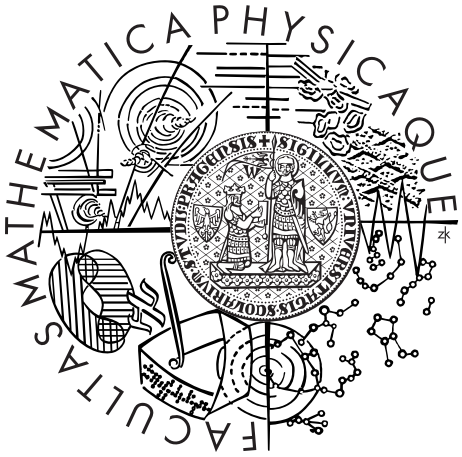
Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Dana Křepinská

Statistické úlohy pro Markovské procesy se spojitým časem

Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí diplomové práce:	RNDr. Michaela Prokešová, Ph.D.
Studijní program:	Matematika
Studijní obor:	Finanční a pojistná matematika

Praha 2014

Ráda bych na tomto místě poděkovala vedoucí diplomové práce RNDr. M. Prokešové, Ph.D., za odborné konzultace a užitečné rady pro psaní odborného textu. Zároveň děkuji doc. RNDr. Z. Práškové, CSc., že ochotně zastoupila místo konzultantky v době nepřítomnosti vedoucí diplomové práce.

Děkuji také svým rodičům za to, že mě podporovali po celou dobu studia na vysoké škole a připravili mi tak nejlepší možné podmínky pro vzdělávání.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne ..... Podpis autora

Název práce: Statistické úlohy pro Markovské procesy se spojitým časem

Autor: Dana Křepinská

Katedra: Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Michaela Prokešová, Ph.D., Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Abstrakt: Tato diplomová práce se zabývá odhadováním matice intenzit Markovova procesu se spojitým časem na základě diskrétně pozorovaných dat. Začátek práce je věnován jednoduššímu odhadu ze spojité trajektorie pomocí metody maximální věrohodnosti. Dále je zde popsán odhad z diskrétní trajektorie přes výpočet matice pravděpodobností přechodu. Následně je velmi podrobně rozebrán EM algoritmus, který předchozí odhad zpřesňuje. Na závěr teoretické části je uvedena metoda odhadu zvaná Monte Carlo Markov Chain. Všechny postupy jsou zároveň implementovány v počítačovém softwaru a prezentace jejich výsledků je obsahem druhé části práce. V té jsou porovnané odhady pro denní, týdenní a měsíční pozorování a také pro pětiletou a desetiletou pozorovanou trajektorii. K výsledkům jsou připojeny odhady rozptylů a intervaly spolehlivosti.

Klíčová slova: Matice intenzit, metoda maximální věrohodnosti, EM algoritmus, Monte Carlo Markov Chain

Title: Statistical interference for Markov processes with continuous time

Author: Dana Křepinská

Department: Department of Probability and Mathematical Statistics

Supervisor: RNDr. Michaela Prokešová, Ph.D., Department of Probability and Mathematical Statistics

Abstract: This thesis deals with the problem of estimating the transition rate matrix of a continuous-time Markov chain using discretely observed figures. First chapter contains a simply way to estimate the matrix from the continuous observation via maximum likelihood method. Next chapter describes estimating from the discrete data, where firstly we calculate the transition matrix. Full description of the EM algorithm follows in the next chapter. The last procedure of estimating the transition rate matrix described in this work is the Monte Carlo Markov Chain. All methods are implemented in the selected software and all results are commented in the second part of the thesis. Here we compare the precision of the estimators using daily, weekly and monthly observation for a 5 year period. The last comparison contains the result from the daily observation of a 5 year period and a 10 year period. Matrices are also provided with the estimated variances and confidence intervals.

Keywords: Transition rate matrix, maximum-likelihood estimation, EM algorithm, Monte Carlo Markov Chain

Obsah

Seznam symbolů a zkratek **3**

1 Úvod **5**
1.1 Základní věty a definice z teorie pravděpodobnosti a statistiky . . 6
1.2 Základní věty a definice z teorie náhodných procesů 8
1.2.1 Markovův řetězec s diskrétním časem 9
1.2.2 Markovův řetězec se spojitým časem 9

