligned}\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \\ &= \frac{5}{6}.\end{aligned}$$

Po podstawieniu obliczonych wyrażeń do wzoru (c) twierdzenia 11.1 otrzymuje się końcową postać statystyki  $F$

$$\begin{aligned}F &= \frac{(\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}})^T [\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{G}\hat{\mathbf{a}}}{qs^2} \\ &= \frac{(\hat{a}_1 - \hat{a}_2)^2}{\frac{5}{6}s^2},\end{aligned}\tag{11.6}$$

gdzie  $s^2 = RSS/(n-p) = RSS$ . Gdy hipoteza  $H$  jest prawdziwa, wtedy statystyka

$$F = F_{q,n-p} = F_{1,1}$$

ma rozkład Fishera z (1,1) stopniami swobody.

Zakładamy poziom istotności testu  $\alpha$  (zazwyczaj  $\alpha = 0,05$ ) i odczytujemy z tablic rozkładu Fishera wartość krytyczną (fraktyl)  $\gamma_{q,n-p}(\alpha)$  – dla  $\alpha = 0,05$  i warunków zadania  $\gamma_{1,1}(0,05) = 161$ . Obliczamy statystykę  $F$  ze wzoru (11.6), a następnie porównujemy ją z wartością krytyczną; jeśli  $F > \gamma_{q,n-p}(\alpha)$ , to odrzuca się hipotezę  $H$ , że  $a_1 = a_2$ , a jeśli zachodzi odwrotna nierówność, to „nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy”. Wyjątkowo duża wartość krytyczna statystyki w tym przykładzie wynika z małych wartości jej stopni swobody (1,1).  $\square$

**Przykład 11.2.** W przykładzie tym wykorzystano test Fishera do zbadania klasycznej hipotezy, że dwa ciągi obserwacji o tej samej wariancji i rozkładzie normalnym pochodzą z populacji o tej samej wartości oczekiwanej. Zadanie to ma wiele zastosowań; na przykład porównanie skuteczności dwóch technologii, porównanie wpływu nawożenia na plon danego owocu itd.

Niech  $y_1, \dots, y_n$  będzie ciągiem niezależnych obserwacji o rozkładzie normalnym  $N(a_y, \sigma^2)$ , natomiast  $z_1, \dots, z_m$  innym ciągiem niezależnych obserwacji, również o rozkładzie normalnym,  $N(a_z, \sigma^2)$ . Tworzy się test sprawdzający hipotezę

$$H : a_y = a_z.$$

*Rozwiązanie.* Równania eksperymentu dla pierwszego ciągu obserwacji wynoszą

$$y_i = a_y + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

a dla drugiego

$$z_j = a_z + \varepsilon_{n+j}, \quad j = 1, \dots, m.$$

Wspólne macierzowe równanie eksperymentu

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \\ \dots \\ z_1 \\ z_2 \\ \dots \\ z_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ \dots & \dots \\ 1 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ \dots & \dots \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_y \\ a_z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_n \\ \dots \\ \varepsilon_{n+1} \\ \varepsilon_{n+2} \\ \dots \\ \varepsilon_{n+m} \end{bmatrix}.$$

Tak więc w modelu  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , wektor obserwacji  $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n | z_1, z_2, \dots, z_m]^T$ , macierz eksperymentu

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ \dots & \dots \\ 1 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ \dots & \dots \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

wektor błędów  $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n | \varepsilon_{n+1}, \varepsilon_{n+2}, \dots, \varepsilon_{n+m}]^T$ , a wektor parametrów  $\mathbf{a} = [a_y, a_z]^T$ ; przy czym  $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_{n+m}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_{n+m})$ .

Hipoteza  $H: \mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{g}$  przyjmuje taką samą postać jak w poprzednim przykładzie, a więc  $\mathbf{G} = [1 \ -1]$  oraz  $\mathbf{g} = 0$ . Liczba wszystkich obserwacji wynosi  $n + m$ , liczba parametrów  $p = 2$ , natomiast liczba równań hipotezy  $q = 1$ .

Obliczono poszczególne człony składowe statystyki  $F$ . Macierz

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} n & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix}$$

i estymatory parametrów

$$\hat{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \hat{a}_y \\ \hat{a}_z \end{bmatrix} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{j=1}^m z_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ \bar{z} \end{bmatrix},$$

gdzie  $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$  oraz  $\bar{z} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m z_j$  są wartościami średnimi poszczególnych serii obserwacji. Otrzymany wynik, że estymatorami parametrów  $a_y$  oraz  $a_z$  są średnie arytmetyczne z odpowiednich serii obserwacji, jest konsekwencją założeń i jest zgodny z intuicją.

Pozostałe człony statystyki  $F$  wynoszą:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{g} &= \hat{a}_y - \hat{a}_z = \bar{y} - \bar{z} \\
 RSS &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{a}} \\
 &= \sum_{i=1}^n y_i^2 + \sum_{j=1}^m z_j^2 - n\bar{y}^2 - n\bar{z}^2 \\
 &= \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 + \sum_{j=1}^m (z_j - \bar{z})^2 \\
 \mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T &= \frac{1}{n} + \frac{1}{m}.
 \end{aligned}$$

Po podstawieniu tych wyników do wyrażenia (c) w twierdzeniu (11.1) otrzymuje się statystykę  $F$  służącą do testowania hipotezy  $H$

$$\begin{aligned}
 F &= \frac{(\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}})^T [\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{G}\hat{\mathbf{a}}}{qs^2} \\
 &= \frac{(\bar{y} - \bar{z})^2}{s^2 \left( \frac{1}{n} + \frac{1}{m} \right)}, \tag{11.7}
 \end{aligned}$$

gdzie

$$s^2 = RSS/(n + m - p) = RSS/(n + m - 2).$$

Gdy hipoteza  $H$  jest prawdziwa, wówczas statystyka  $F = F_{1, n+m-2}$  ma rozkład Fishera o  $(1, n+m-2)$  stopniach swobody. Na przykład jeśli założyć poziom istotności testu  $\alpha = 0,05$ , a liczba obserwacji wynosi  $n = m = 20$ , to z tablic rozkładu Fishera odczytuje się wartość krytyczną testu  $\gamma_{1, n+m-2}(\alpha) = \gamma_{1, 38}(0,05) = 4,20$ . Jeśli obliczona statystyka  $F$  ze wzoru (11.7) nie przekroczy wartości 4,20, to nie ma podstaw do odrzucenia hipotezy  $H$  o równości wartości średnich. W przeciwnym razie odrzuca się hipotezę.  $\square$

Warto zauważyć, że zachodzi następująca relacja między rozkładem Fishera  $F_{1,k}$  a rozkładem Studenta  $t_k$

$$F_{1,k} = t_k^2,$$

która jest często stosowana do testowania równości wartości oczekiwanych dwóch rozkładów.

### 11.2. Testowanie hipotezy o zadanej wartości parametru

Ważnym problemem jest zbadanie hipotezy, że wybrane parametry modelu przyjmują założone wartości. Jeśli na przykład celem badań byłoby wyznaczenie zależności siły  $F$  przyciągania się dwóch ciał o masach  $m_1$  i  $m_2$ , oddalonych od siebie na odległość  $r$ , to na podstawie eksperymentu sprawdza się hipotetyczny model

$$F = k \frac{m_1 m_2}{r^\theta},$$

gdzie  $k$  jest stałą grawitacji, natomiast  $\theta$  wykładnikiem, którego ocena otrzymana na podstawie pomiarów, jak można się spodziewać, jest liczbą zbliżoną do wartości 2. Pojawia się pytanie, czy można przyjąć, na podstawie takich pomiarów, że  $\theta = 2$ . Przedstawiono sposób wykorzystania testu Fishera do rozwiązania tego typu problemów.

Rozpatrzono podstawowy model regresji liniowej

$$y_i = a_0 + a_1 x_{i1} + a_2 x_{i2} + \cdots + a_{p-1} x_{i,p-1} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

gdzie obserwacje  $y_i$  są losowo niezależne i mają łączny rozkład normalny,  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ . Określono statystykę do testowania hipotezy  $H$ , że parametr  $a_j$  przyjmuje zadaną wartość, na przykład  $g$ :

$$H : a_j = g. \quad (11.8)$$

Przedstawimy sposób testowania tej hipotezy proponowany przez Sebera [100].

Użyteczne będzie wprowadzenie następującego podziału macierzy  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$  na macierze blokowe

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} l & \mathbf{m}^T \\ \mathbf{m} & \mathbf{D} \end{bmatrix}, \quad (11.9)$$

gdzie  $l$  jest macierzą o wymiarze  $1 \times 1$ , czyli liczbą,  $\mathbf{m}$  jest macierzą jednokolumnową, natomiast  $\mathbf{D}$  jest macierzą kwadratową o wymiarze  $(p-1) \times (p-1)$ .

Hipotezę  $H$ , (11.8), można przedstawić w formie macierzowej (11.1), gdzie  $\mathbf{a} = [a_0, \dots, a_{p-1}]^T$  jest wektorem parametrów, natomiast  $\mathbf{G} = [0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0]^T$  jest jednowierszową macierzą mającą jedynkę na pozycji  $j+1$  i zera na pozostałych pozycjach. Przy tych oznaczeniach wyrażenie  $\mathbf{G}\hat{\mathbf{a}} - g$  we wzorze (c) twierdzenia (11.1) przyjmuje postać

$$\hat{a}_j - g,$$

natomiast

$$[\mathbf{G}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{G}^T]^{-1} = d_{jj},$$



gdzie  $d_{jj}$  jest  $j$ -tym diagonalnym elementem macierzy  $\mathbf{D}$  określonej w (11.9). Uwzględniając te wyniki, statystykę  $F$  można zapisać

$$F_{1,n-p} = \frac{(\hat{a}_j - g)^2}{s^2 d_{jj}}, \quad (11.10)$$

gdzie  $s^2 = RSS/(n-p)$  jest estymatorem wariancji  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji. Statystyka  $F$ , jak zaznaczono we wzorze (11.10), ma  $(1, n-p)$  stopni swobody i podobnie jak w poprzednim przykładzie jest kwadratem  $t$  statystyki.

Przypomnijmy, że dla rozstrzygnięcia hipotezy  $H$  (11.8) należy obliczyć wartość statystyki  $F$  ze wzoru (11.10) i porównać ją z wartością krytyczną  $\gamma_{1,n-p}(\alpha)$  odczytaną z tablic rozkładu Fishera dla założonego poziomu istotności  $\alpha$ . Jeśli wartość obliczonej statystyki  $F$  jest mniejsza od wartości krytycznej, to „nie ma podstaw do odrzucenia” założonej hipotezy.

Seber [98] zaproponował użyteczny sposób uproszczenia obliczeń numerycznych oparty na dekompozycji macierzy  $\mathbf{D}$  i wykorzystaniu własności macierzy blokowych. W tym celu macierz eksperymentu  $\mathbf{X}$  przedstawimy w postaci

$$\mathbf{X} = [\mathbf{1}_n, \mathbf{X}_r],$$

gdzie  $\mathbf{1}_n$  jest pierwszą kolumną macierzy  $\mathbf{X}$  złożoną z jedynek, natomiast  $\mathbf{X}_r$  jest macierzą złożoną z pozostałych kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ . Wtedy macierz  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  można przedstawić w następującej postaci blokowej

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} n & n\bar{\mathbf{x}}^T \\ n\bar{\mathbf{x}} & \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r \end{bmatrix},$$

gdzie

$$\bar{\mathbf{x}} = [\bar{x}_{\cdot 1}, \bar{x}_{\cdot 2}, \dots, \bar{x}_{\cdot p-1}]^T$$

oznacza wektor (macierz jednokolumnową) złożony z wartości średnich odpowiednich kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ ;  $\bar{x}_{\cdot j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij}$ .

Stosując reguły odwracania macierzy blokowej (por. A.1.5), otrzymuje się

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} 1/n + \bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{V}^{-1} \bar{\mathbf{x}} & -\bar{\mathbf{x}} \mathbf{V}^{-1} \\ -\mathbf{V}^{-1} \bar{\mathbf{x}} & \mathbf{V}^{-1} \end{bmatrix}, \quad (11.11)$$

gdzie  $\mathbf{V} = \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r - n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{x}}^T$ , więc

$$v_{jk} = \sum_{i=1}^n x_{ij}x_{ik} - n\bar{x}_{\cdot j}\bar{x}_{\cdot k} = \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_{\cdot j})(x_{ik} - \bar{x}_{\cdot k}), \quad j, k = 1, \dots, p.$$

Macierz  $D$  określona w (11.9) jest odwrotnością macierzy  $V$ , więc

$$D = V^{-1}.$$

Podójście to pozwala na uproszczenie obliczeń elementów diagonalnych  $d_{jj}$  macierzy  $D$  znajdujących się we wzorze (11.10).

### 11.2.1. Testowanie hipotezy – nachylenie prostej o zadanej wartości

Zajmiemy się teraz problemem testowania hipotezy  $H$ , że współczynnik nachylenia  $a_1$  prostej  $y = a_0 + a_1x$  przyjmie zadaną wartość  $g$ ,  $H : a_1 = g$ . Na przykład  $H : a_1 = g = 0$ . Hipoteza o zerowym nachyleniu prostej ma wiele zastosowań, a zwłaszcza jest skutecznym narzędziem testowania hipotezy o braku trendu liniowego w obserwacjach.

Niech  $y_i = a_0 + a_1x_i + \varepsilon_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  będzie układem  $n$  równań eksperymentu. Testujemy hipotezę  $H : a_1 = g$ , gdzie  $g$  jest zadaną stałą liczbową. Macierz eksperymentu jest tu równa  $\mathbf{X} = [\mathbf{1}_n, \mathbf{x}]$ , gdzie  $\mathbf{1}_n = [1, 1, \dots, 1]^T$  jest wektorem o długości  $n$  złożonym z jedynek, natomiast  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$  jest wektorem składającym się z kolejnych wartości wielkości wejściowej  $x$ . Macierz

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_n^T \\ \mathbf{x}^T \end{bmatrix} [\mathbf{1}_n \mathbf{x}] = \begin{bmatrix} n & n\bar{x} \\ n\bar{x} & \sum x_i^2 \end{bmatrix},$$

odwrotna

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum x_i^2 & -\bar{x} \\ -\bar{x} & 1 \end{bmatrix} \quad (11.12)$$

oraz

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}.$$

Po podstawieniu tych wzorów do  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ , po przekształceniach, otrzymuje się

$$\hat{a}_0 = \bar{y} - \hat{a}_1 \bar{x}, \quad (11.13)$$

$$\hat{a}_1 = \frac{\sum y_i (x_i - \bar{x})}{\sum (x_i - \bar{x})^2} = \frac{\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sum (x_i - \bar{x})^2}. \quad (11.14)$$

Wyrównane oceny odpowiedzi układu wynoszą

$$\hat{y}_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (11.15)$$

a na mocy (11.13)

$$\hat{y}_i = \bar{y} + \hat{a}_1(x_i - \bar{x}), \quad i = 1, \dots, n. \quad (11.16)$$

Po uwzględnieniu tych wzorów w (11.10) i przyjęciu, że  $p = 2$  otrzymano statystykę

$$F_{1,n-2} = \frac{(\hat{a}_1 - g)^2}{s^2 d_{11}}, \quad (11.17)$$

gdzie estymator  $s^2$  wariancji  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji można obliczyć z podanych wzorów

$$\begin{aligned} (n-2)s^2 &= \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 \\ &= \sum [y_i - \bar{y} - \hat{a}_1(x_i - \bar{x})]^2 \\ &= \sum (y_i - \bar{y})^2 - \hat{a}_1^2 \sum (x_i - \bar{x})^2 \\ &= \sum (y_i - \bar{y})^2 - \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2. \end{aligned} \quad (11.18)$$

$$= \sum (y_i - \bar{y})^2 - \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2. \quad (11.19)$$

Wszystkie sumy są liczone od  $i = 1$  do  $n$ , natomiast

$$d_{11} = \frac{1}{\sum (x_i - \bar{x})^2}.$$

Dla hipotezy  $H : a_1 = 0$  statystyka

$$F = \frac{\hat{a}_1^2}{s^2 d_{11}}. \quad (11.20)$$

Po uwzględnieniu (11.12) statystykę  $F$  przekształca się do

$$F = \frac{\hat{a}_1^2}{s^2} \sum (x_i - \bar{x}). \quad (11.21)$$

Ze wzoru (11.19) otrzymuje się

$$\sum (y_i - \bar{y})^2 = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (11.22)$$

$$= \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + r^2 \sum (y_i - \bar{y})^2, \quad (11.23)$$

gdzie

$$\begin{aligned} r^2 &= \frac{\sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \\ &= \frac{\hat{a}_1^2 \sum (x_i - \bar{x})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \\ &= \frac{[\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})]^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2 \sum (x_i - \bar{x})^2} \end{aligned} \quad (11.24)$$

jest kwadratem „współczynnika korelacji próby” między  $y$  a  $x$ . Współczynnik  $r$  może służyć za miarę stopnia zależności liniowej między obserwacjami  $y$  a regresorem  $x$ . Wynika to stąd, że na mocy (11.19) różnicowa suma kwadratów jest następującą funkcją  $r$

$$\begin{aligned} RSS &= \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 \\ &= (1 - r^2) \sum (y_i - \bar{y})^2. \end{aligned} \quad (11.25)$$

Tak więc im większa jest wartość  $r^2$  – bliższa jedności – tym mniejsza jest wartość  $RSS$ , zwłaszcza gdy  $r^2 = 1$ ,  $RSS = 0$  i wszystkie obserwacje leżą na prostej. Jednak relacja między współczynnikiem korelacji  $r$  a regresją jest bardziej złożona. Problem ten analizował Warren [110].

Przedstawiono jeszcze użyteczną zależność statystyki  $F$  określoną przez wyrażenie (11.21) w funkcji  $r^2$ . Z równania (11.25) otrzymano

$$RSS = (n - 2)s^2 = (1 - r^2) \sum (y_i - \bar{y})^2, \quad (11.26)$$

więc

$$\begin{aligned} F &= \frac{\hat{a}_1^2 \sum (x_i - \bar{x})^2 (n - 2)}{(1 - r^2) \sum (y_i - \bar{y})^2} \\ &= \frac{r^2 (n - 2)}{1 - r^2}. \end{aligned} \quad (11.27)$$

Statystyka ta ma  $(1, n - 2)$  stopni swobody i jest kwadratem statystyki Studenta stosowanej do testowania hipotezy  $H : a_1 = 0$ . Statystyka ta określona jest wyrażeniem

$$T = \frac{r}{\sqrt{(1 - r^2)/(n - 2)}}. \quad (11.28)$$

### 11.3. Wieloparametrowy współczynnik regresji

Zajęto się problemem testowania hipotezy, że wszystkie parametry liniowego modelu regresji, z wyjątkiem  $a_0$ , są równe zero. Założono model  $y_i = a_0 + a_1 x_{i1} + a_2 x_{i2} + \dots + a_{p-1} x_{i,p-1} + \varepsilon_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , więc hipoteza  $H : a_1 = a_2 = \dots = a_{p-1} = 0$ ; zapisano ją w formie macierzowej  $H : \mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{0}$ , gdzie  $\mathbf{G} = [\mathbf{0}, \mathbf{I}_{p-1}]$  jest macierzą o wymiarze  $(p-1) \times p$  rzędu  $p-1$ . Liczba równań

więzów  $q = p - 1$ ; różnicowa suma kwadratów  $RSS = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ , natomiast różnicowa suma kwadratów dla warunku  $H$

$$\begin{aligned} RSS_H &= \min_{a_0} \sum (y_i - a_0)^2 \\ &= \sum (y_i - \bar{y})^2 \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} = n\bar{y}. \end{aligned}$$

Uwzględniając te wyniki w wyrażeniu z punktu (c) twierdzenia, otrzymuje się

$$\begin{aligned} F &= \frac{(RSS_H - RSS)/(p - 1)}{RSS/(n - p)} \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - n\bar{y}^2)}{(\mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y})} \cdot \frac{(n - p)}{(p - 1)}. \end{aligned}$$

Gdy hipoteza  $H$  jest prawdziwa, statystyka ma  $(p - 1, n - p)$  stopni swobody, co oznacza, że  $F = F_{p-1, n-p}$ .

Użyteczną miarą dopasowania estymowanego modelu liniowego do obserwacji  $y_i$  jest *wieloparametrowy współczynnik korelacji z próby*. Współczynnik ten jest definiowany jako korelacja między obserwacjami  $y_i$  a ich wyrównanymi wartościami  $\hat{y}_i$ , więc

$$R = \frac{\sum (y_i - \bar{y})(\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})}{[\sum (y_i - \bar{y})^2 \sum (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2]^{1/2}}. \quad (11.29)$$

Wyrażenie (11.29) można przekształcić do postaci

$$R^2 = \frac{\sum (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2}.$$

Parametr  $R^2$  jest uogólnieniem parametru  $r^2$  dla linii prostej. W szczególnym przypadku równanie (11.26) przyjmie postać

$$RSS = (n - 2)s^2 = (1 - R^2) \sum (y_i - \bar{y})^2. \quad (11.30)$$

Im większa jest wartość współczynnika  $R^2$ , tym lepsze jest dopasowanie obserwacji do estymowanej powierzchni. Jeśli obserwacje  $y_i$  są równe wyrównanym obserwacjom  $\hat{y}_i$ , otrzymuje się dokładne dopasowanie oraz  $R^2 = 1$ . Dla pojedynczego regresora  $x$  oba współczynniki są tożsame,  $R^2 = r^2$ .

W rozdziale tym przedstawiono podstawowe metody testowania hipotezy, że parametry modelu przyjmują założone wartości. Zaletą tych metod jest prostota i szeroki zakres zastosowań. Należy jednak podkreślić, że metody te mają również pewne słabe strony. Na przykład, jeśli testujemy hipotezę, że wszystkie parametry modelu, z wyjątkiem wyrazu wolnego  $a_0$ , są równe zero, to może się pojawić sytuacja, że w jednoczesnym testowaniu wszystkich parametrów hipoteza jest odrzucona, natomiast w testowaniu indywidualnych hipotez;  $H_j : a_j = 0$ , żadna cząstkowa hipoteza nie zostanie odrzucona. Miller analizował różnego typu problemy występujące w testowaniu wartości parametrów modelu regresji i podał kilka interesujących rozwiązań w [75].

## Rozdział 12

# Regresja wielomianowa

Wśród różnych klas modeli matematycznych szczególnie duże znaczenie mają wielomiany. Wynika to z wielu ich zalet [96], wśród których najważniejsze to:

- zbiór wielomianów  $\mathcal{P}_m$  stopnia nie większego niż  $m$  tworzy przestrzeń liniową,
- wielomiany są funkcjami gładkimi,
- wielomiany nadają się do obliczeń numerycznych – zwłaszcza komputerowych,
- pochodne wielomianów są również wielomianami,
- każdą funkcję ciągłą określoną w przedziale  $[c, d]$  można z dowolną dokładnością, w sensie normy  $\|\cdot\|_\infty$ , aproksymować wielomianem (twierdzenie Weierstrassa),
- macierze eksperymentu modeli wielomianowych mają pełny rząd (dla różnych punktów pomiarowych).

Zalety te powodują, że w przypadku braku wstępnych przesłanek pozwalających na wybór modelu pierwszą testowaną klasą są z reguły wielomiany. Ważnym zastosowaniem wielomianów jest optymalizacja polegająca na wyznaczeniu punktów minimalizujących tak zwaną „funkcję kosztów”. Często model optymalizowanego obiektu nie jest znany. Wtedy jedną z podstawowych metod optymalizacji jest metoda iteracyjna z wykorzystaniem wielomianów. W otoczeniu zadanych punktów konstruuje się lokalny wielomianowy model obiektu i wyznacza jego optymalny punkt. Następnie w otoczeniu tego rozwiązania konstruuje się nowy model lokalny i wyznacza optimum. Ten proces kontynuuje się, aż do uzyskania wystarczająco dokładnego rozwiązania.

W rozdziale tym omówiono problemy konstruowania modeli wielomianowych jednej zmiennej, „funkcje sklepane” oraz wielomiany wielu zmiennych.

## 12.1. Wielomiany jednej zmiennej

### 12.1.1. Problem obliczeniowy

Omawianie zagadnienia rozpoczęto od przedstawienia problemów numerycznych związanych z własnościami modelu wielomianowego. Kładąc  $x_{ij} = x_i^j$  w ogólnym modelu regresji liniowej  $y_i = a_0 + a_1x_{i1} + \dots + a_px_{i,p} + \varepsilon_i$ , otrzymuje się model wielomianowy

$$y_i = a_0 + a_1x_i + \dots + a_px_i^p + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (12.1)$$

Macierz eksperymentu ma postać

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^p \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^p \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^p \end{bmatrix}, \quad (12.2)$$

stąd  $(rs)$ -ty element macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest równy  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})_{rs} = \sum_{i=1}^n x_i^{r+s}$ . Załóżmy, dla ustalenia uwagi, że elementy  $x_i$  są równomiernie rozłożone w przedziale  $\langle 0, 1 \rangle$ , wtedy dla dużych  $n$   $(rs)$ -ty element macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  można zapisać [30]

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})_{rs} &= n \sum_{i=1}^n x_i^r x_i^s \frac{1}{n} \\ &\approx n \int_0^1 x^{r+s} dx \\ &= \frac{n}{r+s+1}. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Wynika stąd, że macierz  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  jest w przybliżeniu równa macierzy  $\mathbf{H}_{p+1}$  o wymiarze  $(p+1) \times (p+1)$  leżącej w lewym górnym rogu macierzy Hilberta

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \dots \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \dots \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}.$$

Todd [106] wykazał, że macierze  $\mathbf{H}_{p+1}$  są źle uwarunkowane. Miarą uwarunkowania macierzy  $\mathbf{A}$  jest *liczba warunkowa* definiowana wzorem  $\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\|$ .



Dla macierzy symetrycznej dodatnio określonej jest ona równa stosunkowi maksymalnej  $\lambda_{\max}$  do minimalnej  $\lambda_{\min}$  wartości własnej macierzy  $\mathbf{A}$ ,  $\kappa(\mathbf{A}) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ . Liczba warunkowa macierzy jednostkowej wynosi 1, a macierzy osobliwej  $\infty$ .

Liczba warunkowa macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  modelu wielomianowego rośnie szybko wraz ze wzrostem stopnia wielomianu. Na przykład dla wielomianu stopnia  $k = 10$  liczba warunkowa wynosi  $3 \cdot 10^{10}$  [98], a to oznacza, że błędy obliczeń zwiększają się  $3 \cdot 10^{10}$  razy.

Numeryczne problemy związane ze złym uwarunkowaniem macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  wzrastają szybko wraz ze wzrostem stopnia wielomianu. Już dla wielomianu stopnia 5 mogą być istotne. Żeby temu przeciwdziałać, należy stosować odpowiednie algorytmy obliczeniowe lub/i wielomiany ortogonalne. Opracowano kilka klas wielomianów ortogonalnych, które mają różne zastosowania w zależności od definicji funkcji kryterialnej i miar odległości między funkcjami. Za przykład wielomianów ortogonalnych znajdujących duże zastosowanie mogą służyć wielomiany Czebyszewa [98].

### 12.1.2. Wybór stopnia wielomianu

Podstawowym zadaniem, przed którym zwykle stajemy, wyznaczając modele wielomianowe, jest określenie stopnia wielomianu aproksymującego dane eksperymentalne.

Opracowano wiele metod wyznaczania stopnia wielomianu [53, 80]. Najbardziej znanymi są: kryterium Akaike'a, metoda selekcji w przód i metoda wstecznej eliminacji. Kryterium Akaike'a oparte jest na analizie funkcji wiarygodności, co ogranicza jego zastosowanie w praktyce. Omówiono krótko dwie pozostałe wymienione tu metody.