2 Odhad metodou maximální věrohodnosti **12**
2.1 Spojité pozorování 12
2.2 Diskrétní pozorování 13

3 EM algoritmus **16**
3.1 E-krok 16
3.1.1 Výpočet pomocí diferenciálních rovnic 19
3.1.2 Uniformizační metoda 21
3.2 M-krok 29
3.3 Souhrn kroků algoritmu a konvergence 29
3.4 Rozptyl odhadů 32

4 Markov Chain Monte Carlo **34**
4.1 Bayesovský přístup 34
4.2 Algoritmus 35

5 Zobecnění pro více pozorování **38**

6 Simulační studie **39**
6.1 Odhad ze spojitého pozorování 40
6.2 Odhad z diskrétního pozorování 41
6.2.1 Výpočet z matice pravděpodobností přechodu 42
6.2.2 EM algoritmus 43
6.2.3 MCMC algoritmus 44
6.2.4 Rozptyl odhadů a intervaly spolehlivosti 47
6.3 Porovnání odhadů 49
6.4 Týdenní pozorování 49
6.5 Měsíční pozorování 52
6.6 Vliv frekvence pozorování 54
6.7 Vliv délky pozorování 55

7 Závěr **58**

Seznam použité literatury **60**

Seznam obrázků **62**

Seznam tabulek **63**

Příloha 1 **64**

Seznam symbolů a zkratek

$\mathbb{N}$, $\mathbb{N}_0$, $\mathbb{R}$, ...	obory čísel,
$\mathcal{B}^n$	borelovská σ-algebra nad $\mathbb{R}^n$,
$\mathbf{P}$, $\mathbf{Q}$, $\mathbf{B}$, ...	matice,
$\mathbf{0}$	nulová matice,
$\det(\mathbf{P})$	determinant matice $\mathbf{P}$,
$diag(\mathbf{P})$	diagonála matice $\mathbf{P}$,
$\mathbf{P}_{ab}$	prvek matice $\mathbf{P}$ na souřadnicích (a,b),
$\mathbf{I}$	jednotková matice,
$\mathbf{1}_{ab}$	matice s jediným nenulovým prvkem na souřadnicích (a,b), který je roven 1,
$\mathbf{1}_{\cdot k}$	matice s jediným nenulovým k-tým sloupcem, ve kterém jsou samé 1,
$\mathbf{A} * \mathbf{B}$	Hadamardův součin,
$\|\mathbf{Q}\|$	maticová norma,
$\mathcal{Q}$, $\mathcal{P}$, ...	množiny matic,
$Int(\mathcal{Q})$	vnitřek množiny $\mathcal{Q}$,
$\delta\mathcal{Q}$	hranice množiny $\mathcal{Q}$,
$\mathbf{s}$, $\mathbf{y}$, $\boldsymbol{\alpha}$, ...	vektory,
$\mathbf{e}_i$	i-tý kanonický vektor, tj. jediný jeho nenulový prvek je jednička na i-té pozici,
$\mathbf{e}_i^T$	transpozice vektoru,
$diag(\mathbf{s})$	matice s vektorem $\mathbf{s}$ na diagonále a nulami mimo diagonálu,
X_t	Markovský řetězec s diskrétním časem,
$X(t)$	Markovský řetězec se spojitým časem,
$P(A)$	pravděpodobnost jevu A,
$P(A\|B)$	pravděpodobnost jevu A za podmínky jevu B,
$\mathsf{E}\, X$	střední hodnota náhodné veličiny X,
$\mathsf{E}\,[X\|Y]$	střední hodnota náhodné veličiny X za podmínky Y,
$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\,[X\|Y]$	střední hodnota veličiny X za podmínky Y s předem zvolenou maticí $\mathbf{Q}$,
$varX$	rozptyl náhodné veličiny X,
$\mathbb{I}(A)$	identifikátorová funkce jevu A,
δ_{ij}	Kroneckerovo delta,
$\widehat{\mathbf{Q}}$, $\widehat{q}_{ij}$, ...	odhady příslušných veličin,
$B(\alpha,\beta)$	Beta rozdělení s parametry α, β,
$Exp(\lambda)$	exponenciální rozdělení s parametrem λ, tj. se střední hodnotou $\frac{1}{\lambda}$,
$Dir(\boldsymbol{\alpha})$	Dirichletovo rozdělení s vektorovým parametrem $\boldsymbol{\alpha}$,
$\Gamma(a,p)$	Gamma rozdělení s parametry a, p, tj. se střední hodnotou $\frac{a}{p}$,

$N(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$	mnohorozměrné normální rozdělení se střední hodnotou $\boldsymbol{\mu}$ a rozptylovou maticí $\boldsymbol{\Sigma}$,
$\propto$	rovnost dvou výrazů až na konstantu.
s.j.	skoro jistě,
s.v.	skoro všude.