*Metoda selekcji w przód* (SP) polega na dopasowywaniu do danych kolejnych wielomianów o coraz większym stopniu i badaniu „dokładności dopasowania.” Wyznaczamy wielomian najpierw dla minimalnego stopnia, zwykle  $p = p_{\min} = 1$ , a następnie dla  $p = p_{\min} + 1$ ,  $p = p_{\min} + 2, \dots$ . Za każdym razem oblicza się wartość różnicowej sumy kwadratów,  $Q_p = RSS_p$ . W idealnym przypadku gdy rzeczywistym modelem analizowanego obiektu jest wielomian stopnia  $p$ , ciąg wartości  $\{Q\} = Q_1, Q_2, \dots$  szybko maleje, aż do elementu  $Q_p$  i dalej zmienia się nieznacznie. Ten punkt stabilizacji wskazuje na stopień wyznaczanego wielomianu. W przypadku pojawienia się wątpliwości należy wykorzystać test istotności, testując wartość najwyższego współczynnika ostatniego wielomianu. Jednak procedurę tę należy stosować ostrożnie, ponieważ może ona prowadzić do błędnych wyników. Na przykład w dopasowaniu wielomianu do funkcji (w przybliżeniu)

symetrycznej współczynniki o nieparzystych numerach mają małe wartości w porównaniu ze współczynnikami o parzystych numerach i mogą być nieistotne. Ciąg  $\{Q\}$ , będzie się na przemian stabilizował i znacznie się zmniejszał. Mogą pojawić się również sytuacje, gdy ciąg różnicowych sum kwadratów  $\{Q\}$  stabilizuje się na określonym poziomie przez kilka kolejnych elementów, aby potem ponownie istotnie się zmniejszyć. W przypadku trudności w określeniu punktu stabilizacji ciągu  $\{Q\}$  należy się odwołać do innej metody, a zwłaszcza do metody wstecznej eliminacji.

*Metoda wstecznej eliminacji* (WE) bazuje na statystyce  $F$ . Procedurę zaczyna się od „dopasowania” wielomianu o wysokim stopniu, na przykład  $p$ . Następnie testuje się hipotezę  $H_0$ , z użyciem statystyki  $F$ , badając czy współczynnik  $a_p$ , przy największej potędze jest równy zeru,  $H_0 : a_p = 0$ . Jeśli wynik testu jest pozytywny, to najwyższy współczynnik eliminujemy obniżając stopień wielomianu o jeden. Procedurę powtarza się kolejno dla wielomianów o coraz niższym stopniu, aż do momentu otrzymania negatywnej odpowiedzi, tzn. gdy akceptuje się alternatywną hipotezę  $H_1$ , że  $a_p \neq 0$ . Przyjmuje się, że aktualna wartość  $p$  jest właściwym stopniem wielomianu.

Pozostało jeszcze skontrolowanie wartości pozostałych współczynników wielomianu, jeśli np. jeden z nich, lub więcej, jest bliski zeru, to należy sprawdzić hipotezę, czy można przyjąć, że jest on równy zeru. Sprawdzenia tego można dokonać za pomocą statystyki  $F$ .

## 12.2. Wielomiany ortogonalne

Jak wynika z analizy przeprowadzonej w rozdziale 7 szczególnie użyteczna jest sytuacja, gdy kolumny macierzy eksperymentu są ortogonalne. Można to osiągnąć, stosując wielomiany ortogonalne.

### 12.2.1. Podstawowe własności wielomianów ortogonalnych

Równania regresji zapiszemy w postaci

$$y_i = b_0 p_0(x_i) + b_1 p_1(x_i) + \dots + b_p p_p(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (12.4)$$

gdzie  $p_r(x_i)$  oznacza wielomian stopnia  $r$  zmiennej  $x_i$ ,  $r = 0, 1, \dots, p$  (parametry modelu regresji skonstruowanego na bazie wielomianów ortogonalnych oznacza się tu symbolem  $b_j$ , dla odróżnienia od parametrów w ogólnym modelu regresji ozna-

czanych symbolem  $a_j$ ). Założono, że wszystkie wielomiany w (12.4) są ortogonalne na zbiorze wartości  $\{x_i\}$ , co oznacza, że

$$\sum_{i=1}^n p_r(x_i)p_s(x_i) = 0, \quad \text{dla } r \neq s. \quad (12.5)$$

Zapiszemy równania (12.4) w formie macierzowej  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , w której  $\mathbf{b} = [b_0, b_1, \dots, b_p]^T$  jest wektorem parametrów modelu, a macierz eksperymentu

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} p_0(x_1) & p_1(x_1) & \cdots & p_p(x_1) \\ p_0(x_2) & p_1(x_2) & \cdots & p_p(x_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ p_0(x_n) & p_1(x_n) & \cdots & p_p(x_n) \end{bmatrix}$$

ma wzajemnie ortogonalne kolumny, stąd

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n p_0^2(x_i) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sum_{i=1}^n p_1^2(x_i) & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sum_{i=1}^n p_p^2(x_i) \end{bmatrix}$$

jest macierzą przekątniową. Ze wzoru  $\hat{\mathbf{b}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$  otrzymamy estymatory

$$\hat{b}_k = \frac{\sum_{i=1}^n p_k(x_i)y_i}{\sum_{i=1}^n p_k^2(x_i)}, \quad k = 0, 1, \dots, p. \quad (12.6)$$

Każdy parametr  $b_k$  jest estymowany niezależnie od innych parametrów i założonego stopnia  $p$  wielomianu. Jest to szczególnie pożądana własność ortogonalnej macierzy eksperymentu.

Wielomian  $p_0(x_i)$  ma zerowy stopień, więc przyjmując  $p_0(x_i) \equiv 1$  w (12.6) otrzymano

$$\begin{aligned} \hat{b}_0 &= \frac{\sum_{i=1}^n 1 \cdot y_i}{\sum_{i=1}^n 1} \\ &= \bar{y}. \end{aligned}$$

Jak widać, estymator ten nie zależy od wyboru punktów  $x_i$ .

Ortogonalność macierzy  $\mathbf{X}$  ułatwia sprawdzenie hipotezy o stopniu wielomianu. Załóżmy, że chcemy sprawdzić, metodą wstecznej eliminacji hipotezę

$H : b_p = 0$  – że stopień wielomianu wynosi  $p$ . W tym celu estymuje się najpierw parametry wielomianu  $p$ -tego stopnia i wyznacza dla niego różnicową sumę kwadratów

$$\begin{aligned} RSS_p &= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\mathbf{b}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\mathbf{b}} \\ &= \sum_{i=1}^n y_i^2 - \sum_{k=0}^p \hat{b}_k^2 \left[ \sum_{i=1}^n p_k^2(x_i) \right] \\ &= \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \sum_{k=1}^p \hat{b}_k^2 \left[ \sum_{i=1}^n p_k^2(x_i) \right]. \end{aligned} \quad (12.7)$$

Następnie estymuje się parametry wielomianu  $(p-1)$ -ego stopnia i wyznacza się różnicową sumę kwadratów

$$RSS_{p-1} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \sum_{k=1}^{p-1} \hat{b}_k^2 \left[ \sum_{i=1}^n p_k^2(x_i) \right]. \quad (12.8)$$

Estymatory  $\hat{b}_k$  w (12.7) i (12.8) są takie same, co wynika z ortogonalności kolumn macierzy  $\mathbf{X}$ . Po uwzględnieniu w (12.8) wyrażenia (12.7) otrzymano

$$RSS_{p-1} = RSS_p + \hat{b}_p^2 \sum_{i=1}^n p_p^2(x_i).$$

Wykorzystując te wyniki oraz to, że liczba równań więzów  $q = 1$ , otrzymano następujące wzory określające statystykę  $F$

$$\begin{aligned} F &= \frac{RSS_{p-1} - RSS_p}{\frac{RSS_p}{n-p-1}} \\ &= \frac{\hat{b}_p^2 \sum_{i=1}^n p_p^2(x_i)}{\frac{RSS_p}{n-p-1}}. \end{aligned} \quad (12.9)$$

Testowanie hipotezy o zerowej wartości parametru przy największej potędze jest proste – tak jak inne elementy analizy regresji, gdy macierz eksperymentu ma ortogonalną strukturę. Ta własność również przemawia za stosowaniem metody wstecznej eliminacji. Jednak warunkiem jej stosowania jest wyznaczenie ortogonalnych wielomianów w sensie zdefiniowanym wzorem (12.5).

### 12.2.2. Wyznaczanie ortogonalnych wielomianów

Hayes [48] zaproponował następujący wzór rekurencyjny wyznaczania wielomianów ortogonalnych

$$p_{k+1}(x) = 2(x - a_{k+1})p_k(x) - b_k p_{k-1}(x), \quad (12.10)$$

przy czym

$$\begin{aligned} p_0(x) &= 1, \\ p_1(x) &= 2(x - a_1). \end{aligned}$$

Zakłada się tu, że zmienna  $x$  jest unormowana następująco

$$-1 \leq x \leq 1,$$

natomiast współczynniki  $a_{k+1}$  oraz  $b_k$  dobiera się tak, aby spełnione były warunki ortogonalności (12.5), stąd

$$a_{k+1} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i p_k^2(x_i)}{\sum_{i=1}^n p_k^2(x_i)} \quad (12.11)$$

oraz

$$b_k = \frac{\sum_{i=1}^n p_k^2(x_i)}{\sum_{i=1}^n p_{k-1}^2(x_i)}, \quad (12.12)$$

gdzie  $k = 0, 1, \dots, p-1$ ,  $b_0 = 0$  oraz  $a_1 = \bar{x}$ . Algorytm obliczeniowy przeznaczony do wyznaczania wielomianów ortogonalnych opracował Cooper [16].

## 12.3. Funkcje sklejane z odcinków, splajny

### 12.3.1. Problemy z dopasowaniem wielomianu do danych

W wielu praktycznych sytuacjach obserwuje się często niewystarczające dopasowanie wielomianu do danych, mimo zwiększania stopnia wielomianu do dużych

wartości. Występuje to, na przykład, gdy rzeczywista zależność  $E[y] = f(x; \mathbf{a})$  między odpowiedzią  $y$  a pobudzeniem  $x$  ma odmienny charakter w sąsiednich obszarach dziedziny  $x$  ( $\mathbf{a}$  jest wektorem parametrów funkcji). Brak dopasowania może się objawiać na różne sposoby. Na przykład różnicowa suma kwadratów  $RSS$  może nie maleć w wystarczającym stopniu nawet dla dużych stopni wielomianu – rzędu kilkunastu. Brak dopasowania możemy również obserwować na wykresie obrazującym zależność różnic  $r_i$  od pobudzenia  $x_i$ . To niedopasowanie będzie się objawiało utrzymywaniem się trendu systematycznego nawet dla dużych stopni. Przypomnijmy, że w przypadku osiągnięcia odpowiedniego stopnia wielomianu różnice  $r_i$  powinny zawierać jedynie składnik losowy. Znane jest też zjawisko Rungego polegające na tym, że przy znacznym zwiększeniu stopnia wielomianu przechodzącego przez założone punkty obserwuje się „zafalowania” wielomianu w obszarach między sąsiednimi punktami znajdującymi się w pobliżu końców przedziału określoności modelu. Ten efekt jest zwykle obserwowany, gdy zależność  $E[y] = f(x; \mathbf{a})$  ma całkowicie odmienny charakter w sąsiednich segmentach przedziału określoności. Za przykład może służyć funkcja, która w jednym przedziale zmienia się „wolno”, a w sąsiednim szybko i dodatkowo zawiera oscylacje. Występuje to zwykle wtedy, gdy w sąsiednich segmentach obszaru określoności dominują różne zjawiska fizyczne. Prosty przykładem jest tu krzemowa dioda półprzewodnikowa. Dla napięć dodatnich  $u > 0,7 V$  złącze diody znajduje się w stanie przewodzenia, a dla pozostałych, również ujemnych, w stanie zaporowym. Oba obszary opisane są innym prawem fizycznym i innymi zależnościami.

Stosowane są dwa podstawowe sposoby rozwiązania tego problemu [47]. Pierwszy polega na zastosowaniu odpowiedniej transformacji wielkości wejściowej  $x$ , która ujednotliła szybkość zmian w różnych częściach obszaru określoności poprzez „rozciągnięcie” tej części zmiennej  $x$ , w której są szybkie zmiany i „zagęszczanie” obszarów o wolnej zmienności. Jeśli w pobliżu jednego końca przedziału określoności zmiany są szybkie, a w pobliżu drugiego wolne, to odpowiednią funkcją transformującą może być funkcja logarytmiczna. Problem pełnego dopasowania można również rozwiązać, wprowadzając dodatkowy człon nie będący wielomianem, który wyeliminuje pozostały po wstępnym dopasowaniu wielomianem trend systematyczny. Do wytypowania odpowiedniej zależności przydatna jest znajomość wykresów różnych funkcji. Wiele użytecznych funkcji przedstawili Daniel i Wood [18].

Innym sposobem definiowania modelu, funkcji  $f(x; \mathbf{a}) = f$ , jest podział przedziału określoności  $[c, d]$  modelu  $f$  na segmenty  $(\lambda_k, \lambda_{k+1}]$  za pomocą punktów  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{K-1}$  (przy czym  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{K-1}$ ) i jej reprezentację w każ-

dym segmencie  $(\lambda_k, \lambda_{k+1}]$  za pomocą innej funkcji  $f_k(x; \mathbf{a}_k)$ . Można to zapisać następująco

$$f(x; \mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}) = \begin{cases} f_1(x; \mathbf{a}_1), & c \leq x \leq \lambda_1, \\ f_2(x; \mathbf{a}_2), & \lambda_1 < x \leq \lambda_2, \\ \vdots & \vdots \\ f_K(x; \mathbf{a}_K), & \lambda_{K-1} < x \leq d, \end{cases} \quad (12.13)$$

gdzie  $f_k(x; \mathbf{a}_k)$ ,  $k = 1, \dots, K$  są funkcjami parametrycznymi, natomiast  $\mathbf{a}_k = [a_{k1}, \dots, a_{kK_j}]^T$  jest wektorem parametrów  $k$ -tej funkcji. Końce  $c$  oraz  $d$  przedziału określoności funkcji mogą być zarówno skończone, jak i nieskończone, np.  $c = \infty$  oraz  $d = \infty$ . Niektórzy autorzy stosują jednolite oznaczenia końców podprzedziałów, kładąc  $\lambda_0 = c$  oraz  $\lambda_K = d$ .

Zwykle końce segmentów  $\lambda_k$ ,  $k = 1, \dots, K - 1$  nie są znane i należy je wyznaczyć z danych eksperymentalnych. Funkcja  $f(x; \mathbf{a})$  zdefiniowana wzorem (12.13) nazywana jest *modelem wielofazowym*, *funkcją wielofazową* lub *funkcją sklejaną*, natomiast punkty  $\lambda_k$  nazywane są *punktami zmian* lub *złączami*. W praktyce liczba segmentów,  $K$ , na który dzieli się przedział  $[c, d]$  nie jest duża (co najwyżej kilka).

Jeśli z analizy badanego zjawiska nie można określić funkcji składowej  $f_k(x; \mathbf{a}_k)$ , to zwykle przyjmuje się, że jest ona wielomianem. Jeśli wszystkie funkcje składowe  $f_k(x; \mathbf{a}_k)$ ,  $k = 1, \dots, K$  są wielomianami, to taką funkcję nazywamy *wielofazowym wielomianem* lub *sklejanym wielomianem*. Szczególną klasę sklejanym wielomianów stanowią „splajny”.

### 12.3.2. Splajny

Prace wykorzystujące funkcje sklejane, a zwłaszcza splajny pojawiły się już na przełomie XIX i XX wieku. Jednak do początku lat 60. XX wieku były relatywnie nieliczne i dopiero od tego okresu widoczny jest szybki rozwój teorii i zastosowań splajnów. W okresie tym ukazały się również główne opracowania. W początkowym okresie rozwoju funkcji sklejanym nie używano specjalnych nazw, dopiero Schoenberg [95] użył określenia splajny (ang. *spline functions*, *splines*) które przyjęło się i jest obecnie powszechnie stosowane. Splajny stanowią obecnie duży dział metod matematycznych i w tym rozdziale podano jedynie podstawowe informacje na ten temat. Podstawy teoretyczne splajnów opracował Schumaker [96], natomiast wiele użytecznych algorytmów obliczeniowych podał de Boor [19].

Splajny powstały z potrzeby skonstruowania funkcji, które miałyby elastyczność sklejanym wielomianów, a jednocześnie osiągnęły znaczny stopień gładkości.

**Definicja 12.1.** *Splajnem*  $s(x)$  rzędu  $p$  z węzłami  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_K$  (przy czym  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_K$ ) i przedziałem określoności  $[c, d]$  ( $-\infty \leq c < \lambda_1, \lambda_K < d \leq \infty$ ) nazywa się funkcję

$$s(x) = \begin{cases} p_1(x), & c \leq x \leq \lambda_1, \\ p_2(x), & \lambda_1 < x \leq \lambda_2, \\ \vdots & \vdots \\ p_K(x), & \lambda_{K-1} < x \leq d, \end{cases} \quad (12.14)$$

w której poszczególne składowe  $p_k(x)$ ,  $k = 1, \dots, K$  są wielomianami stopnia nie większego niż  $p - 1$ , a wszystkie pochodne funkcji  $s(x)$  rzędu do  $(p - 2)$  są ciągłe.

Z definicji wynika, że funkcja  $s(x)$  jest gładka. Rząd,  $p$ , splajnu określony jest stopniem użytych wielomianów  $p_k(x)$ . Stosuje się splajny, co najwyżej rzędu  $p = 4$ . Na przykład w splajnach rzędu  $p = 4$  występują wielomiany stopnia co najwyżej trzeciego, więc

$$p_k(x) = a_{0k} + a_{1k}x + a_{2k}x^2 + a_{3k}x^3, \quad k = 1, \dots, K. \quad (12.15)$$

Splajny rzędu czwartego nazywane są *splajnami kubicznymi*. Mają one  $4 \times K$  parametrów.

Wyróżnimy dwie podstawowe klasy splajnow: *ze stałymi węzłami* (określonymi przed eksperymentem) oraz *z wolnymi węzłami* (ang. *free knots splines*) wyznaczanymi z danych. Obszerną analizę zagadnień związanych z dopasowaniem splajnow kubicznych ze znanymi węzłami metodą najmniejszych kwadratów przedstawił Poirier [88]. Kilka użytecznych informacji na ten temat podał również Hayes w pracach [47, 48], a w szczególności metody dopasowania splajnow z wolnymi węzłami oraz Wold [118].

Reprezentacja splajnow w postaci (12.14) nie jest odpowiednia do obliczeń numerycznych i dlatego splajny kubiczne przedstawia się, wykorzystując *funkcję obcinającą*  $f(z) = (z)_+$ , która jest równa wartości  $z$ , gdy argument funkcji jest dodatni i równy zero, gdy argument jest ujemny, więc

$$(z)_+ = \max\{z, 0\} = \begin{cases} z, & \text{gdy } z > 0, \\ 0, & \text{gdy } z \leq 0. \end{cases} \quad (12.16)$$

Wykorzystując funkcję obcinającą dowolny kubiczny splajn  $s(x)$ , (12.14), można jednoznacznie przedstawić w postaci (por. [96])

$$s(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \sum_{k=1}^K b_k(x - \lambda_k)_+^3. \quad (12.17)$$



Otrzymano więc redukcję liczby parametrów z  $4 \cdot K$  do  $4 + K$ . Redukcja ta jest tym większa, im większa jest liczba segmentów  $K$ , na które podzielony jest przedział określoności modelu. Na przykład dla  $K = 5$  splajn przedstawiony w postaci (12.14) ma  $4 \cdot 5 = 20$  parametrów, natomiast w postaci (12.17) liczba parametrów wynosi  $K + 4 = 9$ . Reprezentacja (12.17) ma minimalną liczbę parametrów, jaką może mieć splajn kubiczny z  $K$  węzłami.

Z numerycznego punktu bardziej efektywną klasą są „ $B$ -splajny”, nazywane również „fundamentalnymi splajnami”. Wśród nich podstawową grupę stanowią „kubiczne  $B$ -splajny”, których teorię podali de Boor [19] oraz Schumaker [96].

Kubicznym  $B$ -splajnem  $B_k(x)$  z węzłami  $\lambda_1, \dots, \lambda_K$  nazywamy taki kubiczny splajn, który jest równy zeru poza przedziałem  $[\lambda_{k-4}, \lambda_k]$ .

Dla zdefiniowania pełnego zbioru  $B$ -splajnów wprowadzono osiem dodatkowych węzłów, cztery węzły  $\lambda_{-3}, \lambda_{-2}, \lambda_{-1}, \lambda_0$  poniżej pierwszego węzła  $\lambda_1$  oraz cztery węzły  $\lambda_{K+1}, \lambda_{K+2}, \lambda_{K+3}, \lambda_{K+4}$  powyżej największego podstawowego węzła  $\lambda_K$ . Dodatkowe węzły muszą spełniać warunki

$$\lambda_{-3} < \lambda_{-2} < \lambda_{-1} < \lambda_0 < c$$

oraz

$$b < \lambda_{K+1} < \lambda_{K+2} < \lambda_{K+3} < \lambda_{K+4}.$$

Poza tymi warunkami dodatkowe węzły mogą przyjmować dowolne wartości uwzględniające jedynie względy numeryczne. Ponadto przyjmuje się zwykle, że  $\lambda_0 = c$  oraz  $\lambda_{K+1} = d$ . Wykorzystując dodatkowe węzły, można zdefiniować  $K + 4$  podstawowych splajnów

$$B_k(x) = \sum_{j=k-4}^k \left\{ \frac{(x - \lambda_j)_+^3}{\prod_{\substack{m=k-4 \\ m \neq j}}^k (\lambda_k - \lambda_m)} \right\}, \quad k = 1, \dots, K + 4 \quad (12.18)$$

oraz ogólny splajn z węzłami  $\lambda_1, \dots, \lambda_{K+4}$  ma jednoznaczną reprezentację w przedziale  $\langle c, d \rangle$  w postaci

$$s(x) = \sum_{k=1}^{K+4} \lambda_k B_k(x).$$

Przedstawiono tu jedynie zarys teorii splajnów. Dokładniejszą analizę, a zwłaszcza problemy dopasowania splajnów metodą najmniejszych kwadratów, można znaleźć w pozycjach [19, 48, 96, 118].

## 12.4. Wielomiany wielu zmiennych

### 12.4.1. Podstawowe definicje

**Definicja 12.2.** *Wielomianem*  $p(x_1, \dots, x_m)$  *stopnia*  $k$  nazywa się kombinację liniową

$$p(x_1, \dots, x_m) = \sum_{j=0}^J a_j x_1^{s_{j1}} \cdot x_2^{s_{j2}} \cdots x_m^{s_{jm}} \quad (12.19)$$

iloczynów

$$x_1^{s_{j1}} \cdot x_2^{s_{j2}} \cdots x_m^{s_{jm}},$$

w których każdy wykładnik  $s_{ji} \in \mathcal{N} \cup 0$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,  $j = 1, \dots, J$  jest liczbą naturalną lub zerem i dla każdego składnika sumy wykładniki te spełniają nierówność  $s_{j1} + s_{j2} + \cdots + s_{jm} \leq k$ , przy czym przynajmniej dla jednego ze składników nierówność ta przechodzi w równość  $s_{j1} + s_{j2} + \cdots + s_{jm} = k$ . Mówimy, że wielomian jest *kombinacją liniową wyrażen*  $x_1^{s_{j1}} \cdot x_2^{s_{j2}} \cdots x_m^{s_{jm}}$ , a współczynniki  $a_j$  są *parametrami wielomianu stopnia*  $k$ .

Wielomian kwadratowy  $p(x_1, x_2)$  (stopnia 2) jest kombinacją liniową składników

$$1, x_1, x_2, x_1x_2, x_1^2, x_2^2,$$

natomiast wielomian kubiczny, dwóch zmiennych, składników

$$1, x_1, x_2, x_1x_2, x_1^2, x_2^2, x_1^2x_2, x_1x_2^2, x_1^3, x_2^3.$$

Suma

$$p(x_1, x_2) = a_0 + a_1x_1^2 + a_2x_1x_2 + a_3x_1x_2^2 + a_4x_2^3$$

jest przykładem wielomianu kubicznego, w którym występują parametry zerowe.

### Powierzchnie kwadratowe

Największe zastosowanie mają wielomiany drugiego stopnia,  $k = 2$ .

$$p(x_1, \dots, x_m) = a_0 + \sum_{i=1}^m a_i x_i + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m a_{ij} x_i x_j, \quad (12.20)$$

nazywane również *wielomianami kwadratowymi* lub *powierzchniami kwadratowymi*. Wielomiany kwadratowe w zapisie macierzowym mają postać

$$p(x_1, \dots, x_m) = a_0 + \mathbf{ax} + \mathbf{x}^T \mathbf{Ax}, \quad (12.21)$$

gdzie  $\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots, a_J]^T$ ,  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_m]^T$  są wektorami  $m$  zmiennych, natomiast  $A = [a_{ij}]$  jest macierzą symetryczną o wymiarze  $m \times m$ . Założenie symetryczności nie zmniejsza tu ogólności rozważań, gdyż jeśli  $A$  nie jest macierzą symetryczną, to kładzie się

$$a_{ij} = \frac{a_{ij} + a_{ji}}{2}, \quad \text{dla } i, j = 1, 2, \dots, m, i \leq j$$

i otrzymuje równoważny wielomian z macierzą symetryczną.

Każdy wielomian kwadratowy  $p(x_1, \dots, x_m) = p(\mathbf{x})$  jest sumą funkcji afinicznej

$$l(\mathbf{x}) = a_0 + \mathbf{a}\mathbf{x}$$

oraz formy kwadratowej

$$q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x}.$$

Wielomiany kwadratowe znajdują zastosowanie w wielu zagadnieniach, w szczególności wykorzystywane są w zagadnieniach optymalizacyjnych. Gdzie zwykle wyznacza się minimum „funkcji kosztów” (lub maksimum „funkcji zysku”). Ich ważną zaletą jest to, że mają jeden punkt ekstremalny, który wyznacza się, przyrównując pochodne do zera.

Niech  $f(x_1, \dots, x_p)$  będzie funkcją różniczkowalną. Punkt  $\mathbf{x}^* = [x_1^* \dots, x_p^*]^T$ , w którym pochodne cząstkowe funkcji  $f(x_1, \dots, x_p)$  względem wszystkich argumentów są równe zero nazywa się *punktem stacjonarnym* tej funkcji.

Jeśli macierz  $A$  formy kwadratowej jest nieosobliwa, to stacjonarny punkt  $\mathbf{x}^*$  określony jest wzorem

$$\mathbf{x}^* = -\frac{1}{2} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{a}. \quad (12.22)$$

Wzór ten otrzymuje się, obliczając pochodną wektorową funkcji (12.21) względem  $\mathbf{x}$  i przyrównując ją do zera (por. DODATEK)

$$\frac{\partial p(x_1, \dots, x_m)}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{a} + 2\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0},$$

a następnie rozwiązując to równanie względem  $\mathbf{x}$ .

Rodzaj punktu stacjonarnego wielomianu (12.21) zależy od własności macierzy  $A$ . Macierz ta jest, z założenia, nieosobliwa i symetryczna, więc jej wartości własne są liczbami rzeczywistymi różnymi od zera. Można wykazać, że jeśli macierz  $A$  jest dodatnio określona (wszystkie jej wartości własne są dodatnie), to punkt stacjonarny wyznacza minimum funkcji  $p(x_1, \dots, x_m)$ ; jeśli macierz  $A$  jest ujemnie określona (wszystkie wartości własne są ujemne), to punkt stacjonarny wyznacza

maksimum; a jeśli występują zarówno dodatnie, jak i ujemne wartości własne, to punkt stacjonarny jest punktem siodłowym. Wtedy w pewnych kierunkach funkcja rośnie, a w innych maleje.

Przedstawimy teraz własności wielomianów kwadratowych na przykładzie wielomianów kwadratowych dwóch zmiennych. Tak jak w przypadku wielomianów jednej zmiennej, tak i dla wielomianów wielu zmiennych podstawową rolę odgrywają ortogonalne wielomiany Czebyszewa – szczegółowe omówienie problemu można znaleźć w artykule Hayesa [48].

#### 12.4.2. Powierzchnie kwadratowe dwóch zmiennych

Sz szczególnie duże zastosowanie znalazły wielomiany kwadratowe dwóch zmiennych

$$y = p(x_1, x_2) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2. \quad (12.23)$$

Wielomiany te określają powierzchnię w przestrzeni dwuwymiarowej. Nazywane są również „powierzchniami kwadratowymi”. Rozważymy problem estymacji parametrów powierzchni kwadratowej i wyznaczenia wartości, dla której osiągane jest ekstremum. Rozważania te można bezpośrednio zastosować do wielomianów kwadratowych wielu zmiennych. Do ilustracji sposobu postępowania wykorzystamy przykład podany przez Hockinga [50], w którym badana jest zależność wytrzymałości  $y$  płyty paździerzowej w funkcji dwóch parametrów procesu technologicznego ich wytwarzania: temperatury  $x_1$  oraz czasu wygrzewania  $x_2$ . Głównym celem analizy jest dobór temperatury  $x_1^*$  oraz czasu  $x_2^*$  dla których płyta ma maksymalną wytrzymałość. Zakładamy, że zależność między  $y$  a  $x_1$  i  $x_2$  określona jest równaniem  $y = f(x_1, x_2) + \varepsilon$ , gdzie  $\varepsilon$  jest składnikiem losowym, który spełnia warunki  $E[\varepsilon] = 0$  oraz  $D^2[\varepsilon] = \sigma^2$ . Funkcja  $f(x_1, x_2)$  nie jest znana, ale może być aproksymowana z danych eksperymentalnych.

Jak wspomniano, model kwadratowy aproksymujący funkcję  $f(x_1, x_2)$  wyznacza się na podstawie pomiarów, stosując zwykle metodę najmniejszych kwadratów. Wykonano pomiary w  $n$  punktach  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ , gdzie  $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, x_{i2}]^T$  jest wektorem wartości wielkości wejściowych w  $i$ -tym pomiarze,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Równania eksperymentu dla modelu kwadratowego określone są wyrażeniem

$$y_i = a_0 + \mathbf{a}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{x}_i^T \mathbf{A} \mathbf{x}_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (12.24)$$

gdzie  $y_i$  –  $i$ -ta obserwacja odpowiedzi modelu,  $a_0$  – parametr zerowy,  $\mathbf{a} = [a_1, a_2]^T$  – wektor parametrów liniowych,  $\mathbf{A}$  – macierz parametrów kwadratowych o wy-

miarze  $2 \times 2$ ;  $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, x_{i2}]^T$  – wektor  $i$ -tej wartości wielkości wejściowych, natomiast  $\varepsilon_i$  – składowa losowa  $i$ -tej obserwacji. Założono wykorzystanie metody najmniejszych kwadratów do estymacji parametrów  $\mathbf{a}$  oraz  $\mathbf{A}$ , skąd otrzymuje się estymatory

$$\hat{a}_0, \quad \hat{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \hat{a}_{11} & \frac{1}{2}\hat{a}_{12} \\ \frac{1}{2}\hat{a}_{12} & \hat{a}_{11} \end{bmatrix}. \quad (12.25)$$

Po podstawieniu tych wyników do modelu  $y = a_0 + \mathbf{a}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$  otrzymuje się estymowany model

$$\hat{y} = \hat{a}_0 + \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \hat{\mathbf{A}} \mathbf{x}, \quad (12.26)$$

a dla  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$  wyrównane oceny

$$\hat{y}_i = \hat{a}_0 + \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{x}_i^T \hat{\mathbf{A}} \mathbf{x}_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Stacjonarny punkt modelu (minimum, maksimum lub punkt siodłowy) można wyznaczyć ze wzoru (12.22)

$$\hat{\mathbf{x}}^* = -\frac{1}{2} \hat{\mathbf{A}}^{-1} \hat{\mathbf{a}}. \quad (12.27)$$

Dla rozpatrywanego przykładu otrzymano następujące wartości estymat parametrów [50]

$$\hat{a}_0 = 76,92, \quad \hat{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} -3,04 \\ -4,38 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} -0,60 & -0,53 \\ -0,53 & -2,09 \end{bmatrix}$$

Wartości własne macierzy  $\hat{\mathbf{A}}$  wynoszą

$$\boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2,134 \\ -0,556 \end{bmatrix},$$

więc jest ona ujemnie określona i wielomian kwadratowy  $p(x_1, x_2)$  ma w punkcie stacjonarnym

$$\mathbf{x}^* = \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3,15 \\ 84,88 \end{bmatrix},$$

maksimum. Wartość funkcji (w tym punkcie) wynosi  $y_{\max} = 84,88$ . Dla każdej liczby  $y_0 < y_{\max}$  zbiór punktów  $\{x_1, x_2\}$  spełniających równanie

$$p(x_1, x_2) = y_0$$

jest elipsoidą o punkcie centralnym  $\mathbf{x}^*$ .

Szczególną rolę w analizie pełni parametr  $a_{12}$ , który jest współczynnikiem przy iloczynie  $x_1 \cdot x_2$ . Jeśli  $a_{12} = 0$ , to główne osie elips są równoległe do podstawowych współrzędnych; ponadto wielomian kwadratowy dwóch zmiennych jest sumą dwóch wielomianów jednej zmiennej  $p(x_1, x_2) = p(x_1) + p(x_2)$ , gdzie  $p(x_1)$  oraz  $p(x_2)$  są parabolami.

Zbiór punktów  $\{y, x_1\}$ , dla ustalonej wartości drugiej zmiennej  $x_2$  jest parabolą, której punkt stacjonarny jest równy  $x_1^* = -a_1/2a_{11}$  dla dowolnej wartości drugiej zmiennej  $x_2$ . Jeśli  $a_{12} \neq 0$ , to stacjonarne punkty są opisane równaniem

$$x_1^* = -(a_1 + a_{12}x_2^*)/2a_{11},$$

a więc  $x_1^*$  jest funkcją  $x_2^*$ . Mówimy, że zmienne  $x_1$  oraz  $x_2$  „oddziałują na siebie”, zjawisko to nazywane jest *interakcją zmiennych*.

### 12.5. Analiza odpowiedzi badanego obiektu – wyznaczenie punktów ekstremalnych

Omówimy obecnie ogólny problem analizy odpowiedzi badanego obiektu za pomocą wielomianów, a zwłaszcza wykorzystanie aproksymacji wielomianami do wyznaczenia punktów ekstremalnych (maksimum lub minimum) odpowiedzi obiektu.

Załóżmy, że celem eksperymentu jest zbadanie zależności odpowiedzi  $y$  pewnego obiektu od  $p$  zmiennych  $x_1, \dots, x_p$  (wielkości wejściowych). Relacja między zmiennymi opisana jest zależnością  $y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon$ ,  $\mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ , gdzie  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_p]^T$ , natomiast  $\varepsilon$  jest zmienną losową charakteryzującą rozrzut procesu. Zwykle funkcja  $f(\mathbf{x})$  nie jest znana, ale można ją aproksymować, wykorzystując dane eksperymentalne i dokonując dopasowania odpowiedniego modelu regresji. Najczęściej wykorzystuje się do tego celu wielomian kwadratowy, który jest zwykle wystarczająco dokładnym modelem lokalnym funkcji  $f(\mathbf{x})$ . Najbardziej pożądana byłaby sytuacja, w której dla każdego ciągu wartości wejściowych  $\mathbf{x}_i$  przeprowadza się przynajmniej kilkanaście eksperymentów. Odpowiadałoby to w przykładzie Hockinga wytwarzaniu przynajmniej kilkunastu płyt dla każdej założonej temperatury  $x_1$  i czasu wygrzewania  $x_2$ . Można wtedy dokładnie określić własności probabilistyczne czynnika losowego  $\varepsilon$ , co ułatwia skonstruowanie optymalnego modelu regresji. Jednak na ogół nie dysponuje się tak licznymi danymi, gdyż proces technologiczny może być kosztowny lub/i trudno jest go zrealizować dla pewnych wartości wielkości wejściowych  $x_j$ . Ponadto często nie ma informacji, w jakim obszarze może się znajdować poszukiwany punkt optymalny procesu, a prowadzenie wielu kosztownych eksperymentów w punktach oddalonych od optimum związane byłoby

z kosztownymi eksperymentami, które są mało użyteczne. Dlatego zalecaną procedurą jest przeprowadzenie „ekonomicznego eksperymentu” (z minimalną liczbą danych) i liniowym (afinicznym) modelem celem wykorzystania go do wskazania obszaru, w którym następuje poprawa wartości wyjściowej (funkcji kryterialnej)  $y$ . Następnie przeprowadza się kolejny „ekonomiczny eksperyment” w tym obszarze i wyznacza nowy obszar o lepszych parametrach. Proces ten jest kontynuowany, aż do określenia obszaru, w którym może się znajdować punkt ekstremalny. W obszarze tym przeprowadza się szczegółowe badania, na podstawie których konstruuje się model kwadratowy funkcji  $f(\mathbf{x})$  aproksymujący analizowaną funkcję  $f(\mathbf{x})$ . Model ten umożliwi analizę, własności funkcji  $f(\mathbf{x})$ , a przede wszystkim wyznaczenie punktu ekstremalnego. Przedstawimy teraz podstawy matematyczne tego procesu.

### 12.5.1. Aproksymacja odpowiedzi modelem liniowym (afinicznym)

Metoda ta polega na przeprowadzaniu ciągu kolejnych eksperymentów i wyznaczaniu w każdym z nich kierunku wzrostu funkcji  $f(\mathbf{x})$ , co umożliwia „wspinanie się” po jej powierzchni. Dla punktów oddalonych znacznie od punktu ekstremalnego powierzchnia jest względnie liniowa, więc można ją aproksymować hiperpłaszczyzną

$$y = a_0 + \mathbf{a}^T \mathbf{x}, \quad (12.28)$$

gdzie wektor parametrów  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$  określa kierunek *najszybszego wzrostu* lub *najszybszego spadku*. Kierunek wzrostu modelu liniowego jest określony wektorem parametrów  $\mathbf{a}$ , natomiast kierunek najszybszego spadku wektorem  $-\mathbf{a}$ . W celu wyznaczenia ocen parametrów modelu liniowego przeprowadzamy eksperyment ekonomiczny, który zazwyczaj jest *eksperymentem typu  $2^p$* . Jeśli  $\mathbf{x}^{(1)} = [x_1^{(1)}, \dots, x_p^{(1)}]^T$  jest punktem wyjściowym badań, to przeprowadza się eksperyment w małym prostopadłościu  $p$ -wymiarowym, którego punktem centralnym jest  $\mathbf{x}^{(1)}$ . Oznacza to, że przeprowadzamy pomiary dla wszystkich kombinacji punktów  $(x_i^{(1)} \pm \Delta x_i^{(1)}, x_j^{(1)} \pm \Delta x_j^{(1)})$ ,  $i, j = 1, \dots, p$ ,  $i \neq j$ , gdzie  $\Delta x_i^{(1)}$  oraz  $\Delta x_j^{(1)}$  są „małymi” odchyleniami od współrzędnych punktu centralnego. Eksperyment przeprowadzamy więc w punktach leżących na wierzchołkach prostopadłościu  $p$ -wymiarowego, zbudowanego wokół punktu  $\mathbf{x}^{(1)}$ . Liczba wszystkich takich punktów jest równa  $2^p$ , stąd nazwa eksperymentu. Na przykład dla dwóch zmiennych,  $p = 2$ ,  $\mathbf{x} = [x_1, x_2]^T$ , eksperyment jest typu  $2^2$ , więc przeprowadza się w czterech wierzchołkach prostopadłościu  $(x_1 - \Delta x_1, x_2 - \Delta x_2)$ ,  $(x_1 - \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2)$ ,  $(x_1 + \Delta x_1, x_2 - \Delta x_2)$  oraz  $(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2)$ .

Ogólnie dla  $p$  zmiennych dopasowuje się model

$$y_{rs} = a_0 + a_1x_{r1} + a_2x_{r2} + \cdots + a_px_{rp} + \varepsilon_{rs}, \quad r, s = 1, \dots, 2^p. \quad (12.29)$$

Stosując metodę najmniejszych kwadratów, estymuje się parametry  $a_j$  i stąd otrzymuje się model liniowy

$$\hat{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1x_1 + \hat{a}_2x_2 + \cdots + \hat{a}_px_p, \quad (12.30)$$

aproxymujący funkcję  $f(\mathbf{x})$  w otoczeniu punktu  $\mathbf{x}^{(1)}$ . Model ten w notacji macierzowej przyjmuje postać

$$\hat{y} = \hat{a}_0 + \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{x}. \quad (12.31)$$

Wektor  $\hat{\mathbf{a}}$  określa kierunek największego wzrostu. Ze względu na to, że model liniowy jest tylko przybliżeniem funkcji  $f(\mathbf{x})$ , krok wzdłuż tego kierunku ogranicza się za pomocą kuli o środku w  $\mathbf{x}^{(1)}$  i promieniu  $r$ . Tak więc zadanie określenia nowego punktu można zdefiniować następująco: wyznaczyć maksimum

$$\hat{a}_0 + \hat{\mathbf{a}}\mathbf{x}$$

przy ograniczeniu

$$\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq r^2.$$

Rozwiązaniem tego zadania jest punkt

$$\mathbf{x}^{(2)} = r \frac{\hat{\mathbf{a}}}{\|\hat{\mathbf{a}}\|}.$$

Jeśli szukamy minimum funkcji, to poruszamy się w przeciwnym kierunku.

Analogiczny eksperyment przeprowadza się w „małym” otoczeniu punktu  $\mathbf{x}^{(2)}$ , na podstawie którego wyznacza się nowy liniowy model funkcji  $f(\mathbf{x})$ . Określa się w ten sposób kierunek największego wzrostu w tym punkcie, „wspina się” w tym kierunku i wyznacza następny punkt o lepszych parametrach (większej wartości funkcji  $f(\mathbf{x})$ ). W pobliżu maksimum tej funkcji, wartości estymatorów  $\hat{a}_j$ ,  $j = 1, \dots, p$  zbliżają się do zera, stąd uzyskanie poprawy może być trudne – w pobliżu maksimum zakrzywienie funkcji  $f(\mathbf{x})$  ma większe znaczenie. Aproksymację wielomianem liniowym (afinicznym) należy zastąpić aproksymacją wielomianem kwadratowym.



### 12.5.2. Aproksymacja odpowiedzi modelem kwadratowym wielu zmiennych

W pobliżu maksimum funkcję  $f(\mathbf{x})$  aproksymuje się modelem kwadratowym  $a_0 + \mathbf{a}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ . Model ten ma większą liczbę parametrów niż model liniowy i dlatego należy zwiększyć liczbę pomiarów. Na przykład przez stosowanie planu  $3^p$ , który polega na przeprowadzaniu pomiarów we wszystkich kombinacjach punktów  $(\mathbf{x}_i - \Delta \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_i)$ , czyli wykonuje się pomiary również w punktach centralnych ścianek i krawędzi prostopadłościanu. Na bazie tych punktów wyznacza się estymatory  $\hat{a}_0, \hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{A}}$  parametrów modelu i szuka maksimum wyrażenia

$$\hat{a}_0 + \hat{\mathbf{a}}\mathbf{x} + \mathbf{x}^T \hat{\mathbf{A}} \mathbf{x}.$$

Jeśli macierz  $\hat{\mathbf{A}}$  jest ujemnie określona, to rozwiązanie problemu określone jest wyrażeniem

$$\hat{\mathbf{x}} = -\frac{1}{2} \hat{\mathbf{A}}^{-1} \hat{\mathbf{a}},$$

natomiast jeśli macierz  $\hat{\mathbf{A}}$  jest dodatnio określona, to rozwiązanie to wyznacza minimum. Nie mamy informacji jak dokładnie maksimum wielomianu kwadratowego aproksymuje maksimum funkcji  $f(\mathbf{x})$ . Dlatego wskazane jest powtórzenie eksperymentu wokół maksimum modelu kwadratowego.

Przedstawiono tu jedynie zarys problemu wyznaczania punktów optymalnych. Rozwiązanie określonych zadań wymaga rozwiązania innych problemów, a zwłaszcza:

- określenie momentu przejścia od modelu liniowego do modelu kwadratowego,
- określenie promienia  $r$ , w otoczeniu którego wyznaczamy nowy punkt,
- wybranie eksperymentu typu  $2^p$ , typu  $3^p$  lub zdecydowanie się na inny dobór punktów pomiarowych.

Szczegółowe omówienie tej problematyki wykracza poza ramy monografii. Obszerna prezentacja sposobów doboru punktów optymalnych znajduje się w następujących pozycjach literatury [6, 11, 46, 49].



## Rozdział 13

# Wybrane klasy modeli matematycznych

Modele wielomianowe pozwalają na dopasowanie modelu do danych z założoną dokładnością. Jednakże, jak wykazał Richardas [91], wykorzystanie wielomianów często nie jest właściwe, gdyż otrzymane w ten sposób parametry modelu na ogół nie mają interpretacji fizycznej, a ponadto dla osiągnięcia dużej dokładności dopasowania niezbędne jest stosowanie wielomianów wysokiego stopnia. Dlatego w różnych dziedzinach nauki opracowywane są specjalne modele matematyczne. Modele opracowane na użytek jednej dziedziny nauki mogą znaleźć zastosowanie również w innych dziedzinach, dlatego przedstawiono wybrane klasy takich modeli.

### 13.1. Modele wzrostu

Modele wzrostu są stosowane w wielu dziedzinach nauki. Biolodzy interesują się szybkością wzrostu roślin, różnych gatunków owadów, zwierząt, ...; próbują zrozumieć mechanizmy rządzące tymi zjawiskami. Chemicy interesują się dynamiką zmian składu różnych substancji w reakcjach chemicznych. W rolnictwie szybkość wzrostu roślin uprawnych ma istotne znaczenie ekonomiczne i badany jest wpływ różnych czynników na ten proces. W medycynie bada się szybkość wzrostu różnych elementów ciała ludzkiego, na przykład guzów nowotworowych.

**Eksponencjalne modele wzrostu.** Najprostsze organizmy żywe rozmnażają się przez podział komórek. Niech  $x$  oznacza czas,  $y$  wzrost, a  $y = f(x)$  funkcję wzrostu. Zakładając, że szybkość wzrostu jest proporcjonalna do aktualnego wzrostu, otrzymuje się równanie różniczkowe

$$\frac{dy}{dx} = \kappa y, \quad (13.1)$$

którego rozwiązaniem jest *model eksponencjalny*

$$y = f(x) = e^{\kappa(x-\gamma)}, \quad (13.2)$$

gdzie  $\kappa$  jest współczynnikiem proporcjonalności,  $\kappa > 0$ , a  $\gamma$  parametrem. Model ten jest odpowiedni jedynie do aproksymacji początkowej fazy wzrostu roślin.

Innym modelem stosowanym do aproksymacji początkowej fazy wzrostu jest *model potęgowy*

$$y = f(x) = \alpha x^\beta. \quad (13.3)$$

Model ten stosuje się do wzrostu, który jest wolniejszy niż wzrost w modelu eksponencjalnym.

Oba modele, zarówno eksponencjalny, jak i potęgowy, charakteryzują się nieograniczonym wzrostem, podczas gdy wzrost istot żywych stabilizuje się na określonym poziomie, więc model taki powinien spełniać warunek

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = \alpha < \infty,$$

gdzie  $\alpha > 0$  oznacza maksymalny wzrost. Wynika stąd, że szybkość wzrostu maleje do zera,  $dy/dx \rightarrow 0$ , gdy czas  $x \rightarrow \infty$ .

Warunkiem prowadzącym do modelu opisującego ograniczony wzrost jest założenie, że szybkość wzrostu jest proporcjonalna do różnicy między maksymalnym poziomem  $\alpha$  a aktualnym wzrostem  $y$ , stąd

$$\frac{dy}{dx} = \kappa(\alpha - y), \quad (13.4)$$

gdzie  $\kappa$  jest współczynnikiem proporcjonalności. Po rozwiązaniu równania różniczkowego (13.4) otrzymuje się zależność

$$y = f(x) = \alpha - (\alpha - \beta)e^{-\kappa x}, \quad (13.5)$$

gdzie  $x > 0$  oraz  $\kappa > 0$ . Ponadto, żeby  $f(x)$  było funkcją rosnącą muszą być spełnione nierówności  $\alpha > \beta > 0$ . Parametry funkcji (13.5) mają następującą interpretację:  $\alpha$  jest końcowym, natomiast  $\beta$  początkowym wzrostem. Parametr  $\kappa$  określa szybkość wzrostu. Model (13.4) stosowany jest również w następującej postaci

$$y = f(x) = \alpha - \beta e^{-\kappa x}, \quad (13.6)$$

gdzie  $\alpha - \beta$  zastąpione zostało parametrem  $\beta$ . Występuje również następująca forma modelu o ograniczonym wzroście

$$y = f(x) = \alpha + \beta \rho^x, \quad 0 < \rho < 1, \quad (13.7)$$

nazywana *modelem monomolekularnym*.

## 13.2. Analiza szeregów czasowych – modele autoregresji

W wielu zagadnieniach praktycznych analizuje się ciągi danych zależnych od czasu, nazywane *szeregiami czasowymi*. W naukach technicznych ciąg taki otrzymuje się w procesie *próbkowania*. Zwykle mamy do czynienia z próbkowaniem przeprowadzanym z równymi odstępami czasu nazywanym *próbkowaniem równomiernym*. W analizie regresji odpowiada to modelowi z jednym wejściem (regresorem), który jest zmienną kontrolowaną i jednym wyjściem (predyktorem). Budowa modelu na podstawie analizy regresji stwarza w wielu praktycznych sytuacjach duże problemy. Objawia się to pojawianiem się długich ciągów różnic dodatnich, jak również długich ciągów różnic ujemnych. Może być to spowodowane przyjęciem nieodpowiedniego modelu postulowanego dla  $E[y|x]$  lub dużą korelacją między kolejnymi predyktorami. Szereg czasowy jest procesem stochastycznym i efektywną metodę ich modelowania zaproponował Yule'a [119].

Idea pomysłu Yule'a polega na tym, że szereg czasowy  $\{y(n)\}$ <sup>1</sup> zawierający mocno skorelowane obserwacje, może być generowany przez ciąg stochastycznie niezależnych losowych impulsów poddanych liniowej cyfrowej filtracji. Proces ten przedstawiono na rysunku 13.1 „Czysty sygnał losowy” oznacza zwykle losowy ciąg



Rys. 13.1. Model Yule'a generacji sygnału losowego  $y(n)$  z szumu białego  $\varepsilon(n)$ .

próbek  $\varepsilon(n)$  o rozkładzie normalnym, zerowej wartości oczekiwanej, stałej wariancji i nieskorelowany. Taki ciąg próbek nazywany jest *szumem białym* lub *gaussowskim szumem białym*. Dokładniej można to zapisać w postaci  $\varepsilon(n) \sim N(0, \sigma^2)$  oraz

$$\text{cov}[\varepsilon(n), \varepsilon(k)] = \begin{cases} \sigma^2, & \text{gdy } k = n, \\ 0, & \text{gdy } k \neq n, \end{cases}$$

gdzie  $\sigma^2$  jest wariancją szumu białego,  $D^2[\varepsilon(n)] = \sigma^2$ .

<sup>1</sup>  $y(n)$  oznacza  $n$ -tą wartość wyjściową. Oznaczenie takie stosowane jest również w przypadku próbkowania sygnału  $y(t)$  z okresem  $T$ , gdzie symbol  $T$  jest często pomijany dla uproszczenia zapisu – dokładnie byłoby  $\{y(nT)\}$ .

Ogólnie relacją wejście–wyjście modelu przedstawionego na rysunku 13.1 można zapisać w postaci następującego schematu blokowego

$$\begin{pmatrix} \text{aktualna} \\ \text{wartość} \\ \text{wyjściowa} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{liniowa} \\ \text{kombinacja} \\ \text{poprzednich} \\ \text{wartości} \\ \text{wyjściowych} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{kombinacja} \\ \text{obecných i} \\ \text{poprzednich} \\ \text{wartości} \\ \text{wejściowych} \end{pmatrix}$$

który reprezentuje ogólną strukturę filtra liniowego. W zależności od rodzaju kombinacji wartości wejściowych i wyjściowych wyróżnia się trzy podstawowe modele liniowe:

1. Model autoregresji, AR, (ang. *autoregressive*), w którym nie występują poprzednie wartości wejściowe (regresory).

2. Model średniej ruchomej, MA, (ang. *moving average*), w którym nie występują poprzednie wartości wyjściowe (predyktory).

3. Model mieszany autoregresji i średniej ruchomej, ARMA, (ang. *autoregressive moving average*), w którym występują poprzednie wielkości zarówno wejściowe, jak i wyjściowe.

Szereg czasowy  $y(n), y(n-1), \dots, y(n-M)$  reprezentuje realizację modelu autoregresji rzędu  $M$ , jeśli spełnia równanie

$$y(n) + a_1y(n-1) + \dots + a_My(n-M) = \varepsilon(n), \quad (13.8)$$

gdzie  $a_1, \dots, a_M$  są parametrami modelu AR, natomiast predyktor  $\varepsilon(n)$  jest szumem białym. Wyrażenie (13.8) można przedstawić w postaci

$$y(n) = b_1y(n-1) + \dots + b_My(n-M) + \varepsilon(n), \quad (13.9)$$

gdzie  $b_k = -a_k$ . Aktualna wartość predyktora  $y(n)$  jest więc równa kombinacji liniowej przeszłych wartości  $y(n-1), \dots, y(n-M)$  plus wyrażenie  $\varepsilon(n)$  określające błąd losowy (ta reprezentacja wyjaśnia nazwę: model autoregresji). Oznaczając  $y(n-k)$  symbolem  $x(k)$ ,  $k = 1, \dots, M$ , otrzymuje się model regresji, w którym regresory są przeszłymi wartościami predyktorów.

W modelu średniej ruchomej MA, filtr z rysunku 13.1 przyjmuje postać

$$y(n) = b_1\varepsilon(n) + b_2\varepsilon(n-1) + \dots + b_K\varepsilon(n-K), \quad (13.10)$$

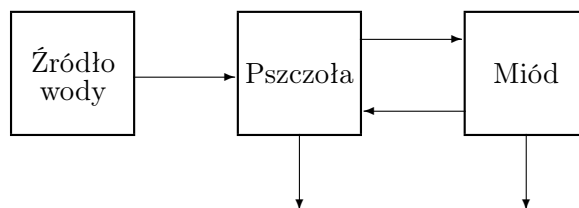
gdzie  $b_1, \dots, b_K$  są parametrami modelu MA, natomiast  $\varepsilon(n)$  jest szumem białym o zerowej wartości oczekiwanej i wariancji  $\sigma_\varepsilon^2$ .

Przedstawiono tu jedynie koncepcję szeregów czasowych, gdyż pełna analiza wykracza poza zakres monografii. Istnieje na ten temat obszerna literatura, a w szczególności klasyczne już pozycje Boxa i Jenkinsa [10], oraz Oppenheima [85].

### 13.3. Modele kompartmentowe

Dotychczas analizowane modele były rodzinami parametrycznych krzywych, które można dopasować do danych eksperymentalnych otrzymanych z analizy określonego zjawiska fizycznego (obiektu). Każdą taką rodzinę dobiera się do analizowanego zjawiska fizycznego (procesu). Jednak w przypadku złożonych obiektów, w których występuje kilka różnych zjawisk fizycznych, takie klasyczne podejście do konstrukcji modelu może okazać się nieodpowiednie. Jacquez [59] zaproponował, aby analizowany obiekt podzielić na kilka jednorodnych podsystemów, które oddziałują między sobą. Ponadto może wystąpić oddziaływanie niektórych podsystemów z otoczeniem. Podsystemy te zostały nazwane przez Jacqueza *kompartamentami*, a cały system *modelem kompartmentowym*. Model mechanistyczny przedstawiony w przykładzie 1.3 jest modelem kompartmentowym składającym się z trzech podsystemów. Oddziaływanie między podsystemami opisane jest tu równaniami różniczkowymi, którego rozwiązanie pozwala na wyznaczenie modelu matematycznego obiektu.

Model kompartmentowy przedstawia się zwykle za pomocą schematu blokowego, na którym poszczególne kompartmenty reprezentowane są za pomocą bloków, natomiast wymiana „materiałów” między nimi i otoczeniem, za pomocą strzałek (por. rys. 13.2).



Rys. 13.2. Kumulacja materiałów radioaktywnych przez pszczoły

Przykładem modelu kompartmentowego jest system opisany przez Whitea [115]. Analizował on proces kumulacji napromieniowania radioaktywnego przez

pszczoły znajdujące się w środowisku poddanym promieniowaniu. White badał możliwość wykorzystania pszczół do monitorowania skażenia radioaktywnego środowiska naturalnego. W trakcie badań umieszczano pszczoły w zamkniętym pojemniku, w którym woda była skażona radioaktywnym materiałem i badano akumulację promieniowania w ciałach pszczół. Do analizy tego zjawiska White zastosował model trzykompartmentowy przedstawiony na rysunku 13.2. Oddziaływanie skażonych pszczół na otoczenie i miodu na otoczenie zaznaczono za pomocą strzałek. Również strzałki reprezentują „przekazywanie” materiału radioaktywnego z wody do ciał pszczół oraz wymianę materiału skażonego promieniowaniem między pszczołami a produkowanym przez nie miodem.