Kapitola 1

Úvod

Při studování Markovových řetězců se spojitým časem bývá silným teoretickým nástrojem znalost matice intenzit přechodu. S její pomocí je možné počítat například pravděpodobnosti přechodu, stacionární a limitní rozdělení nebo simulovat jednotlivé trajektorie.

V praxi ale takovou matici většinou k dispozici nemáme, místo ní pozorujeme jednotlivé hodnoty, které za rozumných podmínek považujeme za realizace nějakého Markovova řetězce se spojitým časem. Z tohoto souboru čísel bychom chtěli vhodnými metodami vypočítat takový odhad matice intenzit, který bude co nejlépe popisovat chování řetězce.

U spojitého pozorování, jak zjistíme v následující kapitole, tento úkol příliš složitý není, stačí nám získat dostatečně dlouhou trajektorii a využít pro výpočet odhadu metodu maximální věrohodnosti. Ovšem také existence spojitého pozorování se pohybuje spíše na teoretické hladině, neboť měření máme zpravidla k dispozici v nějakých diskrétních okamžicích, často ekvidistantních. Tato práce se tedy hlavně zabývá odhadem matice intenzit z napozorované diskrétní trajektorie.

Konkrétně si můžeme vše představit na příkladu ratingového hodnocení společností, kde v předem určeném časovém okamžiku získáváme pro danou společnost její aktuální ratingovou kategorii. Situaci modelujeme Markovským řetězcem se spojitým časem místo času diskrétního, neboť je rozumné předpokládat, že k přechodu mezi stavy dochází v nějakém okamžiku mezi sousedními pozorováními. Z ekvidistantních pozorování pak s využitím metod popsaných v tomto textu budeme schopni nalézt pro společnost odhad matice intenzit přechodu mezi ratingovými kategoriemi.

Tato práce je rozčleněna do sedmi kapitol a jedné přílohy. První kapitola obsahuje kromě úvodních slov také shrnutí nejdůležitějších poznatků z teorie pravděpodobnosti a náhodných procesů, na které se dále v textu budeme odkazovat.

Ve druhé kapitole nalezneme popis odhadu matice intenzit z pozorované spojité trajektorie pomocí metody maximální věrohodnosti a také rozšíření pro diskrétní data, kde se využívá výpočtu z odhadu matice pravděpodobností přechodu Markovského řetězce pomocí maticového logaritmu. Odhad ze spojité trajektorie je zde uveden hlavně pro následné porovnání a zhodnocení přesnosti ostatních odhadů, neboť se při něm využívá kompletní informace o průběhu trajektorie, odhad by tedy měl být nejlepší možný.

Třetí kapitola se věnuje tzv. EM algoritmu. Nalezneme v ní základní myšlenku a podrobné odvození výpočtu jednotlivých veličin a funkcí, které jsou potřebné pro průběh každé iterace. Dále je zde krok po kroku sepsán celý algoritmus. V závěru kapitoly se rozebírá otázka konvergence získaných odhadů z jednotlivých iterací a také využití informační matice pro odhad rozptylu.

Čtvrtá kapitola rozebírá další algoritmus, který je možné použít pro odhadování matice intenzit přechodu na základě diskrétního pozorování. Jedná se o Monte Carlo Markov Chain založený na bayesovském přístupu, ve kterém na základě velkého množství simulací z apriorní hustoty získáváme mnoho odhadů matice intenzit a s jejich pomocí tvoříme aposteriorní hustoty, které vzápětí znovu vstupují do dalších iterací. Výsledný odhad je průměr všech výsledků, které takovým postupem získáme.

V páté kapitole následuje stručná poznámka o možném rozšíření dosud rozebrané teorie při současném pozorování více než jedné diskrétní trajektorie.

V šesté kapitole pak nalezneme podrobně zdokumentovanou simulační studii, ve které jsou aplikované všechny předešlé postupy. Algoritmy jsou naprogramovány v softwaru *Wolfram Mathematica 9.0 Student Edition* a jako vhodná simulační matice byla vybrána matice intenzit z modelu telefonní ústředny. V této kapitole jsou popsány jednotlivé výsledky a také porovnány odhady ze spojité trajektorie s odhady z diskrétní trajektorie, a to při denní, měsíční i roční frekvenci. Můžeme si tedy udělat představu o tom, jak velký vliv na výsledný odhad má mezera mezi sousedními pozorovanými hodnotami. Také je zde popsán vliv délky pozorování, kde porovnáváme denní odhady z pětiletého intervalu s denními odhady z desetiletého intervalu.