Konstruowanie modelu kompartmentowego polega na zapisie matematycznym transportu materiału między poszczególnymi „kompartamentami” i otoczeniem oraz rozwiązaniu otrzymanego układu równań. Modele kompartmentowe znajdują duże zastosowanie w różnych dziedzinach nauki, a zwłaszcza medycynie [59], farmakologii [108], biologii [5]. Obszerny przegląd różnych modeli kompartmentowych i ich zastosowania przedstawili Seber i Wild [99].

### 13.4. Funkcje wymiarowe

W obiektach fizycznych, technicznych i wielu innych wykorzystywane są zmienne, które są wielkościami fizycznymi. Składają się one z wartości liczbowej i „jednostki” danej wielkości fizycznej utożsamianej z *wymiarem wielkości* nazywanej krótko *wymiarem*. Na przykład prędkość punktu poruszającego się wzdłuż linii prostej zapisujemy  $v = 3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , gdzie liczba 3 jest miarą prędkości, a  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$  jest jej wymiarem – symbol m oznacza tu metr, a s sekundę. Takie zmienne można traktować jako parę  $(x, w)$ , gdzie  $x \in \mathbb{R}$ , natomiast  $w \in \mathbb{W}$  jest wymiarem (w przykładzie  $x = 3$ ,  $w = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ).

Zbiór par  $\{(x, w)\}$  wraz ze zdefiniowanymi działaniami nazywa się *przestrzenią wymiarową* i oznacza symbolem  $\Pi$ , a elementy przestrzeni wymiarowej nazywa się *wielkościami wymiarowymi*. Wymiar elementu  $X = (x, w) \in \Pi$  oznacza symbolem  $[X]$ , więc  $[X] = w$ ; na przykład  $[3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ . Własności przestrzeni wymiarowej pozwalają, w wielu wypadkach, na znaczne uproszczenie procedury wyznaczania modeli matematycznych obiektów. W punkcie tym przedstawiono zarys własności przestrzeni wymiarowej oraz podano przykład ilustrujący sposób wyznaczania modeli matematycznych w przestrzeni wymiarowej.

Na wielkościach wymiarowych wykonuje się pewne operacje. Można mnożyć dowolne wielkości wymiarowe, ale nie można dodawać dwóch wielkości o róż-



nym wymiarze. Drobot [22, 78] wykazał, że zbiór  $\Pi$  wielkości wymiarowych wraz z operacjami mnożenia i potęgowania można traktować jako przestrzeń wektorową, w której odpowiednikiem dodawania wektorów  $\mathbf{x} + \mathbf{y}$  jest mnożenie  $XY$  wielkości wymiarowych, natomiast odpowiednikiem mnożenia wektora przez liczbę,  $\alpha\mathbf{x}$ , jest podnoszenie wielkości wymiarowej do potęgi  $X^\alpha$ ,  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Przestrzeń wymiarową (zbiór wielkości wymiarowych z mnożeniem i potęgowaniem) tworzy multiplikatywną przestrzeń wektorową [78]. Liniowej niezależności wektorów odpowiada w przestrzeni wymiarowej *wymiarowa niezależność*, a bazie przestrzeni wektorowej odpowiada *baza wymiarowa*. Podzbiór  $\Pi_0 \subset \Pi$  przestrzeni wymiarowej, składający się z tych wielkości wymiarowych, których wymiar jest równy 1 (np.  $\text{mm}^{-1} = 1$ ) nazywa się wielkościami bezwymiarowymi i utożsamia z nieujemnymi liczbami rzeczywistymi,  $\Pi_0 \Leftrightarrow \mathbb{R}^+ \cup 0$ .

Modelem matematycznym praw fizycznych jest *funkcja wymiarowa*  $\Phi : \Pi^n \rightarrow \Pi$ ,  $n$  zmiennych oznaczana symbolem

$$Y = \Phi(X_1, \dots, X_n). \quad (13.11)$$

Zakłada się, że funkcje wymiarowe reprezentujące rzeczywiste obiekty mają dwie własności: są *wymiarowo niezmiennicze* oraz *wymiarowo jednorodne*. Pierwsza własność oznacza, że funkcja wymiarowa nie jest zależna od układu jednostek (przyjętej bazy wymiarowej [22, 78]), a druga, że jeśli argumenty niezależne  $X_1, \dots, X_n$  zachowują wymiary (zmieniają się tak, że żaden nie zmienia swojego wymiaru), to argument zależny  $Y$  również nie zachowuje wymiaru. Ścisłe definicje tych pojęć podano w literaturze, np. [22, 78]. Dla wymiarowo niezmienniczych i wymiarowo jednorodnych funkcji wymiarowych zachodzi twierdzenie o *reprezentacji funkcji wymiarowej*, nazywane również *twierdzeniem  $\pi$* . Przedstawimy treść tego twierdzenia w uproszczonej formie.

**Twierdzenie 13.1.** Załóżmy, że  $k$ -pierwszych argumentów  $X_1, \dots, X_k$ ,  $k < n$ , wymiarowo niezmienniczej i jednorodnej funkcji wymiarowej  $\Phi(X_1, \dots, X_n)$  danej wzorem (13.11) tworzy bazę<sup>2</sup> podprzestrzeni wymiarowej rozpiętej na jej argumentach  $X_1, \dots, X_n$ , a pozostałe argumenty  $X_{k+1}, \dots, X_{k+r}$ ,  $n = k + r$  są następującymi kombinacjami tej bazy

$$X_{k+j} = \varphi_j \prod_{i=1}^k X_i^{\alpha_{ji}}, \quad j = 1, \dots, r, \quad (13.12)$$

<sup>2</sup> Założenie, że to pierwsze argumenty są wymiarowo niezależne i tworzą bazę nie zmniejsza ogólności rozważań, gdyż zawsze można tak uporządkować argumenty, aby było ono spełnione.

gdzie  $\varphi_1, \dots, \varphi_r \in \Pi_0$ , a  $\alpha_{ji} \in \mathbb{R}$ , wtedy funkcja  $\Phi$  ma reprezentację

$$Y = \Phi(X_1, \dots, X_n) = f(\varphi_1, \dots, \varphi_r) \prod_{j=1}^k X_j^{\alpha_j}, \quad (13.13)$$

w której  $f(\varphi_1, \dots, \varphi_r)$  jest liczbowo-liczbową,  $f : \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}$ , funkcją argumentów bezwymiarowych ( $\varphi \in \mathbb{R}^+$ ), a wykładniki  $\alpha_i \in \mathbb{R}$ .

Czytelnikowi zainteresowanemu dowodem twierdzenia  $\pi$  poleca się następujące pozycje literaturowe [22, 78].

Porównując wymiary obu stron równości (13.12), można wyznaczyć wykładniki  $\alpha_{ji}$ , a z równości (13.13) wykładniki  $\alpha_i$ . Tak więc, twierdzenie o reprezentacji funkcji wymiarowej sprowadza wyznaczenie funkcji wymiarowej  $\Phi(X_1, \dots, X_n)$ ,  $n$  zmiennych, do wyznaczania funkcji  $(\varphi_1, \dots, \varphi_r)$ , o mniejszej liczbie  $r$  zmiennych i tę funkcję należy wyznaczyć na podstawie eksperymentu. Ponieważ liczba argumentów  $r$  funkcji bezwymiarowej jest zwykle istotnie mniejsza od liczby argumentów  $n$  odpowiadającej jej funkcji wymiarowej, więc dzięki twierdzeniu  $\pi$  można w znaczącym stopniu zredukować liczbę argumentów wyznaczonej funkcji. Sposób postępowania zilustrujemy na klasycznym przykładzie dobrze ilustrującym proces wyznaczania funkcji wymiarowej.

**Przykład 13.1.** Pokażemy jak można wyznaczyć eksperymentalnie funkcję (1.2) określającą okres  $T$  wahadła matematycznego<sup>3</sup>. Załóżmy, że analizując wstępnie zjawiska rządzące ruchem wahadła, stawia się hipotezę, że okres  $T$  jest funkcją długości  $L$  nici oraz masy  $M$  wahadła, więc funkcja wymiarowa jest postaci  $T = \Phi(L, M)$ . Oba argumenty  $L$  oraz  $M$  są wymiarowo niezależne, więc tworzą bazę wymiarową, co oznacza, że liczba  $n$  wszystkich argumentów funkcji  $\Phi$  równa jest liczbie  $k$ -argumentów wymiarowo niezależnych,  $n = k = 2$ ; a liczba  $r$  argumentów wymiarowo zależnych równa jest zeru,  $r = 0$  (funkcja  $\Phi(L, M)$  nie ma argumentów wymiarowo niezależnych). Argument zależny  $T$  nie należy do przestrzeni rozpiętej na argumentach niezależnych  $L$  oraz  $M$ . Wynika to stąd, że wymiaru  $[T] = s$  nie można wyrazić w postaci „kombinacji liniowej” wymiarów  $[L] = m$  oraz  $[M] = kg$  – brakuje więc w funkcji  $\Phi$  argumentu, w którego wymiarze występuje sekunda.

Analizując zjawiska fizyczne ruchu wahadła lub przeprowadzając dodatkowy eksperyment, można wysnuć wniosek, że okres wahadła zależy również od przyspieszenia ziemskiego. Stawiamy więc hipotezę, że okres wahadła jest funkcją trzech argumentów: długości  $L$ , masy  $M$  oraz przyspieszenia ziemskiego  $G$ .

<sup>3</sup> Zakłada się, że funkcja ta nie była znana przed eksperymentem.

Poszukujemy więc funkcji wymiarowej  $\Phi(L, M, G)$ . Zauważmy, że wymiar przyspieszenia  $[G] = \text{m}^1 \cdot \text{kg}^0 \cdot \text{s}^{-2}$  zawiera sekundę s. Można wykazać, że wszystkie argumenty  $L, M, G$  tej funkcji są wymiarowo niezależne,  $n = k = 3$  i tworzą bazę wymiarową podprzestrzeni  $\Pi$ . Nie ma więc argumentów wymiarowo zależnych, stąd  $r = 0$  i funkcja bezwymiarowa sprowadza się do stałej:  $f(\varphi_1, \dots, \varphi_r) = \beta$ . Zatem na mocy twierdzenia o reprezentacji, równanie (13.13), funkcja  $\Phi$  ma postać

$$T = \beta L^{\alpha_1} M^{\alpha_2} G^{\alpha_3}. \quad (13.14)$$

Wartości wykładników  $\alpha_1, \alpha_2$  oraz  $\alpha_3$  można wyznaczyć, porównując wymiary obu stron równości (13.14),  $[T] = [L]_1^{\alpha_1} [M]_2^{\alpha_2} [G]_3^{\alpha_3}$ , co sprowadza się do równania

$$\text{s} = (\text{m}^1 \cdot \text{kg}^0 \cdot \text{s}^0)^{\alpha_1} (\text{m}^0 \cdot \text{kg}^1 \cdot \text{s}^0)^{\alpha_2} (\text{m}^1 \cdot \text{kg}^0 \cdot \text{s}^{-2})^{\alpha_3}.$$

Porównując wykładniki przy kolejnych jednostkach, otrzymuje się układ trzech równań liniowych z trzema niewiadomymi, których rozwiązanie wynosi  $\alpha_1 = 1/2$ ,  $\alpha_2 = 0$  oraz  $\alpha_3 = -1/2$ . Po podstawieniu tych wartości do (13.14) otrzymuje się

$$T = \beta \sqrt{\frac{L}{G}}. \quad (13.15)$$

Jednoznaczność rozwiązania układu równań wynika z wymiarowej niezależności argumentów  $L, M, G$ .

Wyznaczyliśmy więc funkcję  $\Phi$  z dokładnością do nieznannej stałej liczbowej  $\beta$ . Tak proste rozwiązanie wynika z tego, że wszystkie jej argumenty są wymiarowo niezależne. Ponadto wykładnik  $\alpha_2$  przy masie  $M$  jest równy zeru, co oznacza, że okres nie zależy od masy  $G$ .

Stałą  $\beta$  można wyznaczyć, wykonując jeden tylko eksperyment, a mianowicie zmierzyć okres  $T$  wahadła o zadanej długości  $L$  umieszczonego w polu grawitacyjnym Ziemi,  $G \approx 9,80665 \text{ m/s}^2$ . Dane te należy podstawić do wzoru (13.15) i obliczyć z otrzymanego równania wartość  $\beta$ . Jeśli eksperyment został poprawnie przeprowadzony, powinniśmy otrzymać wynik  $\beta \approx 2\pi$ , a więc wzór (13.15) przyjmie postać wzoru (1.2). Poprzednio wykazano, że okres wahadła zależy również od maksymalnego odchylenia wahadła. Powstaje pytanie dlaczego na gruncie analizy wymiarowej nie wykryto tej zależności. Wynika to z faktu, że kąt jest wielkością bezwymiarową, która jest elementem neutralnym w przestrzeni wymiarowej.  $\square$

Podany przykład, w którym wszystkie argumenty funkcji wymiarowej są wymiarowo niezależne, liczba  $r$ -argumentów funkcji bezwymiarowej  $f$  redukuje się do zera,  $r = 0$ , a ona sama do stałej, jest raczej wyjątkiem. Na ogół w funkcji  $\Phi$

występuje obok argumentów niezależnych pewna liczba argumentów zależnych, więc funkcja bezwymiarowa  $f$  nie redukuje się do stałej. Należy jednak podkreślić, że zwykle uzyskuje się znaczną redukcję argumentów, co znakomicie upraszcza proces wyznaczania modelu – redukcja nawet o jeden argument może znacznie uprościć proces jej wyznaczania. Jest wiele sytuacji praktycznych, w których funkcja bezwymiarowa zawiera jeden argument i wtedy znakomitym narzędziem ułatwiającym wyznaczanie funkcji są wykresy. Kilka interesujących praktycznych przykładów ilustrujących uproszczenie procesu wyznaczania funkcji wymiarowej poprzez zastosowanie narzędzi analizy wymiarowej podali Kasprzak i Lysik [61].

## Rozdział 14

# Badanie założeń wyjściowych i analiza różnic

W dotychczasowej analizie podstawowego modelu regresji,  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$ , zakładaliśmy, że obserwacje  $y_i$  nie są obciążone błędem systematycznym; mają taką samą wariancję (są jednakowej dokładności); nie są skorelowane; ponadto do pewnej analizy zakładaliśmy dodatkowo, że mają rozkład normalny. W rzeczywistym eksperymencie pewna liczba tych założeń może nie być spełniona. Dlatego na zakończenie analizy należy sprawdzić poprawność założeń wyjściowych i w przypadku niespełnienia niektórych z nich zmodyfikować je – zmienić model, zastosować inne estymatory itd. W następnych punktach przedstawimy najczęściej występujące sytuacje praktyczne. Szersze omówienie występujących problemów zainteresowany czytelnik znajdzie w literaturze [52, 81, 97].

### 14.1. Własności macierzy kapeluszowej

Efektywnym narzędziem badania założeń wejściowych są różnice  $r_i = y_i - \hat{y}_i$ . Wektor różnic określony jest wzorem  $\mathbf{r} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}$ , gdzie  $\mathbf{P} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T$  jest tak zwaną „macierzą kapeluszową”. Podstawowe własności macierzy  $\mathbf{P}$  zostały podane w rozdziale 7.

Obok macierzy kapeluszowej  $\mathbf{P}$ , definiowanej dla podstawowego modelu regresji liniowej, użyteczny jest również jej szczególny przypadek – „centrowana macierz kapeluszowa”  $\mathbf{P}_c$  – definiowana dla centrowanego modelu regresji. Podstawowy model regresji liniowej  $y_i = a_0 + \sum_{j=1}^p a_j x_{ij} + \varepsilon_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  można zapisać w „centrowanej” postaci

$$y_i = \gamma_0 + \sum_{j=1}^p a_j (x_{ij} - \bar{x}_j) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (14.1)$$

gdzie  $\gamma_0 = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_px_p$ , natomiast

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij}, \quad j = 1, \dots, p$$

jest wartością średnią  $j$ -tej kolumny macierzy  $\mathbf{X}$ . Model  $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{a} + \boldsymbol{\varepsilon}$  w centrowanej formie ma postać

$$\mathbf{y} = \gamma_0 \mathbf{J} + \mathbf{X}_c \mathbf{a}_c + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (14.2)$$

gdzie  $\mathbf{a}_c = [a_1, \dots, a_p]^T$  jest wektorem parametrów centrowanego modelu,  $\mathbf{J} = [1, 1, \dots, 1]^T$  jest macierzą jednokolumnową (pierwszą kolumną macierzy  $\mathbf{X}$ ), natomiast  $\mathbf{X}_c$  jest macierzą o wymiarze  $n \times p$  utworzoną z macierzy  $\mathbf{X}$  po usunięciu pierwszej kolumny i obliczeniu pozostałych elementów ze wzoru  $(\mathbf{X}_c)_{ij} = x_{ij} - \bar{x}_j$ , por. (14.1). Wektor parametrów  $\mathbf{a}_c$  centrowanego modelu powstaje z wektora  $\mathbf{a}$  po pominięciu parametru  $a_0$ .

Na podstawie (14.2) relację między macierzą eksperymentu  $\mathbf{X}$ , podstawowego modelu, a macierzą eksperymentu  $\mathbf{X}_c$  można zapisać następująco  $\mathbf{X} = [\mathbf{J} \ \mathbf{X}_c]$ , stąd

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \begin{bmatrix} n & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{X}_c^T \mathbf{X}_c \end{bmatrix}, \quad (14.3)$$

gdzież  $\mathbf{J}^T \mathbf{X}_c = \mathbf{0}$  oraz

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \begin{bmatrix} 1/n & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{X}_c^T \mathbf{X}_c)^{-1} \end{bmatrix}. \quad (14.4)$$

Ze wzorów (14.3) i (14.4) wynika następująca relacja

$$\mathbf{P} = \frac{1}{n} \mathbf{U} + \mathbf{P}_c, \quad (14.5)$$

między macierzą kapeluszową  $\mathbf{P} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$  podstawowego modelu a macierzą kapeluszową

$$\mathbf{P}_c = \mathbf{X}_c(\mathbf{X}_c^T \mathbf{X}_c)^{-1} \mathbf{X}_c^T \quad (14.6)$$

centrowanego modelu, gdzie  $\mathbf{U}$  jest  $n \times n$  macierzą składającą się z jedynek.

Oznaczając elementy macierzy  $\mathbf{P}_c$  symbolami  $p_{cik}$ ,  $i, k = 1, \dots, n$  otrzymamy

$$p_{ik} = \frac{1}{n} + p_{cik}, \quad (14.7)$$

więc każdy element  $p_{ik}$  podstawowej macierzy kapeluszowej jest większy od odpowiedniego elementu  $p_{cik}$  centrowanej macierzy kapeluszowej o stałą  $1/n$ .

Ze wzorów  $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{P}\mathbf{y}$ , (14.5) i (14.7) wynika, że wyrównaną ocenę  $\hat{y}_i$   $i$ -tej obserwacji  $y_i$  można przedstawić za pomocą wyrażenia

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^n p_{ik} y_k \quad (14.8)$$

$$= \bar{y} + \sum_{k=1}^n p_{cik} y_k, \quad (14.9)$$

a więc ocena  $\hat{y}_i$  jest równa ważonej liniowej kombinacji wszystkich obserwacji  $y_1, \dots, y_n$  z wagami określonymi przez elementy macierzy kapeluszowej. Elementy macierzy  $\mathbf{P}$  są wagami poszczególnych obserwacji przy wyznaczaniu wyrównanych ocen  $\hat{y}_i$ , więc im większa jest wartość  $p_{ik}$ , tym większa waga  $i$ -tej obserwacji. Można wykazać (por. [50]), że jeśli diagonalny element  $p_{ii}$  macierzy kapeluszowej jest bliski jedności, to pozostałe elementy  $i$ -tego wiersza tej macierzy są bliskie zeru i mówimy, wtedy, że  $i$ -ta „obserwacja” jest *wpływowa* – ma „dużą wagę”.

W rozdziale 7 przedstawiono podstawowe własności macierzy kapeluszowej; obecnie uzupełniono je o dalsze pozycje.

**Własność 1.** Macierze  $\mathbf{P}$  oraz  $\mathbf{P}_c$  są symetryczne, dodatnio określone oraz

$$\begin{aligned} \text{rank} \mathbf{P} &= \text{tr} \mathbf{P} = p + 1, \\ \text{rank} \mathbf{P}_c &= \text{tr} \mathbf{P}_c = p. \end{aligned}$$

Dowody tych równości wynikają bezpośrednio z własności macierzy idempotentnych, por. A.1.5.

**Własność 2.** Diagonalne elementy macierzy  $\mathbf{P}$  oraz  $\mathbf{P}_c$  spełniają warunki

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} &< p_{ii} \leq 1, \\ 0 &< p_{cii} \leq 1. \end{aligned}$$

*Dowód.* Dolne ograniczenie elementów diagonalnych macierzy  $\mathbf{P}_c$  wynika z tego, że jest ona dodatnio określona, natomiast dolne ograniczenie macierzy  $\mathbf{P}$  wynika z równania (14.7). Do określenia górnego ograniczenia wykorzystano własność idempotentności obu macierzy  $\mathbf{P}$  oraz  $\mathbf{P}_c$ . Idempotentność macierzy  $\mathbf{P}_c$  oznacza, że  $\mathbf{P}_c^2 = \mathbf{P}_c$ , więc

$$p_{cii} = p_{cii}^2 + \sum_{k \neq i} p_{cik}^2,$$

a stąd  $p_{cii} \leq 1$ . Ponadto, jeśli  $p_{cii} = 1$ , to pozostałe elementy,  $p_{cik}$ ,  $i$ -tego wiersza są równe zeru. Analogiczne własności ma macierz  $\mathbf{P}$ .

Z przedstawionej analizy wynika, że duża wartość elementu diagonalnego  $p_{ii}$  (zbliżona do 1) oznacza, że  $i$ -ta obserwacja,  $y_i$ , ma dużą wagę. Należy więc określić wartość graniczną, powyżej której można przyjąć, że element  $p_{ii}$  jest duży – wskazuje na wpływową obserwację. W literaturze spotyka się różne oszacowania tej granicy. Na przykład Huber [58] proponuje graniczną wartość równą 0,5. Często nie przyjmuje się ustalonej granicy, a sprawdza się czy maksymalny element  $p_{ii}$  jest istotnie większy od pozostałych elementów  $p_{ij}$ ,  $j \neq i$ . Jeśli tak, to przyjmuje się, że  $i$ -ta obserwacja jest obserwacją wpływową.

**Własność 3.** Z definicji macierzy  $\mathbf{P}_c$  (14.6) wynika, że diagonalne elementy  $p_{cii}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , są określone wzorem

$$p_{cii} = (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T (\mathbf{X}_c^T \mathbf{X}_c)^{-1} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}), \quad (14.10)$$

w którym  $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, \dots, x_{ip}]$  jest  $i$ -tym wierszem macierzy  $\mathbf{X}$ , natomiast  $\bar{\mathbf{x}} = [\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_p]$ , gdzie  $\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij}$ ,  $j = 1, \dots, p$ , jest średnią arytmetyczną  $j$ -tej kolumny macierzy  $\mathbf{X}$ . Element  $p_{cii}$  można więc uznać za miarę odległości wektora  $\mathbf{x}_i$  od wektora wartości średnich  $\bar{\mathbf{x}}$ . Miara ta nosi nazwę *odległości Mahalanobisa* [50]. Zbiór punktów  $\mathbf{x}_i$  spełniający równanie (14.10) jest elipsoidą (dla  $p = 2$  elipsą), na której leżą punkty równo oddalone (w sensie odległości Mahalanobisa) od jej środka  $\bar{\mathbf{x}}$ . Jeśli  $\mathbf{P}_c^T \mathbf{P}_c = \mathbf{I}_p$  ( $\mathbf{X}_c$  jest macierzą ortogonalną), to

$$p_{cii} = \sum_{j=1}^p (x_{ij} - \bar{x}_j)^2, \quad (14.11)$$

więc element diagonalny  $p_{cii}$  jest kwadratem „odległości euklidesowej” wektora  $\mathbf{x}_i$  od wektora wartości średnich  $\bar{\mathbf{x}}$  — dla macierzy ortogonalnej odległość Mahalanobisa sprowadza się do odległości euklidesowej, a zbiór punktów spełniających równanie (14.10) jest kołem.

**Własność 4.** Macierz kapeluszowa pozwala na wyznaczenie ocen wariancji wyrównanych obserwacji

$$D^2[\hat{y}_i] = s^2 p_{ii}, \quad i = 1, \dots, n \quad (14.12)$$

oraz wariancji różnic (reszt)

$$D^2[\hat{r}_i] = s^2 (1 - p_{ii}), \quad i = 1, \dots, n. \quad (14.13)$$

Dowód pierwszej równości wynika ze wzoru (7.26), natomiast drugi ze wzoru (7.27), gdzie wariancję pojedynczej obserwacji  $\sigma^2$  zastąpiono jej estymatorem  $s^2$ .



## 14.2. Ocena wpływu pojedynczej obserwacji

W zbiorze danych mogą wystąpić wpływowe obserwacje, które mogą całkowicie zniekształcić wyniki. Dlatego ważnym elementem analizy powinna być ocena wpływu poszczególnych obserwacji na wynik końcowy i w przypadku wykrycia „odstających obserwacji” należy rozważyć, czy usunąć je z danych.

Wpływ określonej obserwacji na wynik analizy można ocenić, badając zmiany estymatorów spowodowane jej usunięciem. Badania takie należy przeprowadzić dla wszystkich obserwacji. Wymaga to wykonania pełnej analizy dla  $n$  sytuacji za każdym razem dla  $n - 1$  obserwacji, co w konsekwencji skutkuje koniecznością przeprowadzenia olbrzymiej liczby obliczeń numerycznych. Velleman i Welsch [107] zaproponowali procedurę, która pozwala na wyznaczenie estymatorów dla zredukowanych danych (po usunięciu badanej obserwacji) z estymatorów wyznaczonych dla wszystkich danych, a to w decydującym stopniu skraca obliczenia numeryczne.

Dla wyprowadzenia odpowiednich zależności  $i$ -ty wiersz macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$  oznaczmy symbolem  $\mathbf{x}_i^T$ , natomiast symbolem  $\mathbf{X}_{(i)}$  macierz eksperymentu, która powstaje z macierzy  $\mathbf{X}$  po usunięciu  $i$ -tego wiersza. Korzystając z tych oznaczeń, można zapisać

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^T \mathbf{X} &= \sum_{k=1}^n \mathbf{x}_k \mathbf{x}_k^T \\ &= \mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{X}_{(i)} + \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T.\end{aligned}\quad (14.14)$$

Obliczając wyrażenie  $\mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{X}_{(i)}$  z ostatniego równania, otrzymamy

$$\mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{X}_{(i)} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \left( \mathbf{I}_p - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T \right).\quad (14.15)$$

Przy wyznaczaniu estymatorów należy obliczyć macierz odwrotną. W tym celu wykorzystamy następujący wzór

$$(\mathbf{I} + \mathbf{A}\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{I} - \mathbf{A}(\mathbf{I} + \mathbf{B}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{B},\quad (14.16)$$

którego prawdziwość można sprawdzić, mnożąc lewostronnie obie strony równania przez  $(\mathbf{I} + \mathbf{A}\mathbf{B})$ , następnie prawostronnie przez  $\mathbf{B}^{-1}$  i przeprowadzając redukcję elementów.

Kładąc w (14.16)  $\mathbf{A} = -(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i$  oraz  $\mathbf{B} = \mathbf{x}_i^T$  i wykorzystując to wyrażenie w (14.15), otrzymuje się

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{X}_{(i)})^{-1} &= \left( \mathbf{I}_p - (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T \right)^{-1} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \\ &= \left( \mathbf{I}_p + (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i (1 - \mathbf{x}_i^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i)^{-1} \mathbf{x}_i^T \right) (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \\ &= \left( \mathbf{I}_p + \frac{1}{1 - p_{ii}} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T \right) (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}. \end{aligned} \quad (14.17)$$

Wykażemy teraz, że wzór (14.17) pozwala na wyznaczenie estymatorów poszczególnych parametrów  $a_j$  z  $n - 1$  obserwacji otrzymanych po usunięciu  $i$ -tej obserwacji bezpośrednio z estymatorów  $\hat{\mathbf{a}}$  określonych dla wszystkich  $n$  obserwacji. Takie rozwiązanie umożliwi istotne skrócenie analizy.

**Estymacja parametrów modelu po usunięciu  $i$ -tej obserwacji.** Niech  $\hat{\mathbf{a}}_{(i)}$  oznacza estymatory parametrów  $\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots, a_p]^T$  wyznaczone z danych  $\mathbf{y}_{(i)} = [y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n]^T$ , w których pominięto  $i$ -tą obserwację. Człon  $(\mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{X}_{(i)})^{-1}$  estymatora  $\hat{\mathbf{a}}_{(i)}$  określony jest wzorem (14.17), natomiast drugi człon  $\mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{y}_{(i)}$  można wyznaczyć, rozwiązując równanie

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^T \mathbf{y} &= \sum_{k=1}^n \mathbf{x}_k y_k \\ &= \mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{y}_{(i)} + \mathbf{x}_i y_i, \end{aligned} \quad (14.18)$$

względem  $\mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{y}_{(i)}$ , gdzie  $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, \dots, x_{ip}]^T$  jest  $i$ -tym wierszem macierzy eksperymentu  $\mathbf{X}$ . Uwzględniając oba wyrażenia w estymatorze,  $\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ , otrzymamy

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_{(i)} &= (\mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{X}_{(i)})^{-1} \mathbf{X}_{(i)}^T \mathbf{y}_{(i)} \\ &= \hat{\mathbf{a}} - \frac{r_i}{1 - p_{ii}} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i, \end{aligned} \quad (14.19)$$

gdzie  $r_i = \hat{y}_i - y_i$  oznacza  $i$ -tą różnicę pełnego modelu regresji. Jak wynika z tego wzoru, zmiana wartości estymatorów po usunięciu  $i$ -tej obserwacji zależy od wektora  $\mathbf{x}_i$  ( $i$ -tego wiersza macierzy  $\mathbf{X}$ ), wartości różnicy  $r_i$  oraz od odległości elementu diagonalnego  $p_{ii}$  od 1.

**Wyznaczanie różnic po usunięciu  $i$ -tej obserwacji.** Niech  $\hat{y}_{j(i)}$ ,  $j = 1, \dots, n$ , oznacza wyrównaną ocenę odpowiedzi  $y_j$  wyznaczoną na podstawie obserwacji  $\mathbf{y}_{(i)} = [y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n]^T$  (otrzymanych po usunięciu  $i$ -tej obserwacji) i niech

$$r_{j(i)} = y_j - \hat{y}_{j(i)} \quad (14.20)$$

oznacza  $j$ -tą różnicę otrzymaną z danych  $\mathbf{y}_{(i)}$ . Z równania (14.19)

$$\begin{aligned} r_j - r_{j(i)} &= \mathbf{x}_j^T (\hat{\mathbf{a}}_{(i)} - \hat{\mathbf{a}}) \\ &= -\frac{r_i}{1 - p_{ii}} p_{ij}. \end{aligned} \quad (14.21)$$

Szczególnie interesująca jest  $i$ -ta różnica  $r_{i(i)} = y_i - \hat{y}_{i(i)}$ , a więc różnica między obserwacją  $y_i$  a jej wyrównaną oceną wyznaczoną z modelu bez tej obserwacji. Kładąc  $j = i$  w (14.21), po przekształceniach, otrzymuje się

$$r_{i(i)} = \frac{r_i}{1 - p_{ii}}. \quad (14.22)$$

Tak więc różnica  $r_{i(i)}$  odpowiadająca  $i$ -tej obserwacji  $y_i$  wyznaczonej po jej usunięciu jest znacznie większa od różnicy  $r_i$  określonej ze wszystkich obserwacji, jeśli odpowiedni element diagonalny  $p_{ii}$  macierzy kapeluszowej jest w przybliżeniu równy jeden,  $p_{ii} \approx 1$ . Stąd odpowiednią miarą wpływu  $i$ -tej obserwacji jest diagonalny element  $p_{ii}$  macierzy kapeluszowej.

**Obliczanie ocen odpowiedzi obiektu po usunięciu  $i$ -tej obserwacji.**

Niech  $\hat{\mathbf{y}}_{(i)}$  oznacza  $n$ -wymiarowy wektor odpowiedzi (wyrównanych ocen) wyznaczonych z pominięciem  $i$ -tej obserwacji. Na podstawie (14.19) zmiana ocen odpowiedzi po eliminacji  $i$ -tej obserwacji wynosi

$$\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_{(i)} = \frac{r_i}{1 - p_{ii}} \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i, \quad (14.23)$$

stąd  $i$ -ty element tego wektora

$$\hat{y}_i = \hat{y}_{(i)} + r_i \frac{p_{ii}}{(1 - p_{ii})}. \quad (14.24)$$

Różnica  $\hat{y}_i - \hat{y}_{(i)}$  jest miarą zmiany wyrównanej oceny odpowiedzi  $y_i$  spowodowaną  $i$ -tą obserwacją. Na podstawie (14.23) kwadrat długości wektora  $\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_{(i)}$  wynosi

$$(\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_{(i)})^T (\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}_{(i)}) = p_{ii} \left( \frac{r_i}{1 - p_{ii}} \right)^2. \quad (14.25)$$

Wynika stąd, że całościowa miara zmian wyrównanych ocen zależy tylko od dwóch parametrów:  $r_i$  oraz  $p_{ii}$ .

**Estymacja wariancji  $\sigma^2$  po usunięciu  $i$ -tej obserwacji.** W wielu zastosowaniach występuje potrzeba wyznaczenia estymatora wariancji  $\sigma^2$  z danych otrzymanych po usunięciu  $i$ -tej obserwacji. Zmiana estymatora  $s^2$  (wariancji  $\sigma^2$ ) spowodowana usunięciem  $i$ -tej obserwacji jest dobrym wskaźnikiem jej wpływu na wyniki analizy. Korzystając z wzorów (14.21) oraz (14.22) otrzymano różnicową sumę kwadratów  $RSS_{(i)}$  obliczoną z danych bez  $i$ -tej obserwacji

$$\begin{aligned} RSS_{(i)} &= \sum_{j=1}^n r_{j(i)}^2 - r_{i(i)}^2 \\ &= \sum_{j=1}^n r_j^2 - \frac{r_i^2}{1 - p_{ii}}. \end{aligned} \quad (14.26)$$

Stąd ocena  $s_{(i)}^2$  wariancji  $\sigma^2$  wyznaczonej na podstawie obserwacji  $\mathbf{y}_{(i)}$  (z modelu po usunięciu  $i$ -tej obserwacji) określona jest wzorem (por. [50])

$$s_{(i)}^2 = \frac{(n-p-1)}{(n-p-2)} s^2 - \frac{1}{(n-p-2)} \frac{r_i^2}{1-p_{ii}}. \quad (14.27)$$

Przedstawiona analiza została przeprowadzona dla eliminacji jednej obserwacji z danych. W praktyce może powstać potrzeba eliminacji, w jednym kroku, kilku zmiennych. Zagadnienie to jest skomplikowane i brak jest odpowiednich narzędzi analitycznych. Stosowane są więc metody graficzne. Syntetyczną analizę tych metod opracował Hocking [50].

### 14.3. Analiza różnic

W badaniu poprawności założeń wyjściowych oraz dokładności dopasowania matematycznego modelu do obserwacji dużą rolę odgrywa analiza różnic (nazywanych również resztami lub residuami), którą obecnie omówimy.

#### 14.3.1. Własności różnic

Przypomnijmy, że  $i$ -tą różnicę definiuje się wzorem  $r_i = y_i - \hat{y}_i$ , natomiast  $\mathbf{r} = [r_1, \dots, r_n]^T = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}$  jest wektorem różnic, gdzie  $\mathbf{P} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ . Różnice mają kilka zastosowań praktycznych.

**Własność 1.** Suma różnic jest równa zeru

$$\sum_{i=1}^n r_i = 0. \quad (14.28)$$

**Dowód.** Estymatory NK minimalizują sumę  $\sum_i (y_i - a_0 - a_1 x_{i1} - \dots - a_p x_{ip})^2$ . Pochodna względem parametru  $a_0$  (jak i pozostałych parametrów) jest równa zeru w punkcie  $\mathbf{a} = \hat{\mathbf{a}}$ , stąd

$$\sum_i (y_i - \hat{a}_0 - \hat{a}_1 x_{i1} - \dots - \hat{a}_p x_{ip}) = \sum_i (y_i - \hat{y}_i) = \sum_i r_i = 0,$$

co kończy dowód.  $\square$

**Własność 2.** Jeśli obserwacje  $y_i$  (jak również błędy  $\varepsilon_i$ ) spełniają podstawowe założenia:  $\mathcal{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0}$  oraz  $\mathcal{D}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 \mathbf{I}_n$  ( $= \mathcal{D}[\mathbf{y}]$ ), to macierz kowariancji wektora jest równa

$$\mathcal{D}[\mathbf{r}] = \sigma^2 (\mathbf{I}_n - \mathbf{P}). \quad (14.29)$$

**Dowód.**  $\mathcal{D}[\mathbf{r}] = \mathcal{D}[(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}] = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathcal{D}[\mathbf{r}](\mathbf{I}_n - \mathbf{P})^T = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\sigma^2 \mathbf{I}_n (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})^T = \sigma^2 (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})$ , co kończy dowód. Podczas przekształceń wykorzystano prawo transformacji macierzy kowariancji (błędów), idempotentność macierzy  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  oraz symetrię tej macierzy.

**Własność 3.** Jeśli do założeń sformułowanych do własności 2 dodamy założenie o normalności rozkładu  $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$ , to wektor różnic  $\mathbf{r}$  ma tak zwany „ułomny<sup>1</sup> rozkład normalny”. Ułomność wynika z tego, że macierz  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  jest niepełnego rzędu. Rozkładem brzegowym różnicy  $r_i$  jest rozkład normalny  $N(0, \sigma^2(1 - p_{ii}))$  o parametrach 0 i  $\sigma^2(1 - p_{ii})$ .

### 14.3.2. Skalowane, standaryzowane i studentyzowane różnice

Wektor  $\mathbf{r}$  otrzymuje się jako transformację liniową wektora obserwacji,  $\mathbf{r} = (\mathbf{I}_n - \mathbf{P})\mathbf{y}$ . W wyniku czego różnice  $r_i$  mają inne własności probabilistyczne niż obserwacje  $y_i$ . Dlatego do badań własności estymatorów NK stosuje się często przekształcone różnice. Najważniejsze takie przekształcenia to skalowanie, standaryzowanie i studentyzowanie różnic.

<sup>1</sup> Mówimy, że normalny wektor losowy ma ułomny rozkład normalny, jeśli jego macierz kowariancji ma rząd mniejszy niż jej wymiar.

**Skalowane różnice.** Najprostszym sposobem przekształcenia różnic jest pomnożenie przez współczynnik liczbowy zmieniający ich wartości, tak by ich średnia wariancja była w przybliżeniu równa jeden. W tym celu oblicza się średnią wariancję różnic

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n D^2[r_i] = \frac{1}{n} \sigma^2 \text{tr}[\mathbf{I}_n - \mathbf{P}] = \frac{\sigma^2(n-p)}{n}. \quad (14.30)$$

Następnie, zastępując w powyższym wzorze wariancję  $\sigma^2$  jej oceną  $s^2$ , definiuje się *skalowane różnice* [18] wzorem

$$c_i = \frac{r_i}{[s^2(n-p)/n]^{1/2}} = \frac{r_i}{[(1/n)\mathbf{r}^T\mathbf{r}]^{1/2}}, \quad (14.31)$$

gdzie przy przejściu od drugiej do trzeciej równości zastosowano estymator  $s^2 = \mathbf{r}^T\mathbf{r}/(n-p)$  wariancji  $\sigma^2$ . Skalowanie, jak wspomniano, sprowadza różnice do takich wartości, żeby ich średnia wariancja była równa jedności. Jednak nie zmienia relacji między nimi, a to ogranicza ich zastosowanie. Dlatego częściej stosuje się standaryzowane lub studentyzowane różnice.

**Standaryzowane różnice.** Z zależności (14.29) wynika, że  $D^2[r_i] = \sigma^2(1 - p_{ii})$ , więc naturalnym sposobem standaryzacji jest podzielenie różnicy  $r_i$  przez jej odchylenie standardowe, które wynosi  $\sigma\sqrt{(1 - p_{ii})}$ , przy czym w praktyce ze względu na nieznaną wariancję  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji zastępuje się ją estymatorem  $s^2$ . W ten sposób definiuje się *standaryzowane różnice*

$$d_i = \frac{r_i}{\sqrt{s^2(1 - p_{ii})}}. \quad (14.32)$$

Wykresy standaryzowanych różnic  $d_i$  w zależności od odpowiedzi  $y_i$  są zbliżone do wykresów skalowanych różnic  $c_i$ , czy zwykłych różnic  $r_i$ , z wyjątkiem obserwacji, dla których odpowiednie elementy  $p_{ii}$  macierzy  $\mathbf{P}$ , leżące na jej przekątnej, są znacznie większe od pozostałych elementów – zbliżone do jedynki.

Standaryzowane różnice są podstawowym narzędziem analizy modelu, a w szczególności mogą służyć za miarę dokładności dopasowania poszczególnych obserwacji do modelu – duża różnica świadczy o słabym dopasowaniu obserwacji, natomiast mała o dobrym. Jednak mają one wadę związaną z własnością metody najmniejszych kwadratów. Jeśli występuje odstająca obserwacja, to odpowiadająca jej różnica przyjmuje dużą wartość, co powoduje znaczne zwiększenie różnicowej sumy kwadratów i w konsekwencji zmniejsza wartości wszystkich

standaryzowanych różnic (a to skutkuje obniżeniem skuteczności metody). Aby wyeliminować tę niedogodność, Hartley [45] zaproponował procedurę polegającą na ponownym dopasowaniu modelu z użyciem danych z pominięciem odstających obserwacji, a to doprowadziło do zdefiniowania tak zwanych „studentyzowanych różnic”.

**Studentyzowane różnice.** Odstające obserwacje mogą wprowadzać znaczne błędy estymacji. Do oceny wpływu  $i$ -tej obserwacji dopasowujemy model, wykorzystując  $n - 1$  pozostałych obserwacji  $y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n$ , w których pominięto  $i$ -tą obserwację. Na podstawie zredukowanych obserwacji wyznacza się wyrównaną ocenę  $\hat{y}_{i(i)}$  odpowiedzi  $y_i$  w  $i$ -tym punkcie oraz ocenę  $s_{(i)}^2$  wariancji  $\sigma^2$ . Różnica  $r_{(i)} = y_i - \hat{y}_{i(i)}$  może być stosowana jako ocena jakości dopasowania modelu w  $i$ -tym punkcie. Aby poprawić efektywność analizy, standaryzuje się różnicę  $r_{(i)}$ , dzieląc ją przez estymator jej odchylenia standardowego i otrzymuje się w ten sposób tak zwane *studentyzowane różnice*

$$t_i = \frac{y_i - \hat{y}_{i(i)}}{\sqrt{D^2[y_i - \hat{y}_{i(i)}]}}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (14.33)$$

Studentyzowane różnice są szczególnie korzystne do identyfikacji odstających obserwacji. Podstawową przeszkodą w ich stosowaniu jest jednak potrzeba przeprowadzenia pełnej analizy  $n$  razy, do wszystkich obserwacji  $i = 1, \dots, n$ , a to wymaga przeprowadzenia olbrzymiej liczby obliczeń numerycznych. Jednak obliczenia te można znacznie skrócić, stosując wzory opracowane przez Vellemana i Welscha [107]. Pozwalają one na obliczenie studentyzowanych różnic na podstawie analizy przeprowadzonej dla wszystkich obserwacji. Można wykazać (por. [50]), że

$$t_i = \frac{r_i}{\sqrt{s_{(i)}^2(1 - p_{ii})}}, \quad (14.34)$$

gdzie  $s_{(i)}^2$  jest oceną wariancji  $\sigma^2$  wyznaczoną z  $y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_n$ . Tę ocenę można obliczyć ze wzoru

$$\begin{aligned} s_{(i)}^2 &= \frac{n-p}{n-p-1} s^2 - \left( \frac{1}{n-p-1} \right) \frac{r_i^2}{1-p_{ii}} \\ &= \frac{s^2}{n-p-1} (n-p-d_i^2), \end{aligned} \quad (14.35)$$

w którym  $d_i$  jest standaryzowaną różnicą określoną wzorem (14.32).

Z porównania wzorów (14.34) oraz (14.32) wynika, że spełniona jest nierówność

$$t_i > d_i.$$

Studentyzowane różnice są czulszym wskaźnikiem złego dopasowania odstających obserwacji do modelu niż standaryzowane różnice.

Ze względu na analogię do rozkładu Studenta obie statystyki  $d_i$ , (14.32) oraz  $t_i$ , (14.34), nazywane są przez wielu autorów tak samo – studentyzowanymi różnicami. Wartości ich różnią się jedynie oceną wariancji  $\sigma^2$  znajdującej się w mianowniku. W wyrażeniu (14.32) estymator jest oparty na wszystkich obserwacjach, a statystyka  $d_i$  nazywana jest *wewnętrzną studentyzowaną różnicą*. W wyrażeniu (14.34) estymator  $\sigma^2$  nie uwzględnia  $i$ -tej obserwacji, a statystyka  $t_i$  jest nazywana *zewnętrzną studentyzowaną różnicą*.

### 14.3.3. Wykresy różnic

Rozpatrzmy niektóre graficzne metody analizy różnic. Wykresy te pozwalają na wykrycie wielu odstępstw od przyjętego modelu i sprawdzenie poprawności przyjętych założeń. Są one podstawowym narzędziem kontroli poprawności otrzymanych wyników. Typowe odstępstwa od założeń wyjściowych modelu można wykryć, analizując zmiany różnic w funkcji różnych wielkości. Najlepiej wykorzystać standaryzowane różnice  $d_i$  lub studentyzowane różnice  $t_i$  i sporządzić ich wykres względem odpowiedzi (predyktora)  $y_i$  lub wyrównanych odpowiedzi  $\hat{y}_i$ .

**Detekcja odstających obserwacji.** Wykresy różnic pozwalają na relatywnie łatwą detekcję odstających obserwacji. Dla dużej liczby obserwacji,  $n > 30$ , prostą i skuteczną procedurą jest reguła „trzech sigm”, która prowadzi do sprawdzenia, czy maksymalna standaryzowana różnica,  $d_{\max} = d_i$  spełnia nierówność

$$|d_i| > 3.$$

Jeśli ten warunek jest spełniony, dla pewnej obserwacji i zostanie ona odrzucona, to należy sprawdzić, w analogiczny sposób, czy wśród pozostałych obserwacji jest odstająca obserwacja.

Dla mniejszej liczby obserwacji,  $n < 30$ , należy stosować  $t$  statystykę lub inne funkcje. Efektywną miarę pozwalającą na wykrywanie wpływowych (odstających)



obserwacji zaproponował Cook [14, 15]. Miara ta, nazywana *odległością Cooka*, zdefiniowana jest następująco

$$\begin{aligned} D_i &= \frac{(\hat{\mathbf{y}}_{(i)} - \hat{\mathbf{y}})^T (\hat{\mathbf{y}}_{(i)} - \hat{\mathbf{y}})}{(p+1)s^2} \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{a}}_{(i)} - \hat{\mathbf{a}})^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} (\hat{\mathbf{a}}_{(i)} - \hat{\mathbf{a}})}{(p+1)s^2} \\ &= \frac{p_{ii} r_i^2}{(p+1)s^2 (1 - p_{ii})^2}. \end{aligned} \quad (14.36)$$

Drugie równanie otrzymuje się po wyrażeniu odpowiedzi  $\hat{\mathbf{y}}$  w funkcji estymowanych parametrów, natomiast trzecie, korzystając ze wzoru (14.25).

Mianownik prawej strony pierwszego równania (14.36) jest kwadratem odległości między wektorem  $\hat{\mathbf{y}}$  wyrównanych odpowiedzi wyznaczonych na podstawie wszystkich  $n$  obserwacji a wektorem wyrównanych odpowiedzi  $\hat{\mathbf{y}}_{(i)}$  wyznaczonym z  $n - 1$  obserwacji (po eliminacji  $i$ -tej obserwacji). Statystyka  $D_i$  jest miarą wpływu  $i$ -tej obserwacji na wszystkie oceny odpowiedzi. Mianownik  $(p+1)s^2$  jest elementem normalizującym.

Weisberg zbadał własności statystyki  $D_i$  [114]. Dla testu sprawdzającego wpływ  $i$ -tej obserwacji założył poziom istotności  $\alpha = 0,5$  i stąd otrzymał następujący warunek

$$D_i > 1$$

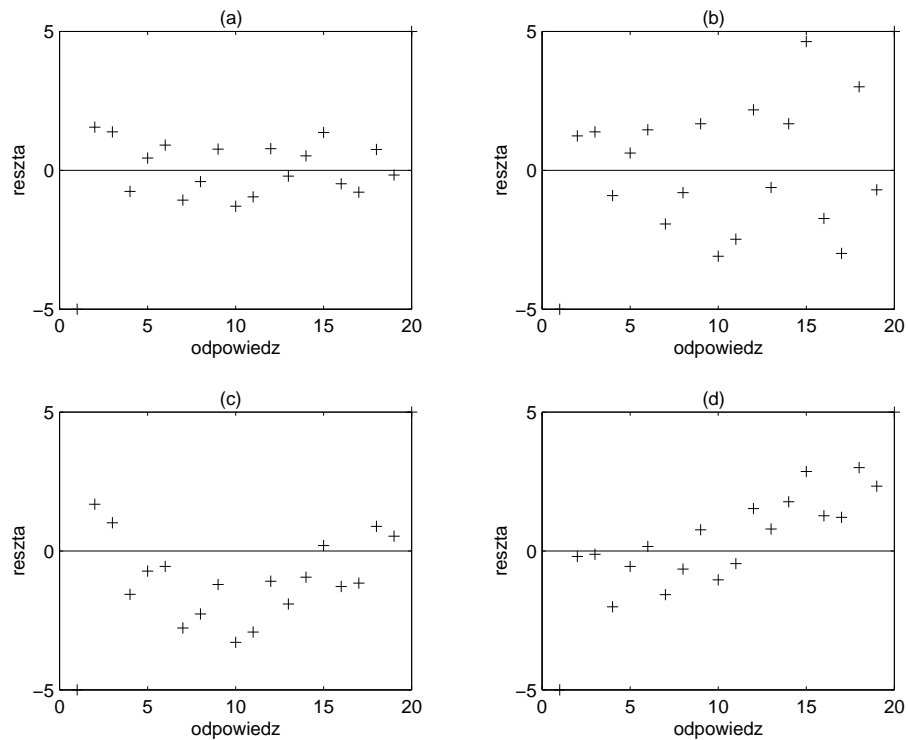
wskazując, że  $i$ -tą obserwację można uznać za wpływową.

W praktyce stosuje się również inną, uproszczoną procedurę. Oblicza się odległości Cooka dla wszystkich obserwacji i porównuje się je między sobą. Występowanie odległości znacznie większej od pozostałych wskazuje na wpływową obserwację. Jednak, jak wykazał Hocking [50], w przypadku występowania kilku obserwacji wpływowych w jednym zbiorze test oparty na odległości Cooka może dać błędne wyniki.

**Badanie normalności rozkładu obserwacji.** Po eliminacji odstających obserwacji należy skontrolować, czy pozostałe obserwacje mają rozkład normalny. Badanie to najlepiej przeprowadzić, wykorzystując standaryzowane różnice  $d_i$ . Można stosować różne testy normalności (omówione w rozdziale 3). Zaleca się jednak zastosowanie, przede wszystkim graficznego testu normalności. W tym celu porządkuje się standaryzowane różnice według wzrastających wartości  $d_{(1)} < d_{(2)} < \dots < d_{(n)}$  i nanosi wykres wartości  $d_{(i)}$  w punktach  $(i - \frac{1}{2})/n$

na tak zwaną „normalną siatkę”. Można do tego wykorzystać specjalistyczne oprogramowanie komputerowe (w pakiecie MATLAB funkcja `normplot`). Jeśli spełnione są założenia o rozkładzie normalnym, to punkty te powinny w przybliżeniu leżeć na linii prostej. Pojedyncze punkty oddalone od linii prostej wskazują na odstające obserwacje. Należy podkreślić, że dla małej liczby obserwacji  $n$  zwykle nie jest możliwe rozstrzygnięcie, czy odstająca obserwacja powinna być odrzucona.

**Badanie zmian różnic w funkcji wyrównanych ocen.** Wiele odstępstw od założeń można wykryć, badając wykresy zmian różnic  $d_i$  (lub  $t_i$ ) w funkcji różnych zmiennych.



Rys. 14.1. Typowe wykresy różnic: (a) odpowiedni wykres, (b) wykres wskazujący, że wariancja obserwacji wzrasta wraz ze wzrostem wartości odpowiedzi  $y$ , (c) obecność trendu systematycznego wskazuje na nieodpowiedni model, (d) obecność liniowego trendu wskazuje zazwyczaj na błędy w obliczeniach numerycznych

1. *Badanie zmian wariancji obserwacji w funkcji odpowiedzi.* W przypadku gdy wariancja odpowiedzi  $y_i$  (błędu obserwacji  $\varepsilon_i$ ) jest stała, wtedy wartości różnic  $d_i$  powinny mieć jednolity rozkład. Taką sytuację można zaobserwować na rysunku 14.1a, gdzie różnice rozłożone są jednolicie w pasie o jednakowej szerokości. Na rysunku 14.1b przedstawiona jest inna, typowa sytuacja, gdy różnice rozłożone są w obszarze w kształcie rozszerzającego się klina. Wykres taki wskazuje na wzrost wariancji obserwacji wraz ze wzrostem odpowiedzi – zwykle jest to jednoznaczne ze wzrostem numeru obserwacji  $i$ . Należy w tym przypadku zastosować transformację „stabilizującą” ich wariancję lub stosować ważoną metodę NK.

2. *Sprawdzanie adekwatności modelu.* Na rysunku 14.1c różnice układają się wokół krzywej, a nie wokół osi poziomej jak na rysunku 14.1a. Jest to typowa sytuacja, która wskazuje na nieodpowiedni model. Należy zastosować inny model matematyczny obiektu lub uzupełnić poprzedni o linię trendu dopasowaną do średniego wykresu zmian różnic. Przykładem może być sytuacja, gdy założono liniową zależność  $y = a_0 + a_1x$ , a tymczasem właściwym modelem jest funkcja kwadratowa  $y = a_0 + a_1x + a_2x^2$ .

3. *Błąd w obliczeniach.* Układanie się różnic wokół linii monotonicznej, np. prostej jak pokazano na rysunku 14.1d może wskazywać na błąd w obliczeniach. Należy skontrolować program komputerowy.

**Wykres różnic w funkcji pominiętej zmiennej.** Każda zmienna, która wpływa na odpowiedź systemu powinna być uwzględniona jako regresor (pobudzenie)  $x$ . Jednak eksperymentator nie ma często informacji o wszystkich istotnych zmiennych wpływających na odpowiedź i może niektóre pominać. Wykres zmian różnic względem pominiętej zmiennej może pomóc wykryć taką sytuację. Przeprowadzenie odpowiedniego testu wymaga jednak informacji o wartościach przyjmowanych przez pominiętą zmienną w czasie eksperymentu. Przykładem zmiennej, która często jest pomijana, jest czas. Zwykle pomiary wykonywane są w kolejnych punktach czasowych, więc odpowiednim wykresem sprawdzającym, czy czas został pominięty, jest wykres różnic  $d_i$  w funkcji  $i$ , który może wskazać na istnienie korelacji między kolejnymi różnicami. Korelację można zaobserwować na wykresie zależności różnic od czasu lub/i stosować testy statystyczne. Często stosowany jest do tego celu test zaproponowany przez Durbiną i Watsona [23]. Służy on do testowania hipotezy  $H$ , że współczynnik  $a$  w modelu autoregresji

$y_i = ay_{i-1} + \varepsilon_i$  jest równy zeru. Durbin i Watson zastosowali statystykę

$$D = \frac{\sum_{i=2}^n (r_i - r_{i-1})^2}{\sum_{i=2}^n r_i^2}. \quad (14.37)$$

opartą na kryterium Abbego, [70]. Dla tej statystyki i różnych poziomów istotności obliczyli wartości graniczne  $d_L$  i  $d_U$  (odtworzone następnie przez Abrahama [1]) oraz wykazali, że zależą one jedynie od liczby regresorów (dla modeli z większą liczbą regresorów). Testowanie hipotezy polega na zbadaniu relacji statystyki  $D$  względem granic  $d_L$  i  $d_U$ , i podjęciu decyzji: jeśli  $D > d_u$ , to hipoteza  $H$  jest przyjmowana, gdy  $D < d_L$ , odrzucona; natomiast test nie rozstrzyga, gdy  $d_L \leq D \leq d_U$ .

## Rozdział 15

# Estymatory odporne w analizie regresji

Z dotychczasowej analizy wynika, że gdy obserwacje  $y_i$  spełniają podstawowe założenia analizy regresji, a zwłaszcza mają rozkład normalny, wówczas estymatory wyznaczone metodą najmniejszych kwadratów mają wiele pożądaných własności. Przede wszystkim dla modeli liniowych pokrywają się z estymatorami największej wiarygodności i są względem podstawowych kryteriów optymalne. Jednak wśród badaczy jest obecnie świadomość niebezpieczeństwa, jakie niesie dla metody NK pojawienie się nietypowych danych, a zwłaszcza odstających obserwacji [4, 92]. Ponadto, jeśli rozkład prawdopodobieństwa obserwacji odbiega od rozkładu normalnego, na przykład jest tak zwanym „rozkładem długoogonowym”, to wyniki otrzymane metodą najmniejszych kwadratów mogą być dalekie od optymalnych [3]. Odstające obserwacje pojawiają się często w rzeczywistych danych i mogą być niezauważone, zwłaszcza gdy obliczenia przeprowadzane są za pomocą komputera. Nie tylko odpowiedź  $y$  układu może być obciążona nadmiernymi błędami, również regresory  $x$  (wielkości wejściowe) mogą „odstawać” od średnich wartości, prowadząc do pojawienia się tak zwanych „punktów dźwigniowych” (ang. *leverage points*). Oba rodzaje odstających obserwacji mogą znacznie zniekształcić wyniki otrzymane klasyczną metodą NK. Warto tu podkreślić, że w przypadku gdy występuje więcej niż jeden regresor, odstające obserwacje mogą nie być bezpośrednio widoczne na wykresie i są trudne do wykrycia.

Dla zaradzenia tym problemom opracowano specjalne estymatory nazywane *odpornymi* (ang. *robust estimators*). Estymatory odporne charakteryzują się znacznie zmniejszoną wrażliwością na odstające obserwacje, a jednocześnie nawet dla rozkładów normalnych ich własności w niewielkim stopniu odbiegają od własności estymatorów najmniejszych kwadratów. Wadą ich jest jednak większa złożoność obliczeniowa i często trudności w interpretacji wyników. odporne metody estymacji stanowią obecnie duży dział statystyki matematycznej. W rozdziale tym ograniczymy się jedynie do krótkiego omówienia podstaw estymacji odpornej,

a zainteresowanemu tą problematyką czytelnikowi poleca się monografie Hubera [58] i Rousseeuwa [92].

### 15.1. Odporność estymatorów na odstające obserwacje

Zanim przejdziemy do przedstawienia estymatorów odpornych omówimy „punkt załamania estymatora” – miarę odporności estymatora na zakłócone obserwacje zaproponowaną przez Hodgesa [52].

Niech  $\Gamma = \{z_1, \dots, z_n\}$  będzie  $n$ -elementowym zbiorem, w którym  $z_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip}, y_i)$  są ciągami danych,  $x_{ij}$  regresorami,  $y_i = a_1x_{i1} + \dots + a_px_{ip} + \varepsilon_i$  obserwacjami,  $i = 1, \dots, n$ , i niech

$$T(\Gamma) = \hat{\mathbf{a}} \quad (15.1)$$

będzie dowolnym nieobciążonym estymatorem parametrów  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$  wyznaczonym metodami regresji z danych  $\Gamma$ . Symbolem  $\Gamma_k$  oznaczymy ciąg danych utworzonych ze zbioru  $\Gamma$ , w których  $k$ -elementów zostało zakłóconych – zastąpionych przez dowolne wartości liczbowe; natomiast symbolem  $O(k; T, \Gamma)$  oznaczymy maksymalne obciążenie estymatora  $T$  spowodowane takimi zakłóceniami, więc

$$O(k; T, \Gamma) = \sup_{\Gamma_k} |T(\Gamma_k) - T(\Gamma)|, \quad (15.2)$$

gdzie supremum wyznaczone jest po wszystkich zakłóconych ciągach danych  $\Gamma_k$ . Jeśli obciążenie  $O(k; T, \Gamma)$  jest nieskończone, to  $k$  odstających obserwacji może mieć dowolnie duży wpływ na estymator  $T$ . Mówimy wtedy, że estymator się *załamuje*.

Miarą odporności estymatora na odstające obserwacje jest *punkt załamania estymatora*  $T$ , którym jest liczba

$$\beta(T, \Gamma) = \min_k \left\{ \frac{k}{n} : O(k; T, \Gamma) = \infty \right\}. \quad (15.3)$$

Tak więc punkt załamania jest równy stosunkowi najmniejszej liczby danych, których zmiana może spowodować dowolnie duże obciążenie estymatora  $T$  do liczby wszystkich danych  $n$ . Estymatory odporne powinny mieć jak największą wartość punktu załamania, przy czym nie można przekroczyć wartości 0,5. Jeśli  $\beta(T, \Gamma) = 0,5$ , to oznacza, że dla takiego estymatora nawet połowa danych może być zakłócona.

W estymatorach NK zmiana jednej danej, na przykład  $y_1$ , może spowodować dowolnie dużą zmianę wartości estymatora, stąd punkt załamania metody NK jest równy

$$O(k; T, \Gamma) = \frac{1}{n} \quad (15.4)$$

i dąży do zera, gdy  $n \rightarrow \infty$ . Oznacza to, że punkt załamania estymatorów NK wynosi 0. Zilustrowano to prostym przykładem 15.1.

**Przykład 15.1.** Załóżmy, że dokonano  $n$  pomiarów bezpośrednich wielkości  $a$  i otrzymano  $y_i = a + \varepsilon_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Elementy  $z_i$  zbioru danych  $\Gamma$  są równe  $z_i = (1, y_i)$ ; w modelu tym wszystkie regresory  $x_{i1}$  są równe 1. Jeśli spełnione są podstawowe założenia analizy regresji, to nieobciążonym estymatorem NK parametru  $a$  jest średnia arytmetyczna  $\hat{a} = \bar{y}$ . Załóżmy, że jedna obserwacja, dla ustalenia uwagi przyjęto, że jest nią  $y_1$ , zostanie zakłócona, jeżeli  $y_1 \rightarrow \infty$ , to estymator  $\bar{y}$  parametru  $a$  dąży do nieskończoności, a stąd wynika, że obciążenie estymatora dąży do nieskończoności dla  $k = 1$ , więc punkt załamania  $k/n$  estymatora  $\bar{y}$  dąży do zera, gdy liczba obserwacji dąży do nieskończoności. Jeśli za estymator parametru  $a$  przyjmiemy medianę próby, to łatwo zauważyć, że dowolna zmiana pojedynczej obserwacji, np.  $y_1 \rightarrow \infty$  nie powoduje istotnej zmiany estymatora, więc punkt załamania mediany jest  $\beta(T, \Gamma) \geq 1/n$ . Czytelnikowi pozostawiamy wyznaczenie punktu załamania mediany próby dla dowolnej liczby obserwacji.  $\square$

## 15.2. M-estymatory

Spośród wielu klas estymatorów odpornych duże zastosowanie znalazły M-estymatory. Zawdzięczają to zarówno swoim własnościom, jak i łatwej interpretacji. Przedstawimy podstawy M-estymatorów.

Przypomnijmy, że metoda najmniejszych kwadratów polega na wyznaczeniu takich wartości parametrów, które minimalizują sumę

$$Q(\mathbf{a}) = \min_{a_j} \sum_i r_i^2,$$

gdzie

$$r_i = y_i - (x_{i1}a_1 + \dots + x_{ip}a_p), \quad j = 1, \dots, n, \quad (15.5)$$

jest różnicą między obserwacją  $y_i$  odpowiedzi układu a jej oceną  $x_{i1}a_1 + \dots + x_{ip}a_p$  otrzymaną dla dowolnych wartości parametrów  $a_j$ .

Podstawową wadą metody NK jest duża wrażliwość na odstające obserwacje. Wynika to stąd, że różnice podnoszone są do kwadratu, a to powoduje, że odstające obserwacje wpływają na estymatory NK w znacznie większym stopniu niż regularne punkty. W rezultacie istnienie odstających obserwacji wprowadza znaczne błędy estymacji NK.

Już w 1887 r. Edgerworth [92] zaproponował alternatywną metodę estymacji (do metody NK), w której minimalizowana jest suma wartości bezwzględnych odchyłeń

$$g(\mathbf{a}) = \min_{a_j} \sum_i |r_i|. \quad (15.6)$$

Rozwiązanie to nazywane jest również regresją  $L_1$  (oznaczenie pochodzi od oznaczenia normy  $L_1$ ). Problem minimalizacji normy  $L_1$  można zredukować do „liniowego programowania”, gdzie do wyznaczenia minimum stosowana jest zwykle metoda simpleksów. Jednakże, jak wykazali Rousseeuw oraz Leroy [92], s. 11–12, norma  $L_1$  nie zabezpiecza w pełni przed wpływem odstających obserwacji.

Naturalnym uogólnieniem metod  $L_1$  i  $L_2$  (NK) jest metoda  $L_p$ ,  $p \in \langle 1; 2 \rangle$ , w której minimalizowane jest wyrażenie

$$g(\mathbf{a}) = \min_{a_j} \sum_i |r_i|^p, \quad 1 \leq p \leq 2. \quad (15.7)$$

Dla  $p = 2$  otrzymuje się metodę najmniejszych kwadratów – norma  $L_2$ . Niektórzy autorzy (na przykład Andrews [4] i Hogg [54]), proponują przyjęcie kompromisowej wartości  $p = 1, 5$ . Jednakże, jak wykazują badania przeprowadzone przez Rousseeuwa i Leroya [92], również i to rozwiązanie nie jest w pełni zadowalające.

Następnym krokiem w rozwoju estymatorów odpornych były zaproponowane przez Hubera [57, 58] tak zwane *M-estymatory*. Bazują one na zastąpieniu wyrażenia  $|r_i|^p$  w różnicowej sumie kwadratów (15.7) przez pewną funkcję  $\rho(r_i)$  różnicy  $r_i$ , skąd otrzymuje się

$$g(\mathbf{a}) = \min_{a_j} \sum_{i=1}^n \rho(r_i), \quad (15.8)$$

gdzie  $\rho$  oznacza symetryczną funkcję (taką, że  $\rho(-t) = \rho(t)$ ) z jednoznacznie określonym minimum w zerze. Funkcja ta nazywana jest *funkcją kryterialną*. Kładąc  $\rho(t) = t^2$ , otrzymuje się klasyczną metodę najmniejszych kwadratów – regresję  $L_2$ , podobnie kładąc  $\rho(t) = |t|$  otrzymuje się regresję  $L_1$ . Tak więc M-estymatory można uważać za uogólnienie estymatorów  $L_p$ .



Minimum funkcji  $g(\mathbf{a})$  określonej wzorem (15.8) wyznacza się pośrednio, obliczając jej pochodne względem parametrów  $a_j$  i przyrównując je do zera. Stąd otrzymuje się układ równań

$$\sum_{i=1}^n \psi(r_i) x_{ij}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (15.9)$$

w którym funkcja  $\psi$  jest pochodną funkcji  $\rho$ . Stosowane są nieliniowe funkcje  $\psi$ , jak również takie, które nie mają pochodnych w każdym punkcie i wyznaczenie minimum funkcji  $g(\mathbf{a})$  może stwarzać znaczne problemy numeryczne.

Rousseeuw wykazał (por. [92], s. 12), że rozwiązanie układu równań (15.9) zależy od sposobu skalowania osi  $y$ . Dlatego zaleca się stosowanie standaryzowanych różnic, wtedy równanie (15.9) sprowadza się do

$$\sum_{i=1}^n \psi(r_i/\hat{\sigma}) x_{ij}, \quad j = 1, \dots, p, \quad (15.10)$$

gdzie  $\hat{\sigma}$  jest bieżącą estymatą wariancji.

Zasadniczym problemem w konstruowaniu M-estymatorów jest odpowiedni dobór funkcji kryterialnej  $\rho$  odpowiedniej do analizowanego problemu i zapewniającej pożądane własności estymatora. Największe zastosowanie znalazła następująca funkcja kryterialna zaproponowana przez Hubera [58]

$$\rho(t) = \begin{cases} \frac{1}{2}t^2, & |t| \leq h, \\ h|t| - \frac{1}{2}h^2, & |t| > h, \end{cases} \quad (15.11)$$

gdzie  $h$  jest parametrem, który przedstawia się zwykle w formie iloczynu

$$h = cs,$$

w którym  $c$  jest liczbą dobieraną do analizowanego problemu, natomiast  $s$  jest odpornym estymatorem odchylenia standardowego  $\sigma$  pojedynczej obserwacji. Opcjonalny parametr  $c$  pozwala na podział obserwacji na dwie grupy. Obserwacje, dla których różnice są mniejsze niż  $cs$ , zalicza się do pierwszej grupy i mają one większą wagę – taką jak w metodzie NK. Pozostałe obserwacje, odpowiadające im różnice są większe niż  $cs$ , mają mniejszą wagę, a więc w mniejszym stopniu wpływają na estymatory. Eksperymentator powinien dobrać odpowiednią do celu wartość parametru  $c$ . Huber [58] proponował  $c = 2, 1$ .

Zaproponowana przez Hubera funkcja  $\rho(t)$  (wzór (15.11)) ma interesujące własności. Dla małych błędów stosowane jest kryterium najmniejszych kwadratów,

metryka  $L_2$ , natomiast dla większych błędów metryka  $L_1$ . Parametry funkcji  $\rho(t)$  zostały tak dobrane, aby była ona funkcją ciągłą. Ze wzoru (15.11) wynika, że funkcja ta zachowuje własności estymatorów z metryką  $L_2$  (NK) dla małych różnic  $r_i$  i własności estymatorów  $L_1$  dla dużych różnic. Zaletą jej są relatywnie proste obliczenia numerycznie. Ponadto M-estymatory są statystycznie bardziej efektywne niż estymatory  $L_1$ , jednak ich punkt załamania jest równy  $1/n$  – więc nie uzyskuje się poprawy punktu załamania zarówno względem estymatorów z metryką  $L_2$ , jak i metryką  $L_1$ .

Niski punkt załamania M-estymatorów stymulował badania mające na celu poprawę ich własności. Wynikiem tych badań było między innymi opracowanie *uogólnionych M-estymatorów*. Charakterystyczną cechą tych estymatorów jest funkcja wag  $w(t)$  pozwalająca na elastyczne zmniejszanie wpływu odstających obserwacji. Omówiono podstawową klasę tych estymatorów, tak zwaną „iteracyjną metodę najmniejszych kwadratów”.

### 15.3. Iteracyjna metoda NK z doregulowaniem wag

W celu rozwiązania problemu znalezienia minimum sumy (15.8) założono, że funkcja kryterialna  $\rho(t)$  jest różniczkowalna. Ponadto uwzględniono fakt, że rozwiązanie jest szczególnie proste, w metodzie NK, tj. gdy funkcja  $\rho(t)$  jest postaci  $\rho(t) = t^2$ . Obliczając pochodną funkcji kryterialnej (15.8) M-estymatorów, otrzymamy

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(\mathbf{a})}{\partial a_j} &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial \rho(r_i)}{\partial r_i} \frac{\partial r_i}{\partial a_j} \\ &= \sum_{i=1}^n w(r_i) \left( 2r_i \frac{\partial r_i}{\partial a_j} \right), \end{aligned} \quad (15.12)$$

gdzie

$$w(r_i) = \frac{1}{2r_i} \frac{\partial \rho(r_i)}{\partial r_i}. \quad (15.13)$$

jest funkcją wag.

Dla kryterium NK, estymatory  $L_2$ ,  $\rho(r_i) = r_i^2$ , więc po podstawieniu do wzoru (15.13) otrzymuje się wagi  $w_i = 1$ . Wynika stąd następujący iteracyjny schemat obliczeniowy iteracyjnej metody NK z doregulowaniem wag:

1. W pierwszym kroku algorytmu iteracyjnego przyjmuje się takie same wagi, zwykle  $w(r_i^{(1)}) = 1$  – wyznacza się estymatory metodą NK.

2. Wyznacza się estymatory  $\hat{\mathbf{a}}^{(1)}$  NK, minimalizując funkcję  $Q(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n r_i^2$ .
3. Znając oceny  $\hat{\mathbf{a}}^{(1)}$ , wyznacza się różnice  $r_i^{(2)} = r_i - \hat{\mathbf{a}}^{(1)}$  dla drugiego kroku iteracyjnego.
4. Dla tych różnic wyznacza się nowe wagi  $w_i^{(2)}$  ze wzoru (15.13).
5. Wyznacza się nowe estymatory  $\hat{\mathbf{a}}^{(2)}$ , stosując ważoną metodę NK, tj. minimalizując funkcję

$$Q(a) = \sum_{i=1}^n w(r_i^{(2)}) r_i^{(2)}. \quad (15.14)$$

6. Korzystając z otrzymanych estymatorów, wyznacza się nowe różnice  $r_i^{(3)}$  itd.

Proces iteracyjny kontynuuje się aż do uzyskania odpowiednio dokładnego rozwiązania.

Stosując kryterialną funkcję M-estymatorów zaproponowaną przez Hubera (15.11), otrzymuje się wagi

$$w(r_i) = \begin{cases} 1 & |r_i| \leq h, \\ \frac{h}{|r_i|} & |r_i| > h, \end{cases} \quad (15.15)$$

gdzie  $h = cs$ ,  $s$  jest estymatorem odpornym wariancji  $\sigma$ , natomiast  $c$  jest założonym współczynnikiem. Huber przyjmował wartość  $c = 2,1$ .

Idea metody jest widoczna. W pierwszym kroku zaczyna się od metody NK, wagi  $w(r_i) = 1$ . W następnych krokach, jeśli reszta  $r_i$  jest mała (mniejsza od około  $2,1 \sigma$ ), to przypisuje się jej wagę 1. Jeśli duża,  $|r_i| > h$ , to zmniejsza się wagę, przy czym maleje ona w miarę wzrostu reszty. Metoda jest efektywna, jednak jej punkt załamania jest w dalszym ciągu równy  $1/n$ . Również inne rodzaje ogólnych M-estymatorów nie poprawiają punktu załamania. Omówimy teraz estymatory medianowe charakteryzujące się większym punktem załamania.

## 15.4. Estymatory medianowe

Zarówno M-estymatory, jak i uogólnione M-estymatory mają punkt załamania  $1/n$ . Pojawia się więc pytanie, czy istnieją estymatory o większym punkcie załamania. Pozytywną odpowiedź dał Siegel [103], definiując tak zwane *estymatory z powtarzaną medianą*, których punkt załamania wynosi 50%. Jest to największa wartość, jaką może osiągnąć punkt załamania, gdyż jeśli ponad 50% danych jest zniekształconych, to nie można określić, które z nich są poprawne. Jednak

estymatory z powtarzaną medianą mają kilka wad. Przede wszystkim wymagają bardzo dużej liczby obliczeń i nie są ekwiwariantne do liniowych przekształceń regresorów  $x_{ij}$ . Estymatory te znalazły zastosowanie jedynie do modeli o małej liczbie parametrów. Estymatorami o dużej wartości punktu załamania, które znalazły szersze zastosowanie są „estymatory najmniejszej mediany kwadratów” [93] oraz „trymowane estymatory najmniejszych kwadratów” [92].

Estymator parametrów  $\mathbf{a}$  nazywamy *estymatorem najmniejszej mediany kwadratów* (NMK), jeśli minimalizuje wyrażenie

$$\min_{\mathbf{a}} \text{med } r_i^2, \quad i = 1, \dots, n, \quad (15.16)$$

gdzie  $\text{med } r_i^2$  oznacza medianę zbioru  $\{r_i^2\}$ . Minimalizacja przeprowadzana jest względem parametrów  $\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_p]^T$ . Duża odporność estymatorów NMK wynika z dziedziczenia przez nie własności mediany. W szczególności punkt załamania estymatorów NMK jest równy 1/2 (50%), a więc przyjmuje największą możliwą wartość, jaką może osiągnąć jakikolwiek estymator. Podstawową wadą estymatorów NMK jest słaba zbieżność algorytmów numerycznych.

Kompromisowym rozwiązaniem, które z zachowaniem dużej wartości punktu załamania estymatora charakteryzuje się relatywnie szybko zbieżnym algorytmem numerycznym, jest zaproponowany przez Rousseeouwa [93] *trymowany estymator najmniejszych kwadratów* (TENK) zdefiniowany wzorem

$$\min_{\mathbf{a}_j} \sum_{i=1}^k r_{(i)}^2, \quad (15.17)$$

gdzie  $r_{(1)}^2, r_{(2)}^2, \dots, r_{(n)}^2$  jest uporządkowanym ciągiem kwadratów reszt  $r_i^2$ , natomiast  $k$  jest liczbą naturalną mniejszą niż  $n$ , dokładnie  $k \leq n$ . Minimum wyrażenia (15.17) wyznacza się względem parametrów  $a_1, \dots, a_p$ . Tak więc trymowany estymator najmniejszych kwadratów jest po prostu „zwykłym” estymatorem NK, z tą różnicą, że pomija pewną liczbę obserwacji charakteryzujących się dużymi resztami. Dzięki temu można uzyskać dużą wartość współczynnika załamania estymatora. Zaletą tego estymatora jest dziedziczenie własności estymatora NK, a zwłaszcza jego prostota. Wartość punktu załamania TENK zależy od wartości  $k$ , czyli liczby uwzględnionych danych. Największą wartość współczynnika załamania estymatora, zbliżoną do 50%, osiąga się, gdy liczba uwzględnianych obserwacji  $k$  wynosi około  $n/2$ , przypomnijmy, że  $k$  powinno być nie większe niż  $n/2$ .

Wobec dużej liczby różnych estymatorów odpornych pojawia się problem wyboru klasy estymatorów i następnie konkretnego estymatora w danej klasie. Na

---

przykład w przypadku M-estymatorów należy dodatkowo wybrać funkcję kryterialną  $\rho(t)$ , natomiast w przypadku estymatorów TENK należy dobrać liczbę  $k$  uwzględnianych w analizie obserwacji. Wybór zależy od celu i założonych własności estymatorów. Na przykład, jeśli obserwacje mają rozkład zbliżony do normalnego, a ponadto pojawiają się obserwacje odstające od innych w stopniu niewiele odbiegającym od rozkładu normalnego, to dobrym rozwiązaniem są M-estymatory z funkcją kryterialną Hubera (15.11). W przypadku gdy może pojawić się duża liczba znacznie zakłóconych obserwacji, wtedy należy wybrać estymator NMK lub prostszy rachunkowo estymator TENK.



## Dodatek A

# Wybrane wiadomości z podstaw matematyki

## A.1. Algebra macierzy

### A.1.1. Wektory własne i wartości własne

Niech  $\mathbf{A}$  będzie macierzą kwadratową o wymiarze  $n \times n$ . Jeśli dla niezerowego wektora  $\mathbf{x}$  i pewnej liczby  $\lambda$  spełnione jest równanie

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x},$$

to  $\mathbf{x}$  nazywamy *wektorem własnym*, a  $\lambda$  *wartością własną* macierzy  $\mathbf{A}$ . Jeśli  $\mathbf{x}$  jest wektorem własnym macierzy  $\mathbf{A}$  odpowiadającym wartości własnej  $\lambda$ , to każdy wektor  $\alpha\mathbf{x}$ , gdzie  $\alpha \in \mathbb{R}$ , jest również wektorem własnym odpowiadającym tej samej wartości własnej. Wektory własne odpowiadające tej samej wartości własnej tworzą jednowymiarową przestrzeń wektorową.

Przenosząc w podanym równaniu człon z prawej strony na lewą, po przekształceniach, otrzymuje się równanie

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}_n)\mathbf{x} = 0,$$

które ma rozwiązanie, gdy

$$|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}_n| = 0.$$

Wyznacznik  $|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}_n|$  jest *wielomianem charakterystycznym macierzy  $\mathbf{A}$* . Pierwiastki tego wielomianu są wartościami własnymi macierzy  $\mathbf{A}$ . Macierz kwadratowa  $\mathbf{A}$  o wymiarze  $n \times n$  ma  $n$  wartości własnych (w przestrzeni zespolonej).

1. Wartości własne macierzy symetrycznej są rzeczywiste.

2. Wektory własne  $\mathbf{x}_i$  i  $\mathbf{x}_j$ , odpowiadające różnym wartościom własnym  $\lambda_i$  i  $\lambda_j$ , są ortogonalne.

**Dowód.** Z definicji  $\mathbf{A}\mathbf{x}_i = \lambda_i\mathbf{x}_i$ ,  $\mathbf{A}\mathbf{x}_j = \lambda_j\mathbf{x}_j$ . Mnożąc pierwszą równość lewostronnie przez  $\mathbf{x}_j^T$ , a drugą przez  $\mathbf{x}_i^T$ ; następnie odejmując otrzymane równości stronami, otrzymuje się

$$(\lambda_i - \lambda_j)\mathbf{x}_j^T \mathbf{x}_i = 0,$$

a stąd  $\mathbf{x}_j^T \mathbf{x}_i = 0$ , co jest warunkiem ortogonalności.  $\square$

3. Rząd symetrycznej macierzy  $\mathbf{A}$  jest równy liczbie jej niezerowych wartości własnych.

**Dowód.** Dla dowolnej symetrycznej macierzy  $\mathbf{A}$  istnieje macierz ortogonalna  $\mathbf{C}$ , dla której  $\mathbf{A} = \mathbf{C}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{C}$ , gdzie  $\mathbf{\Lambda}$  jest macierzą diagonalną. Uwzględniając fakt, że jeśli  $\mathbf{D}$  jest dowolną macierzą nieosobliwą,  $n \times n$ , to  $\text{rank}(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{D}\mathbf{A})$  otrzymamy:  $\text{rank}(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{C}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{C}) = \text{rank}(\mathbf{\Lambda})$ , a rząd macierzy diagonalnej  $\mathbf{\Lambda}$  równy jest liczbie jej niezerowych elementów.  $\square$

### A.1.2. Ślad i rząd macierzy

Śladem macierzy kwadratowej  $\mathbf{A} = [a_{ij}]$  o wymiarze  $n \times n$  nazywamy sumę jej diagonalnych elementów

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n a_{ii}.$$

Jeśli wymiary macierzy są zgodne, to

1.  $\text{tr}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{A}) + \text{tr}(\mathbf{B})$ .
2.  $\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{B}\mathbf{A})$ .

Obie własności można łatwo sprawdzić bezpośrednio.

3. Jeśli  $\mathbf{A}$  jest macierzą symetryczną o wymiarze  $n \times n$  i wartościach własnych  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ , to

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \tag{A.1}$$

**Dowód.** Ponieważ  $\mathbf{A}$  jest macierzą symetryczną, więc istnieje macierz ortogonalna  $\mathbf{C}$  taka, że  $\mathbf{C}^T \mathbf{A} \mathbf{C} = \text{diag}[\lambda_1, \dots, \lambda_n] = \mathbf{\Lambda}$ , lub co jest równoważne  $\mathbf{A} = \mathbf{C} \mathbf{\Lambda} \mathbf{C}^T$ . W związku z tym  $\text{tr}(\mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{C} \mathbf{\Lambda} \mathbf{C}^T) = \text{tr}(\mathbf{C} \mathbf{C}^T \mathbf{\Lambda}) = \text{tr}(\mathbf{\Lambda}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i$ , gdyż dla macierzy ortogonalnej  $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}^T$ .  $\square$

4. Dla założeń jak w poprzednim punkcie

$$\text{tr}(\mathbf{A}^{-1}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1}, \quad (\mathbf{A} \text{ jest nieosobliwa}) \tag{A.2}$$

**Dowód.** Ponieważ  $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{C}^T \mathbf{A} \mathbf{C}$ , więc  $\mathbf{\Lambda}^{-1} = \mathbf{C}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{C}$ , stąd  $\text{tr}(\mathbf{\Lambda}^{-1}) = \text{tr}((\mathbf{C}^T \mathbf{A}^{-1}) \mathbf{C}) = \text{tr}(\mathbf{A}^{-1}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{-1}$ .  $\square$

Rzędem macierzy kwadratowej  $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ , oznaczenie  $\text{rank}(\mathbf{A})$ , o wymiarze  $n \times n$  nazywa się liczbę liniowo niezależnych kolumn tej macierzy. Można wykazać, że liczba liniowo niezależnych kolumn jest równa liczbie liniowo niezależnych wierszy.



### A.1.3. Macierze ortogonalne

Macierz kwadratową  $\mathbf{C}$ , o wymiarze  $n \times n$ , nazywamy *macierzą ortogonalną* jeśli  $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}^T$ . Macierze ortogonalne mają następujące własności:

1. Wiersze i kolumny macierzy ortogonalnej  $\mathbf{C}$  są ortogonalnymi wektorami o normie 1.
2.  $|\mathbf{C}| = \pm 1$ .
3.  $-1 < c_{ij} < 1$ , gdy  $i \neq j$ .
4. Macierz złożona z wektorów własnych macierzy symetrycznej jest ortogonalna.

### A.1.4. Macierze idempotentne

Macierz kwadratową  $\mathbf{P}$ , o wymiarze  $n \times n$ , nazywamy *macierzą idempotentną* jeśli  $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ . Symetryczna idempotentna macierz nazywana jest macierzą rzutu. Macierze idempotentne mają następujące własności:

1. Symetryczna macierz  $\mathbf{P}$  jest idempotentną macierzą rzędu  $r$ ,  $r \leq n$ , wtedy i tylko wtedy, gdy  $r$  jej wartości własnych równa jest 1, a  $n - r$  wartości własnych równa jest 0.

**Dowód.** Jeśli  $\mathbf{P}$  jest macierzą idempotentną, to z równości  $\mathbf{P}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ , po lewostronnym pomnożeniu obu stron równania przez  $\mathbf{x}^T$ , wynika  $\lambda\mathbf{x}^T\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{P}^2\mathbf{x} = (\mathbf{P}\mathbf{x})^T(\mathbf{P}\mathbf{x}) = \lambda^2\mathbf{x}^T\mathbf{x}$ . Odejmując pierwsze wyrażenie od ostatniego, otrzymuje się równanie  $\lambda(\lambda - 1)\mathbf{x}^T\mathbf{x} = 0$  lub po uproszczeniu  $\lambda(\lambda - 1) = 0$ , stąd wartości własne mogą być równe 1 lub 0.  $\square$

2. Jeśli  $\mathbf{P}$  jest macierzą rzutu, to  $\text{tr}(\mathbf{P}) = \text{rank}(\mathbf{P})$ .

**Dowód.** Jeśli  $\text{rank}(\mathbf{A}) = k$ , to  $k$  jej wartości własnych równych jest jeden, a pozostałych  $n - k$  zeru jest 0. Z (A1.2.3) wynika, że  $\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum \lambda = k$ .  $\square$

3. Jeśli  $\mathbf{P}$  jest macierzą idempotentną, to  $\mathbf{I}_n - \mathbf{P}$  jest również macierzą idempotentną.

**Dowód.**  $(\mathbf{I}_n - \mathbf{P})^2 = \mathbf{I}_n - 2\mathbf{P} + \mathbf{P}^2 = \mathbf{I}_n - 2\mathbf{P} + \mathbf{P} = \mathbf{I}_n - \mathbf{P}$ .  $\square$

### A.1.5. Macierze blokowe

Jeśli macierze  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{C}$  są symetryczne, to

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^T & \mathbf{C} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{E}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{E}^T & -\mathbf{E}\mathbf{D}^{-1} \\ -\mathbf{D}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{E}^T & \mathbf{D}^{-1} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

gdzie  $\mathbf{D} = \mathbf{C}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$  i  $\mathbf{E} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$ .

Wzór ten można sprawdzić bezpośrednio, sprawdzając, że po pomnożeniu wyjściowej macierzy przez odwrotną otrzymuje się macierz jednostkową.

### A.1.6. Faktoryzacja macierzy

Rozwiązanie układu równań liniowych  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$  zapisywane jest symbolicznie wzorem  $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ . Jednak, jak piszą Dennis i Schnabel [20], czytelnik mało obeznany z numerycznymi algorytmami rozwiązywania równań liniowych może odnieść z tego zapisu wrażenie, że w rzeczywistych algorytmach (stosowanych w pakietach komputerowych) oblicza się macierz odwrotną  $\mathbf{A}^{-1}$  i następnie mnoży się ją przez  $\mathbf{b}$ . Tymczasem efektywne algorytmy rozwiązywania układów równań liniowych wykorzystują techniki faktoryzacji macierzy, które polegają na rozłożeniu macierzy  $\mathbf{A}$  na iloczyn

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \cdot \dots \cdot \mathbf{A}_k,$$

gdzie każda z macierzy  $\mathbf{A}_i$  ma postać łatwą do rozwiązania układu równań (obliczenia odwrotnej). Zwykle liczba elementów w rozkładzie wynosi  $k = 2$  lub  $3$ . Dla dowolnej macierzy kwadratowej dwoma ważnymi faktoryzacjami są  $\mathbf{PLU}$  oraz  $\mathbf{QR}$ , gdzie  $\mathbf{P}$  jest macierzą permutacji,  $\mathbf{L}$  macierzą dolną trójkątną,  $\mathbf{R}$  i  $\mathbf{U}$  macierzami górnymi trójkątnymi,  $\mathbf{Q}$  macierzą ortogonalną.

Dla macierzy  $\mathbf{A}$  symetrycznej i dodatnio określonej (z taką mamy do czynienia w metodzie najmniejszych kwadratów, gdzie  $\mathbf{A} = \mathbf{X}^T \mathbf{X}$ ) efektywnym algorytmem jest faktoryzacja Cholesky'ego  $\mathbf{A} = \mathbf{LL}^T$  lub  $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \mathbf{U}$ , gdzie  $\mathbf{U}$  jest macierzą górną, a  $\mathbf{L}$  dolną trójkątną. W metodzie najmniejszych kwadratów ważną rolę odgrywają również: „rozkład macierzy względem wartości osobliwych (ang. *singular value decomposition* (SVD)) oraz „operator wymiatania” (ang. *sweep operator*). Przedstawimy najważniejsze z tych metod.

### A.1.7. Operator wymiatania

Operator wymiatania (*sweep operator*) jest użyteczną modyfikacją metody eliminacji Gaussa, pozwalającą na efektywne odwracanie macierzy i rozwiązywanie układów równań liniowych. Przedstawimy podstawy operatora *sweep* opracowane na bazie artykułu Goodnighta [39].

Macierz  $\mathbf{A}$  jest transformowana do macierzy  $\mathbf{B}$  względem  $k$ -tego elementu diagonalnego

$$\mathbf{B} = \mathit{Sweep}(k)\mathbf{A}, \tag{A.4}$$

gdy elementy  $b_{ij}$  macierzy  $\mathbf{B}$  zdefiniowane są wzorami

$$\begin{aligned} b_{kk} &= \frac{1}{a_{kk}}, \\ b_{ik} &= -\frac{a_{ik}}{a_{kk}}, & i \neq k, \\ b_{kj} &= \frac{a_{kj}}{a_{kk}}, & j \neq k, \\ b_{ij} &= a_{ij} - \frac{a_{ik}a_{kj}}{a_{kk}}, & i \neq k, j \neq k. \end{aligned}$$

Można wykazać (por. [39]), że w wyniku przeprowadzenia operacji *sweep* na wszystkich diagonalnych elementach otrzymuje się macierz  $\mathbf{A}^{-1}$ . Ponadto operacja *sweep* jest przemienna

$$\text{Sweep}(k)\text{Sweep}(r)\mathbf{A} = \text{Sweep}(r)\text{Sweep}(k)\mathbf{A}.$$

Powtórzenie operacji względem tego samego elementu, na przykład  $k$ , kasuje poprzednią, tj.

$$\text{Sweep}(k)\text{Sweep}(k)\mathbf{A} = \mathbf{A}.$$

### A.1.8. Dekompozycja Cholesky'ego

Można wykazać (por. [100]), że jeśli  $\mathbf{A}$  jest macierzą symetryczną i dodatnio określoną o wymiarze  $p \times p$ , to istnieje jednoznacznie określona macierz trójkątna górna  $\mathbf{U}$ ,  $p \times p$ , dla której  $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \mathbf{U}$ . Elementy  $u_{ij}$  macierzy  $\mathbf{U}$  można obliczyć w kolejnych krokach ze wzorów

#### Krok 1.

$$u_{11} = \sqrt{a_{11}}, \tag{A.5}$$

$$u_{1j} = \frac{a_{1j}}{u_{11}}, \quad j = 2, 3, \dots, p. \tag{A.6}$$

#### Krok 2. Dla $i = 2, 3, \dots, p - 1$

$$u_{ij} = 0, \quad j < i, \tag{A.7}$$

$$u_{ii} = \left( a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki}^2 \right)^{1/2}, \tag{A.8}$$

$$u_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki}u_{kj}}{u_{ii}}, \quad j = i + 1, \dots, p. \tag{A.9}$$

**Krok 3.**

$$u_{pp} = \left( a_{pp} - \sum_{k=1}^{p-1} u_{ki}^2 \right)^{1/2}. \quad (\text{A.10})$$

Istotne jest obliczanie elementów  $u_{ij}$  w odpowiedniej kolejności, gdyż przy obliczaniu kolejnych elementów wykorzystywane są wartości poprzednio wyznaczone. Z założenia o dodatniej określoności macierzy  $\mathbf{A}$  wynika, że wyrażenia pod pierwiastkiem są nieujemne.

Macierz  $\mathbf{T}$  odwrotna do górnej trójkątnej  $\mathbf{U}$  jest również macierzą górną trójkątną, a elementy jej można łatwo wyznaczyć, więc odwrotną do  $\mathbf{A}$  oblicza się ze wzoru

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{U}^{-1}(\mathbf{U}^T)^{-1} = \mathbf{T}\mathbf{T}^T, \quad (\text{A.11})$$

gdzie

$$t_{ii} = \frac{1}{u_{ii}}, \quad i = 1, \dots, p, \quad (\text{A.12})$$

$$t_{ij} = \frac{\sum_{k=i+1}^j u_{ik} t_{kj}}{u_{ii}}, \quad j = i + 1, \dots, p. \quad (\text{A.13})$$

Stąd  $rs$ -ty element macierzy  $\mathbf{B}^{-1}$  jest równy

$$(\mathbf{B}^{-1})_{rs} = \sum_{k=s}^p t_{rk} t_{sk}, \quad s = r, r + 1, \dots, p. \quad (\text{A.14})$$

**A.1.9. Rozkład względem wartości osobliwych**

Obliczanie iloczynu  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  i następnie  $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$  powoduje utratę dokładności estymatorów, szczególnie w przypadku, gdy macierz ta jest źle uwarunkowana. Można uniknąć tych problemów, stosując *rozkład macierzy  $\mathbf{X}$  względem wartości osobliwych* SVD (skrót angielskiego określenia *singular value decomposition*). Podamy podstawy tego rozkładu, polecając czytelnikowi zainteresowanemu bardziej szczegółowo tym zagadnieniem monografię Kennedy'ego i Gentle'a [62], prace Golub'ea [36], Björka [8] oraz Watkina [112].

Dowolna macierz  $\mathbf{X}$ , o wymiarze  $n \times p$ , rzędu  $k \leq p$  ( $p \leq n$ ) może być przedstawiona w postaci

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T, \quad (\text{A.15})$$

gdzie  $\mathbf{U}$  jest macierzą ortogonalną o wymiarze  $n \times n$ ,  $\mathbf{V}$  jest macierzą ortogonalną o wymiarze  $p \times p$ , natomiast  $\mathbf{D}$  jest macierzą o wymiarze  $n \times p$  (takim jak macierz  $\mathbf{X}$ ), której elementy przyjmują wartości  $d_{ii} = \sigma_i > 0$  dla  $i = 1, \dots, k$ ,  $d_{ii} = \sigma_i = 0$  dla  $i = k + 1, \dots, p$  oraz  $d_{ij} = 0$  dla  $i \neq j$ . Wielkości  $\sigma_i$  są uporządkowane  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_k > \sigma_{k+1} = \dots = \sigma_p = 0$  i nazywane *wartościami osobliwymi*, natomiast (A.15) nazywany jest *rozkładem względem wartości osobliwych* macierzy  $\mathbf{X}$ , zapisywany w skrócie SVD (od ang. *singular value decomposition*).

Można wykazać, [20], że rozkład SVD istnieje, diagonalne elementy  $\sigma_i$  macierzy  $\mathbf{D}$  są pierwiastkami wartości własnych macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ , kolumny macierzy  $\mathbf{U}$  są wektorami własnymi macierzy  $\mathbf{X} \mathbf{X}^T$ , a kolumny macierzy  $\mathbf{V}$  wektorami własnymi macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ . Istnienie tych pierwiastków wynika z półdodatniej określoności macierzy  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ .

Rozkład SVD upraszcza obliczenia, gdyż

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{V} \mathbf{D}^2 \mathbf{V}^T \quad \text{oraz} \quad (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \mathbf{V}^T (\mathbf{D}^2)^{-1} \mathbf{V},$$

więc obliczenie macierzy odwrotnej sprowadza się do wyznaczenia kwadratów liczb i ich odwrotności, gdyż odwracanie macierzy ortogonalnej jest szczególnie proste – polega na wykonaniu transpozycji.

Biorąc pod uwagę czysto algebraiczny sens rozkładu SVD dowolne zerowe wiersze i kolumny macierzy  $\mathbf{D}$  są nadmiarowe. Można je wyeliminować, jeśli w rozkładzie (A.15) podzieli się odpowiednio składowe macierze, tworząc macierz  $\mathbf{U}_k$  z pierwszych  $k$  kolumn macierzy  $\mathbf{U}$ , macierz  $\mathbf{V}_k$  z pierwszych  $k$  kolumn macierzy  $\mathbf{V}$  oraz macierz kwadratową  $\mathbf{D}_k$ , o wymiarze  $k \times k$ , utworzoną z pierwszych  $k$  kolumn i  $k$  wierszy macierzy  $\mathbf{D}$ . Stosując te oznaczenia do (A.15) otrzymuje się

$$\mathbf{X} = [\mathbf{U}_k \mathbf{U}_{p-k}] \begin{bmatrix} \mathbf{D}_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{V}_k^T \\ \mathbf{V}_{p-k}^T \end{bmatrix}$$

a stąd wynika alternatywna postać rozkładu SVD

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}_k \mathbf{D}_k \mathbf{V}_k^T. \quad (\text{A.16})$$

## A.2. Optymalizacja

### A.2.1. Reguły obliczania pochodnych wektorowych

Niech  $f(\mathbf{x})$  oznacza funkcję skalarną zmiennej wektorowej  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_k]^T$ ,  $f: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ . Pochodną wektorową (gradientem) lub operatorem nabra funkcji  $f(\mathbf{x})$  względem  $\mathbf{x}$  nazywa się

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_p} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

natomiast wektor wierszowy oznacza się

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^T} = \left[ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_p} \right] = (\nabla f(\mathbf{x}))^T. \quad (\text{A.18})$$

Symetryczną macierz

$$\mathbf{H}_f = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix} \quad (\text{A.19})$$

o wymiarze  $n \times n$  drugich pochodnych funkcji  $f(\mathbf{x})$  nazywa się *Hessianem*. Indeks  $f$  w  $\mathbf{H}_f$  określa funkcję, której dotyczy Hessian. Jeśli z tekstu jednoznacznie wynika, jakiej funkcji dotyczy Hessian, to pomijany jest indeks i piszemy krótko  $\mathbf{H}$ . Wykorzystując operator nabra, można Hessian zapisać

$$\mathbf{H} = \frac{\partial \nabla f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^T} \quad (\text{A.20})$$

$$= \nabla^2 f(\mathbf{x}). \quad (\text{A.21})$$

Jeśli  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{b}^T \mathbf{x}$ , gdzie  $\mathbf{b} = [b_1, \dots, b_k]^T$  jest wektorem liczbowym, to

$$\frac{\partial(\mathbf{b}^T \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial(\mathbf{x}^T \mathbf{b})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b}. \quad (\text{A.22})$$

Wzór A.22 łatwo sprawdzić bezpośrednio, zauważmy, że  $\mathbf{b}^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{b}$ .

Jeśli  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x}$  jest formą kwadratową określoną przez symetryczną macierz  $\mathbf{C} = [c_{ij}]$  o wymiarze  $n \times n$ , to

$$\frac{\partial(\mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = 2 \mathbf{C} \mathbf{x}. \quad (\text{A.23})$$

**Dowód.** Pochodna względem  $j$ -tej zmiennej wynosi

$$\begin{aligned} \frac{d(\mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x})}{dx_j} &= \frac{d}{dx_j} \left( \sum_i \sum_j c_{ij} x_i x_j \right) \\ &= 2c_{ji} x_i + 2 \sum_{j \neq i} c_{ij} x_j \\ &= 2 \sum_j c_{ij} x_j \\ &= 2(\mathbf{C} \mathbf{x})_j, \end{aligned}$$

gdzie symbol  $(\mathbf{C} \mathbf{x})_j$  oznacza  $j$ -ty element wektora  $\mathbf{C} \mathbf{x}$ . Uwzględniając pochodne dla  $j = 1, \dots, n$ , otrzymuje się wzór końcowy  $2 \mathbf{C} \mathbf{x}$ .  $\square$

Jeśli

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}_0 + \mathbf{c}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x}$$

jest funkcją kwadratową, gdzie  $\mathbf{c}_0 = [c_{01}, \dots, c_{0n}]^T$ ,  $\mathbf{c} = [c_1, \dots, c_n]$  oraz  $\mathbf{C} = [c_{ij}]$  jest macierzą symetryczną o wymiarze  $n \times n$ , to

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{c} + 2 \mathbf{C} \mathbf{x}, \quad (\text{A.24})$$

$$\mathbf{H} = 2 \mathbf{C}. \quad (\text{A.25})$$

### A.2.2. Wyznaczanie minimum warunkowego metodą mnożników Lagrange'a

Należy wyznaczyć minimum funkcji  $n$  zmiennych

$$\Phi(y_1, \dots, y_n),$$

które spełnia  $m$  równań więzów,  $m < n$

$$F_j(y_1, \dots, y_n) = 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (\text{A.26})$$

Założmy, że funkcje  $\Phi(y_1, \dots, y_n)$  oraz  $F_j(y_1, \dots, y_n)$ ,  $j = 1, \dots, m$ , są dwukrotnie różniczkowalne. Wprowadzimy pomocniczą funkcję  $\Psi$ , nazywaną *funkcją Lagrange'a*

$$\Psi(y_1, \dots, y_n) = \Phi(y_1, \dots, y_n) - \sum_{j=1}^m \lambda_j F_j(y_1, \dots, y_n), \quad (\text{A.27})$$

gdzie współczynniki  $\lambda_j$  nazywane są *mnożnikami Lagrange'a*. Oblicza się  $n$  pochodnych funkcji  $\Psi(y_1, \dots, y_n)$  względem  $y_i$  i otrzymuje  $n$  równań

$$\frac{\partial \Psi(y_1, \dots, y_n)}{\partial y_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{A.28})$$

Jeśli dołączymy do tych równań  $m$  równań więzów, to otrzymuje się łącznie  $n+m$  równań (A.26) oraz (A.28) i tyle samo niewiadomych  $y_1, \dots, y_n, \lambda_1, \dots, \lambda_m$ . Rozwiązanie tego układu równań wyznacza minimum warunkowe funkcji  $\Phi$ .



## Dodatek B

# Wybrane elementy rachunku prawdopodobieństwa

### B.1. Operator wartości oczekiwanej i operator kowariancji

Niech  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$  będzie  $n$ -wymiarowym wektorem losowym. Wartością oczekiwaną wektora losowego  $\mathbf{x}$  nazywa się wektor

$$\mathcal{E}[\mathbf{x}] = [E[x_1], E[x_2], \dots, E[x_n]]^T.$$

1. Jeśli  $\mathbf{x}$  jest wektorem losowym,  $n$ -wymiarowym, a  $\mathbf{A}$  jest macierzą rzeczywistą  $n \times n$  wymiarową, to

$$\mathcal{E}[\mathbf{Ax}] = \mathbf{A}\mathcal{E}[\mathbf{x}]. \quad (\text{B.1})$$

2. Jeśli  $\mathbf{x}$  oraz  $\mathbf{y}$  są wektorami losowymi,  $n$ -wymiarowymi, a  $\mathbf{A}$  oraz  $\mathbf{B}$  są macierzami rzeczywistymi  $n \times n$  wymiarowymi, to

$$\mathcal{E}[\mathbf{Ax} + \mathbf{By}] = \mathbf{A}\mathcal{E}[\mathbf{x}] + \mathbf{B}\mathcal{E}[\mathbf{y}], \quad (\text{B.2})$$

$$\mathcal{E}[a\mathbf{x} + b\mathbf{y}] = a\mathcal{E}[\mathbf{x}] + b\mathcal{E}[\mathbf{y}]. \quad (\text{B.3})$$

Jeśli  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$  jest wektorem losowym, to *macierz kowariancji*  $\mathcal{D}[\mathbf{x}]$  określona jest wzorem

$$\mathcal{D}[\mathbf{x}] = \begin{bmatrix} \text{cov}[x_1, x_1] & \text{cov}[x_1, x_2] & \dots & \text{cov}[x_1, x_n] \\ \text{cov}[x_2, x_1] & \text{cov}[x_2, x_2] & \dots & \text{cov}[x_2, x_n] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}[x_n, x_1] & \text{cov}[x_n, x_2] & \dots & \text{cov}[x_n, x_n] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \dots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \dots & \sigma_{nn} \end{bmatrix},$$

gdzie  $\sigma_{ij} = \text{cov}[x_i, x_j]$ . Zauważmy, że  $\text{cov}[x_i, x_i] = \sigma_{ii} = D^2[x_i] = \sigma_i^2$ .

Na podstawie zdefiniowanej wartości oczekiwanej wektora losowego  $\mathbf{x}$  można zapisać macierz kowariancji następująco

$$\mathcal{D}[\mathbf{x}] = \mathcal{E}[(\mathbf{x} - \mathcal{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - \mathcal{E}[\mathbf{x}])^T]. \quad (\text{B.4})$$

3. Jeśli  $y = \mathbf{Ax}$ , gdzie  $\mathbf{A}$  jest macierzą  $m \times n$ , to

$$\mathcal{D}[\mathbf{Ax}] = \mathbf{A}\mathcal{D}[\mathbf{x}]\mathbf{A}^T. \quad (\text{B.5})$$

Wzór ten dla  $m = 1$  nazywany jest *prawem propagacji kowariancji* lub *prawem propagacji błędów pomiarów*. Ma on duże zastosowanie, zwłaszcza w ocenie *niepewności pomiarów* w pomiarach pośrednich.

**Dowód.** Oznaczając  $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$ , otrzymamy  $\mathcal{D}[\mathbf{y}] = \mathcal{E}[(\mathbf{y} - \mathcal{E}[\mathbf{y}])(\mathbf{y} - \mathcal{E}[\mathbf{y}])^T] = \mathcal{E}[(\mathbf{Ax} - \mathcal{E}[\mathbf{Ax}])(\mathbf{Ax} - \mathcal{E}[\mathbf{Ax}])^T] = \mathbf{A}\mathcal{E}[(\mathbf{x} - \mathcal{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - \mathcal{E}[\mathbf{x}])^T]\mathbf{A}^T = \mathbf{A}\mathcal{D}[\mathbf{x}]\mathbf{A}^T$ .  $\square$   
Dla funkcji jednej zmiennej  $D^2[ax + b] = a^2D^2[x]$ .

## B.2. Średnie i wariancje form kwadratowych

Funkcja

$$Q = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j$$

nazywana jest *formą kwadratową*, gdzie  $\mathbf{A}$  jest symetryczną macierzą kwadratową  $n \times n$ , a  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$  wektorem. Forma kwadratowa wektorów losowych ma następujące ważne własności

1. Jeśli  $\mathcal{E}[\mathbf{x}] = \boldsymbol{\mu} = [\mu_1, \dots, \mu_n]^T$ ,  $\mathcal{D}[\mathbf{x}] = \boldsymbol{\Sigma} = [\sigma_{ij}]$ , to

$$E[\mathbf{x}^T \mathbf{Ax}] = \text{tr}(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}. \quad (\text{B.6})$$

**Dowód.** Zauważmy, że  $(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{A}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} - \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{x}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}$ , więc  $E[\mathbf{x}^T \mathbf{Ax}] = E[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{A}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})] + E[\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{Ax}] + E[\mathbf{x}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}] - E[\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}] = E[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{A}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})] + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} E[(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)] + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} \sigma_{ij} + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} = \text{tr}(\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}$ .  $\square$

2. Jeśli zmienne losowe  $x_i$  nie są skorelowane,  $\boldsymbol{\Sigma} = \sigma^2 \mathbf{I}_n$ , to wartość oczekiwaną formy kwadratowej  $Q$  można wyznaczyć, stosując regułę:

$$E[\mathbf{x}^T \mathbf{Ax}] = \sigma^2 (\text{suma współczynników dla } x_i^2) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}. \quad (\text{B.7})$$

Dowód wynika bezpośrednio z B.6.

3. Jeśli zmienne losowe  $x_i$  nie są skorelowane oraz  $E[x_i] = \mu_i = 0$  i  $D^2[x_i] = \sigma^2$ , to wartość oczekiwana formy kwadratowej  $Q = (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + \dots + (x_{n-1} - x_n)^2$  wynosi

$$E\left[\sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2\right] = 2(n-1)\sigma^2.$$

**Dowód.**  $Q = 2\sum_{i=1}^n x_i^2 - x_1^2 - x_n^2 - 2\sum_{i=1}^{n-1} x_i x_{i+1}$ . Elementy leżące na przekątnej macierzy  $A$  wynoszą  $a_1 = a_n = 1$  oraz  $a_2 = a_3 = \dots, a_{n-1} = 2$ , więc  $\text{tr} A = 2(n-1)$ , a stąd  $E[Q] = 2(n-1)\sigma^2$ .  $\square$

4. Jeśli zmienne losowe  $x_i$  nie są skorelowane,  $E[x_i] = \mu_i = 0$  oraz  $D^2[x_i] = \sigma^2$ , to nieobciążonymi estymatorami wariancji  $\sigma^2$  są statystyki:

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2,$$

$$q^2 = \frac{1}{2(n-1)} \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2.$$

Pierwsza statystyka jest zwykle stosowana do oceny wariancji  $\sigma^2$  pojedynczej obserwacji. Wynika to stąd, że ma ona mniejszą wariancję niż statystyka  $q^2$ . Można wykazać, że  $D^2[s^2] = 2\sigma^4/(n-1)$  oraz że gdy  $n \rightarrow \infty$ , wówczas  $D^2[q^2] \rightarrow 3\sigma^4/(n-1)$ .  $\square$

### B.3. Wielowymiarowy rozkład normalny

Wielowymiarowy rozkład normalny przedstawimy, korzystając z analogii do jednowymiarowego rozkładu normalnego. W tym celu zmodyfikujemy gęstość jednowymiarowego rozkładu normalnego

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(x - \mu)^2\right],$$

wprowadzając nową zmienną  $v = \sigma^2$ , zamiast  $\sigma^2$  stąd

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v}} \exp\left[-\frac{1}{2}(x - \mu)v^{-1}(x - \mu)\right].$$

$n$ -wymiarowa gęstość określona jest wyrażeniem

$$f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{k} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right], \quad (\text{B.8})$$

gdzie  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ ,  $\boldsymbol{\mu} = [\mu_1, \dots, \mu_n]^T$ ,  $\boldsymbol{\Sigma}$  jest dodatnio określoną, symetryczną macierzą rzeczywistą o wymiarze  $n \times n$ , natomiast  $k$  jest stałą

$$k = (2\pi)^{\frac{1}{2}n} |\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}.$$

Mówimy, że wektor losowy  $\mathbf{x}$  ma  $n$ -wymiarowy rozkład normalny, jeśli jego gęstość określona jest wzorem (B.8). Można wykazać, że wektor wartości oczekiwanych wektora losowego  $\mathbf{x}$  równy jest  $\boldsymbol{\mu}$ , natomiast macierz kowariancji  $\boldsymbol{\Sigma}$ .

Jeśli wektor losowy  $\mathbf{x}$  ma  $n$ -wymiarowy rozkład normalny o wektorze wartości oczekiwanych  $\boldsymbol{\mu}$  oraz macierzy kowariancji  $\boldsymbol{\Sigma}$ , to fakt ten zapisujemy krótko  $\mathbf{x} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ . Jeśli  $n = 1$ , to opuszczamy indeks i piszemy  $x \sim N(\mu, \sigma^2)$ .

Rozpatrzmy dwuwymiarowy rozkład normalny, który odgrywa ważną rolę w analizie zmiennych losowych. Wtedy  $\mathbf{x} = [x_1, x_2]^T$ ,  $\boldsymbol{\mu} = [\mu_1, \mu_2]$ ,

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_2\sigma_1 & \sigma_2^2 \end{bmatrix},$$

gdzie  $\sigma_{11} = \sigma_1^2$ ,  $\sigma_{22} = \sigma_2^2$ ,  $\sigma_{12} = \sigma_{21} = \rho\sigma_1\sigma_2$ , natomiast  $\rho$  jest współczynnikiem korelacji zmiennych losowych  $x_1$  i  $x_2$ . Wyznacznik macierzy  $\boldsymbol{\Sigma}$  jest równy

$$|\boldsymbol{\Sigma}| = \sigma_1^2 \sigma_2^2 (1 - \rho^2),$$

a jej odwrotność

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \frac{1}{(1 - \rho^2)} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & -\frac{\rho}{\sigma_1\sigma_2} \\ -\frac{\rho}{\sigma_1\sigma_2} & \frac{1}{\sigma_2^2} \end{bmatrix}.$$

Po wstawieniu tych wzorów do wyrażenia (B.8) otrzymuje się gęstość dwuwymiarowej zmiennej losowej

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1 - \rho^2}} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2(1 - \rho^2)} \left[ \frac{(x_1 - \mu_1)^2}{\sigma_1^2} - 2\rho \frac{(x_1 - \mu_1)(x_2 - \mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(x_2 - \mu_2)^2}{\sigma_2^2} \right] \right\},$$

Ze wzoru tego wynika, że jeśli zmienne losowe  $x_1$  oraz  $x_2$  nie są skorelowane,  $\rho = 0$ , to  $f(x_1, x_2) = f_1(x_1)f_2(x_2)$ , więc są losowo niezależne.

## Bibliografia

- [1] Abraham B., Ledolter J. (1983), *Statistical methods for forecasting*, New York, Wiley.
- [2] Ajdukiewicz K. (1974), *Logika pragmatyczna*, Warszawa, PWN.
- [3] Andrews D.F., Bickel P.J., Hampel F.R., Huber P.J., Rogers W.H., Turkey J.W. (1972), *Robust estimates of location: survey and advances*, Princeton University Press, Princeton, N. J.
- [4] Andrews D.F. (1974), *A robust method for multiple linear regression*, *Technometrics* **16**, 523–531.
- [5] Atkins G.L. (1969), *Multicompartmental Models for Biological Systems*, London, Methuen.
- [6] Atkinson A.C. (1972), *Planning experiments to detect inadequate regression models*, *Biometrika*, **59**, 275–293.
- [7] Bates D.M., Watt D.G. (1988), *Nonlinear regression analysis and its applications*, New York, Wiley.
- [8] Björk A. (1996), *Numerical methods for least squares problems*, Philadelphia. SIAM.
- [9] Borowkow M. (1975), *Rachunek prawdopodobieństwa*, Warszawa, PWN.
- [10] Box G.E.P., Jenkins G.M. (1976), *Time Series Analysis: Forecasting and Control*, Holden-Day, San Francisco.
- [11] Box G.E.P., Draper N.R. (1969), *Evolutionary operation*, New York, Eilley.
- [12] Brandt S. (1998), *Analiza danych – metody statystyczne i obliczeniowe*, Warszawa, WNT.
- [13] Chen E.H., Dixon W.J. (1972), *Estimates of parameters of a censored regression sample*, *J. Am. Stat.*, **23**, 664–675.
- [14] Cook R.D. (1977), *Detection of influential observations in linear regression*, *Technometrics*, **19**, 15–18.
- [15] Cook R.D., Weisberg S. (1982), *Residuals and influence in regression*, New York, Chapman and Hall.
- [16] Cooper B.E. (1968), *The use of orthogonal polynomials: Algorithm AS 10*, *Appl. Stat.*, **17**, 283–287.
- [17] Cramér H. (1958), *Metody matematyczne w statystyce*, Warszawa, PWN.
- [18] Daniel C., Wood F.S. (1971), *Fitting equations to data*, New York, Wiley-Interscience.
- [19] De Boor (1978), *A practical guide to splines*, New York, Springer-Verlag.

- 
- [20] Dennis J.E., Schnabel R.B. (1983), *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- [21] Draper N., Smith H., (1998), *Applied regression analysis*, 3d ed. New York, Wiley.
- [22] Drobot S. (1954), *On the foundation of dimensional analysis*, *Studia Mathematica*, T. XIV, 1954.
- [23] Durbin J., Watson G.S. (1971), *Testing for serial correlation in least squares regression*, *Biometrika*, **58**, 1–19.
- [24] Esterby S.R., El-Shaarawi (1981), *Inference about the point of change in a regression model*, *Appl. Stat.*, **30**, 277–285.
- [25] Eubank R.L., (1988) *Spline smoothing and nonparametric regression*, New York, Marcel Dekker.
- [26] Eykhoff P. (1974), *System identification: parameter and state estimation*, New York, Wiley.
- [27] Fichtenolz G.M. (1964), *Rachunek różniczkowy i całkowy*, t. 1–3, Warszawa, PWN.
- [28] Fiedorow W.W. (1971), *Teorija optimalnego eksperymentu*, Moskwa, Nauka.
- [29] Fisz M. (1969), *Rachunek prawdopodobieństwa i statystyka matematyczna*, Warszawa, PWN.
- [30] Forsythe G.E. (1969), *Generation and use of orthogonal polynomials for data-fitting with a digital computer*, *J. Soc. Industr. Appl. Math.*, **5**, 74–87.
- [31] Gallant A.R. (1987), *Nonlinear statistical models*, New York, Wiley.
- [32] Gallant A.R., Goebel J.J. (1976), *Nonlinear regression with autocorrelated errors*, *J. Am. Stat. Assoc.*, **71**, 961–967 .
- [33] Gill P.E., Murray W. (1978), *Algorithms for solution of the nonlinear least squares problem*, *SIAM J. Numer. Anal.*, **15**, 977–992.
- [34] Gill P.E., Murray W., Wright M.H. (1981), *Practical Optimization*, New York, Academic Press.
- [35] Goldman A.J., Zelen M., (1964), *Weak generalized inverses and minimum variance linear unbiased estimation*, *J. of Research Nat. Bureau of Standards* **68B**, 151–172.
- [36] Golub G.H., Van Loan C.F. (1996), *Matrix computations*, 3rd ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press.
- [37] Gosset (Student) W. (1908), *The probable error of mean*, *Biom.*, t. 6.
- [38] Goldstein M., Smith A.F.M. (1974), *Ridge-type estimators for regression analysis*, *J. R. Stat. Soc., B.*, **36**, 284–291.
- [39] Goodnight (1979), *A tutorial on the SWEEP operator*, *American Statistician*, **33**, 149–158.
- [40] Grubbs F. (1950), *Sample criteria for testing outlying observations*, *Ann. Math. Statistics*, **21**, No. 1.
- [41] Grubbs F. (1969), *Procedures for Detecting Outlying Observations in Samples*, *Technometrics*, **11** (1): 1–21.
- [42] *Guide to the expression of uncertainty in measurement*, ISO/TAG 4/WG 3: June 1992. Aktualna wersja dostępna na str.: <http://www.bipm.org>
- [43] Hald A. (1952), *Statistical theory with engineering applications*, New York-London.

- 
- [44] Hamilton J.D. (1994), *Time Series Analysis*, Princeton University Press.
- [45] Hartley H.O. (1938), *Studentization and large sample theory*, Supplement to Journal of the Royal Statistical Society, **5**, 80–88.
- [46] Hartley H.O. (1971), *The modified Gauss-Newton method for fitting of nonlinear regression functions by least squares*, Technometrics, **3**, 269–280.
- [47] Hayes J.G. (1970), *Numerical approximation to functions and data*, London, Athlone Press.
- [48] Hayes J.G. (1974), *Numerical methods for curve and surface fitting*, J. Inst. Math. Appl., **10**, 144–152.
- [49] Hill W.J., Hunter W.G. (1966), *A review of response surface methodology*, Technometrics, **8**, 571–590.
- [50] Hocking R.R. (2003), *Methods and applications of linear models*, New York, Wiley.
- [51] Hoerl A.E., Kennard R.W. (1970), *Ridge regression. Based estimation and applications to non orthogonal problems*, Technometrics, **12**, 55–82.
- [52] Hodges S.D., Moore P.D. (1972), *Data uncertainties and least squares regression*, Appl. Stat., **21**, 185–195.
- [53] Hoel P.G. (1968), *On testing for the degree of polynomial*, Technometrics, **10**, 757–767.
- [54] Hogg R.V. [1974], *Adaptive robust procedures: a partial review and some suggestions for future applications and theory*, J. Am. Stat. Assoc., **69**, 909–925.
- [55] Hotteling H. (1957), *The relations of the newer multivariate statistical methods to factor analysis*, Brit. J. Stat. Psychol., **10**, 69–79.
- [56] Householder A.S. (1958), *A class of methods for inverting matrices*, J. Soc. Ind. Appl. Math., **6**, 189–195.
- [57] Huber P.J. (1973), *Robust regression: asymptotic conjectures and Monte Carlo*, Ann. Math. Stat., **1**, 799–821.
- [58] Huber P.J. (1981), *Robust statistics*, New York, Wiley.
- [59] Jacquez J.A. (1972), *Compartmental Analysis in Biology and Medicine*, New York, Elsevier.
- [60] John P.W.M. (1971), *Statistical design and analysis of experiments*, New York, Macmillan.
- [61] Kasprzak W., Lysik B. (1978), *Analiza wymiarowa w projektowaniu eksperymentu*, Wrocław, PAN, Wyd. Ossolineum.
- [62] Kennedy W.J., Gentle J.E. (1980), *Statistical computing*, New York, Marcell Dekker.
- [63] Kiefer J. (1959), *Optimum experimental design*, J. R. Stat. Soc. B, **21**, 273–319.
- [64] Kruskal W. (1968), *When are Gauss-Markov and least squares estimators identical? A coordinate free approach*, Ann. Math. Stat., 70–75.
- [65] Kryszwicki W., Bartos J., Dyczka W., Królikowska K., Wasilewski M. (1999), *Rachunek prawdopodobieństwa i statystyka matematyczna w zadaniach, cz. I, Rachunek prawdopodobieństwa*, Warszawa, PWN.

- 
- [66] Krysicki W., Bartos J., Dyczka W., Królikowska K., Wasilewski M. (1999), *Rachunek prawdopodobieństwa i statystyka matematyczna w zadaniach, cz. II, Statystyka matematyczna*, Warszawa, PWN.
- [67] Levenberg K. (1944), *A method for the solution of certain problems in least squares*, Quart. Appl. Math., 2, 164–168.
- [68] Lilliefors H.W. (1967), *On the Kolmogorow-Smirnov test for normality with mean and variance unknown*, JASA 399.
- [69] Lindley D.V., Smith A.F.M. (1972), *Bayes estimates for the linear model*, J. R. Stat. Soc., **34**, 1–18.
- [70] Linnik J.W. (1962), *Metoda najmniejszych kwadratów i teoria opracowywania obserwacji*, Warszawa, PWN.
- [71] Loweree J.M. (1974), *On the mean square error of parameter estimates for some biased estimators*, Technometrics, **16**, 461–464.
- [72] Malcev A.I. (1970), *Algebraiczeskije sistemy*, Moskwa, Izdatielstwo NAUKA.
- [73] Marquardt D. (1963), *An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters*, SIAM J. Apply. Math., **11**, 431–441.
- [74] McElroy F.W. (1967), *A necessary and sufficient condition that ordinary least-squares estimators be the best linear unbiased*, J. Am. Stat. Assoc., **62**, 1302–1304.
- [75] Miller R.G. (1962), *Simultaneous statistical inference*, New York, Mc-Graw-Hill.
- [76] Moré J.J. (1977), *The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory*, In G.A. Watson (Ed) *Numerical Analysis, Lecture Notes in Mathematics* 630, 105–116, Berlin, Springer-Verlag.
- [77] Morice E. (1972), *Test de normalité d'une distribution observée*, Rev. de Stat Appliquée 20 (2).
- [78] Muciek A.K. (1978), *Algebraic model of dimensional analysis*, Bull. Acad. Po. Ac. Ser. Tech., Vol. **26**, No 12.
- [79] Muciek A.K. (2003), *Mathematical models of measurement uncertainty propagation in indirect measurements*, Metrol. Meas. Syst. Vol. 10, No 2, 123–135.
- [80] Muciek A.K. (2007), *Wyznaczanie modeli wielomianowych z danych eksperymentalnych*, PAK, nr 7, 198–201.
- [81] Narula S.G. (1974), *Predictive mean square error and stochastic regressor variables*, Appl. Stat., **21**, 11–16.
- [82] Nazareth L. (1980), *A conjugate-direction algorithm without line searches*, J. Optim. Theory Apply., 23, 373–388.
- [83] Nelder (1965) J.A., Mead R., *Computer Journal* **7**, 308.
- [84] Nelson W., Hahn G.J. (1972), *Linear estimation of a regression relationship from censored data – PART I* Technometrics, **14**, 247–269 and *PART II* Technometrics, **15**, 133–150.
- [85] Oppenheim A.V., Schafer R.W. (1989), *Discrete-Time Signal Processing*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- [86] Pawłowski P. (1980), *Statystyka matematyczna*, Warszawa, PWN.



- 
- [87] Pearson K. (1900), *On a criterion that a system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can be reasonable supposed to have arisen in random sampling*, Philosophical Magazine, t. 50.
- [88] Poirier D.J. (1973), *Piecewise regression using cubic splines*, J. Am. Stat. Assoc, **68**, 515–524.
- [89] Rao C.R. (1982), *Modele liniowe statystyki matematycznej*, Warszawa, PWN.
- [90] Rasiowa H. (2005), *Wstęp do matematyki współczesnej*, Warszawa, PWN.
- [91] Richardas F.J. (1969), *The quantitative analysis of growth, in Plant physiology, analysis of growth*, Academic Press, New York, 3–76.
- [92] Rousseeuw P.J., Leroy A.M. (1987), *Robust regression and outlier detection*, New York, Wiley.
- [93] Rousseeuw P.J. (1984), *Least median of squares*, J. Am. Stat. Assoc., **79**, 871–880.
- [94] Scales L.E. (1985), *Introduction to nonlinear optimization*, London, Macmillan.
- [95] Schoenberg I.J. (1946), *Contributions to the problem of approximation of equidistant data to analytic functions*, Quart. Appl. Math, **4**, 45–99, Part A oraz 112–141 Part B.
- [96] Schumaker L.L. (1981), *Spline functions: basic theory*, New York, Wiley.
- [97] Searle S.R. (1971), *Linear models*, New York, Wiley.
- [98] Seber G.A.F. (1977), *Linear Regression Analysis*, New York, Wiley.
- [99] Seber G.A.F., Wild C.J. (2003), *Nonlinear regression*, New York, Wiley.
- [100] Seber G.A.F., Lee A.F. (2003), *Linear Regression Analysis*, New York, Wiley.
- [101] Shapiro S.S., Wilk M.B. (1965), *An analysis of variance test for normality*, Biometrika 52, 591–611.
- [102] Shapiro S.S., Wilk M.B., Chen H. (1968), *A comparative study of various tests of normality*, JASA 63, 1343–1372.
- [103] Siegel A.F. (1982), *Robust regression using repeated median*, Biometrika, **69**, 242–244.
- [104] Sprent P. (1969), *Models in regression and related topics*, London, Methuen.
- [105] Taylor J.R. (1995), *Wstęp do analizy błęd pomiarowego*, Warszawa, PWN.
- [106] Todd J. (1961), *Computational problems concerning the Hilbert matrix*, J. Res. Nat. Bur. Dt., **65**, 19–22.
- [107] Velleman P.F., Welsch R.E. (1981), *Efficient computing regression diagnostics*, American Statistician, **35**, 234–242.
- [108] Wagner J.G. (1975), *Fundamentals of Clinical Pharmacokinetics*, Drug Intelligence Publications, Hamilton, Illinois.
- [109] Wald A. (1940), *The fitting straight of lines if both variables are subject to errors*, Ann. Math. Statistics **11**(3), 284–400.
- [110] Warren W.G. (1971), *Correlation or regression: bias or precision*, Appl. Stats., **20**, 148–164.
- [111] Waterman M.S. (1974), *A restricted least squares problem*, Technometrics, **16**, 136–136.
- [112] Watkins D.S. (1991), *Fundamentals of matrix computations*, New York, Wiley.
- [113] Watson G.J. (1967), *Linear least square regression*, Ann. Math. Stat., **38**, 1679–1699.

- [114] Weisberg S. [1985], *Applied linear regression*, New York, Wiley.
- [115] White H. (1982), *Maximum likelihood estimation of misspecified models*, *Econometrics*, 50, 143–161.
- [116] Wold H. (1952), *Demand analysis*, New York-Stockholm.
- [117] Wold H. (1954), *A study in the analysis of stationary time series*, Almqvist and Wicksell, Uppsala.
- [118] Wold S. (1974), *Spline functions in data analysis*, *Technometrics*, **16**, 1–11.
- [119] Yule G.U. (1927), *On a method of investigating periodicities in disturbed series, with special reference to Wolfer's sunspot numbers*, *Philos. Trans. Royal Soc. London*, Vol. A226, 267–298.
- [120] Zieliński R. (1972), *Tablice statystyczne*, Warszawa, PWN.
- [121] Zieliński R. (1990), *Siedem wykładów wprowadzających do statystyki matematycznej*, Warszawa, PWN.

# Skorowidz

- analiza różnic, 236
- błąd
  - drugiego rodzaju, 47
  - gruby, 83
  - obserwacji, 26
  - pierwszego rodzaju, 47
  - pomiaru, 20
    - bezwzględny, 27
    - graniczny, 27
    - rzeczywisty, 25
    - systematyczny, 39
- baza wymiarowa, 225
- brzytwa Ockhamy, 152
- częstość, 49
- czynnik losowy, 20
- długość klasy, 48
- długość wektora, 13
- decyl, 41
- decyle, 41
- dekompozycja
  - Cholesky'ego, 133, 259–260
  - SVD, 134
- dokładne śledzenie linii, 157
- dystrybuanta, 36
  - empiryczna, 47
- eksperyment
  - obserwacyjny, 96
  - optymalny, 120
  - planowany, 96
  - typu  $2^p$ , 215
- estymata, 70
- estymator, 70
  - BLUE, 117
  - krawędziowy, 132
  - najefektywniejszy, 73
  - najmniejszej mediany kwadratów, NMK, 252
  - nieobciążony, 70
  - obciążony, 71
  - odporny, 245
  - wariancji, 119
  - z powtarzalną medianą, 251
  - zgodny, 72
- forma
  - kwadratowa, 266
- fraktyl, 41
- funkcja
  - Cobba–Douglassa, 152
  - gęstości, 36
  - kryterialna, 155, 248
  - lagrange'a, 176
  - obcinająca, 208
  - przekształcająca, 29
    - ściśle malejąca, 56
    - ściśle monotoniczna, 56
    - ściśle rosnąca, 55
  - regresji I rodzaju, 91
  - sklejana, 207
  - wiarygodności, 74
  - wielofazowa, 207
  - wymiarowa, 225
  - wymiarowo jednorodna, 225
  - wymiarowo niezmiennicza, 225

- gęstość, 36  
generator liczb losowych, 63
- Hessian, 163, 262
- identyfikacja modelu, 16  
ilość informacji w sensie Fishera, 74  
informacja Fishera, 74  
interakcja  
    zmiennych, 214
- kierunek najszybszego  
    spadku, 215  
    wzrostu, 215
- klasa narzędzia pomiarowego, 29  
kombinacja liniowa wyrażenia, 210  
kowariancja, 14, 45  
krok interakcji, 157  
kryterium Abbego, 86, 87  
kurtoza, 41, 51  
kwantyle, 41  
kwartył, 41  
    dolny, 41  
    górnny, 41
- liczba  
    warunkowa, 200
- liczność  
    doświadczalna, 50  
    hipotetyczna, 50  
    klasy, 48
- linia regresji I rodzaju, 20, 91–93  
losowe przeszukiwanie, 155, 156
- M-estymatory, 247, 248
- macierz  
    diagonalna, 13  
    eksperymentu, 100  
    ortogonalna, 123  
    transformowana, 172  
    Hilberta, 200  
    idempotentna, 257  
    informacji Fishera, 75
- jednostkowa, 14  
    kapeluszkowa, 105, 229  
        centrowana, 229  
        własności, 229–232  
    kowariancji, 15, 46, 265  
    odwrotna, 13  
    ortogonalna, 257  
    pełnego rzędu, 137  
    planu, 100  
    regresji, 100  
    transformowana, 172  
    transponowana, 13  
    wag, 144  
    wariancyjno-kowariancyjna, 15, 46
- mediana, 41  
    próby, 42
- metoda  
    Gaussa–Newtona, 157  
    Levenberga–Marquardta, 166  
    mnożników Lagrange’a, 170, 176–177, 263  
    momentów, 77–78  
    najmniejszych kwadratów  
        ważona, 144  
        zwykła, 137  
    najmniejszych kwadratów, 81  
    największej wiarygodności, 78  
    Newtona, 161–164  
    różniczki zupełnej, 32  
    redukcji zmiennych, 170–175  
    selekcji w przód, 201  
    simpleksów, 167  
    spadku, 156  
    wstecznej eliminacji, 202
- metryka, 48
- moda, 41
- model, 16  
    o parametrach rozłożonych, 18  
    afiniczny, 215  
    autoregresji, AR, 222  
    Bioassay, 153  
    deterministyczny, 17

- dynamiczny, 17
- eksponencjalny, 219
- empiryczny, 21
- kompartmentowy, 223
- liniowy, 17
- logistyczny, 153
- matematyczny, 15, 16
- mechanistyczny, 21, 152
- monomolekularny, 220
- nieliniowy, 17
- o parametrach skupionych, 18
- potęgowy, 220
- regresji, 19, 20
  - liniowy, 20, 97
  - nieliniowej, 151
  - nieliniowy, 21, 151
  - opisowy, 19, 20
- statyczny, 18
- statystyczny, 18
- stochastyczny, 17
- średniej ruchomej, MA, 222
- wstecznego śledzenia, 159
- moment
  - centralny, 40
  - zwykły, 40
- nieobciążoność estymatora, 70
- niepewność
  - pomiaru, 40, 148
  - rozszerzona, 40, 68
- nierówność
  - Rao–Craméra, 74
  - Schwarza, 123
- norma wektora, 13
- obciążenie
  - systematyczne, 39
- obiekt, 15
- obserwacja, 18, 23, 36
- ocena, 70
- odchylenie standardowe, 39
- odległość
  - Cooka, 241
  - Mahalanobisa, 232
- odpowiedź obiektu, 16, 94
- odstające obserwacje, 83–86
- operacja łączenia, 24
- operator
  - nabla, 161
  - wymiatania, 133, 134, 258
- parametr
  - modelu, 94
  - strukturalny modelu, 94
  - wielomianu, 210
- plan
  - A- optymalny, 121
  - D- optymalny, 121
  - E- optymalny, 121
  - G- optymalny, 121
- planowanie eksperymentu, 120
- pochodna
  - wektorowa, 262
- pomiar
  - pośredni, 29
- poziom istotności testu, 47
- próba prosta, 42, 69
- próbkiowanie równomierne, 221
- prawo propagacji błędów pomiarów, 266
- prosta regresji II rodzaju, 20, 91, 93, 94
- prosta regresji ortogonalnej, 112
- przestrzeń
  - próby, 18
  - wymiarowa, 224
- przeszukiwanie
  - losowe, 155, 156
- pseudoodwrotność macierzy, 13
- punkt
  - stacjonarny, 213
  - załamania estymatora, 246
- regresja
  - grzbietowa, 131–133
  - liniowa, 99
    - prosta, 108
- regresor, 99

- regularyzacja  
     Tichonowa, 132  
 relacja liniowego porządku, 24  
 reszta, 106  
 rezidua, 106  
 rozkład  
      $\chi^2$ , 37  
      $t$  Studenta, 37, 64  
     dwuwymiarowy, 46  
     jednostajny, 36  
     normalny, 37  
         standaryzowany, 37  
         wielowymiarowy, 267–268  
     Snedecora, 38  
     względem wartości osobliwych, 135, 260  
 rozstęp próby, 48  
 równania  
     eksperymentu, 99  
     fundamentalne, 99  
     normalne, 103  
     węzłów, 170  
 różnica  
     studentyzowana  
         wewnętrzna, 240  
         zewnętrzna, 240  
 różnice  
     skalowane, 238  
     standaryzowane, 238  
     studentyzowane, 239  
 różnicowa suma kwadratów, 106  
 rząd macierzy, 13  
 simpleks, 167  
 składnik losowy, 94  
 skala  
     ilorazowa, 24  
     pomiarowa, 24  
 splajn, 207, 208  
     kubiczny, 208  
     z wolnymi węzłami, 208  
     ze stałymi węzłami, 208  
 splot funkcji, 60  
 statystyka, 18, 70  
     opisowa, 35  
 stopowanie algorytmu, 156  
 szereg  
     czasowy, 221  
     rozdzielczy, 49  
 szum biały, 221  
 ślad macierzy, 13  
 śledzenie  
     linii, 157  
 śledzenie linii  
     dokładne, 157  
 średnia  
     arytmetyczna, 42  
     geometryczna, 44  
     harmoniczna, 44  
     ważona, 145  
 test  
     Fishera, 183  
     Grubbsa, 84–86  
     Kolmogorowa–Lillieforsa, 53  
     normalności, 48, 51  
     Shapiro–Wilka, 54  
     zgodności, 47  
 transakcje liniowe wektorów losowych, 65  
 trend systematyczny, 86  
 twierdzenie  $\pi$ , 225  
 twierdzenie o reprezentacji funkcji wymiarowej, 225  
 uogólniona odwrotność macierzy, 13  
 uogólniony M-estymator, 250  
 węzeł  
     stały, 208  
     wolny, 208  
 waga obserwacji, 144  
 wariancja  
     próby, 71  
     zmiennej losowej, 39  
 wartość

- krytyczna testu, 51, 186
- mierzona, 23
- modalna, 41
- oczekiwana, 38
  - wektora losowego, 45
- osobliwa, 134, 260–261
- przeciętna, 38
- rzeczywista, 25
- własna macierzy, 255
- zaobserwowana, 18, 23
- zmierzona, 23, 25, 27
- wartość prawdziwa, 25
- wektor
  - losowy, 44
  - własny, 255
  - wartości oczekiwanych, 15
- wiarygodność, 78
- wielkość
  - pobudzająca, 16
  - regulowana, 95
  - wejściowa, 16
  - wyjściowa, 16
  - wymiarowa, 224
  - zaobserwowana, 36
- wielość
  - kontrolowana, 95
- wielomian
  - charakterystyczny macierzy, 255
  - kubiczny, 210
  - kwadratowy, 210
  - ortogonalny, 202
  - sklejany, 207
- współczynnik
  - asymetrii, 40
  - korelacji, 14, 45
  - spłaszczenia, 41
- wymiar, 224
  - wielkości, 224
- wymiarowa
  - niezależność, 225
- wynik
  - eksperymentu, 18
  - pomiaru, 18, 28
- wyrównane oceny, 105
- wyznacznik macierzy, 13
- wzorzec podstawowy wielkości, 25
- złącze, 207
- zgodność
  - estymatora, 72
- zmienna
  - absolutnie ciągła, 36
  - lingwistyczna, 96
  - losowa, 35
  - objaśniająca, 94
    - ilościowa, 96
    - jakościowa, 96
  - wskaźnikowa, 96