Sedmá závěrečná kapitola shrnuje veškeré důležité závěry této práce a také navrhuje další možné rozšíření zadaného tématu, pro které již nezbyl prostor.

V dodatečné příloze si můžeme prohlédnout důkaz pomocného tvrzení využitého ve druhé kapitole. Z tvrzení lze odvodit vzorce pro výpočet veličiny, která je klíčová pro EM algoritmus. Důkaz byl odsunut z hlavního textu pro svou délku a technickou náročnost.

Nyní již následuje soupis nejdůležitějších vět, definic a poznámek, které později budeme využívat v dalších kapitolách. Jejich znění a důkazy můžeme nalézt například ve skriptech [1], [11] a [16].

1.1 Základní věty a definice z teorie pravděpodobnosti a statistiky

Definice 1.1. *Nechť* $(\Omega,\mathcal{A},P)$ *je pravděpodobnostní prostor a* $(E,\mathcal{E})$ *je měřitelný prostor. Budeme říkat, že zobrazení* $X : \Omega \to E$ *je* náhodná veličina *s hodnotami v* $(E,\mathcal{E})$*, jestliže je měřitelná, tj. pro každé* $B \in \mathcal{E}$ *je*

$$[X \in B] := \big\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in B\big\} = X^{-1}(B) \in \mathcal{A}.$$

Definice 1.2. *Nechť* X *je náhodná veličina na pravděpodobnostním prostoru* $(\Omega,\mathcal{A},P)$*, pak její* střední hodnotu *definujeme jako*

$$\mathsf{E}\, X = \int_\Omega X \, dP,$$

pokud tento integrál existuje. Jinak říkáme, že X nemá střední hodnotu. Množinu všech náhodných veličin X, pro které je $\mathsf{E}\,|X| < \infty$, značíme $\mathbb{L}_1(\Omega,\mathcal{A},P)$.

Definice 1.3. *Nechť $\boldsymbol{X} = (X_1,\ldots,X_n)^T$ je náhodný vektor o $n \geq 2$ složkách, uvažujme dále náhodné vektory $\boldsymbol{Y} = (X_1,\ldots,X_r)^T$ a $\boldsymbol{Z} = (X_{r+1},\ldots,X_n)^T$, kde $1 \leq r < n$. Nechť $\boldsymbol{X}$ má hustotu vzhledem k součinové míře $\mu = \lambda \times \nu$, kde λ je σ-konečná míra na $(\mathbb{R}^r,\mathcal{B}^r)$ a ν je σ-konečná míra na $(\mathbb{R}^{n-r},\mathcal{B}^{n-r})$.* Podmíněnou hustotou *náhodného vektoru $\boldsymbol{Z}$ při daném $\boldsymbol{Y}$ nazveme takovou nezápornou měřitelnou funkci $r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$, která pro libovolné množiny $B \in \mathcal{B}^r$ a $C \in \mathcal{B}^{n-r}$ splňuje vztah*

$$P(\boldsymbol{Y} \in B, \boldsymbol{Z} \in C) = \int_B \left[\int_C r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})\ d\nu(\boldsymbol{z}) \right] q(\boldsymbol{y})\ d\lambda(\boldsymbol{y}),$$

kde $q(\boldsymbol{y})$ je marginální hustota vektoru $\boldsymbol{Y}$.

Věta 1.1. *Nechť λ a ν jsou σ-konečné míry a nechť sdružená hustota náhodných vektorů $\boldsymbol{Y}$ a $\boldsymbol{Z}$ vzhledem k $\mu = \lambda \times \nu$ je $p(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})$. Nechť $q(\boldsymbol{y}) = \int_{\mathbb{R}^{n-r}} p(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})\ d\nu(\boldsymbol{z})$ je marginální hustota vektoru $\boldsymbol{Y}$. Pak podmíněná hustota vektoru $\boldsymbol{Z}$ při daném $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{y}$ je rovna*

$$r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y}) = \begin{cases} \frac{p(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})}{q(\boldsymbol{y})}, & q(\boldsymbol{y}) \neq 0, \\ 0, & q(\boldsymbol{y}) = 0. \end{cases}$$

Věta 1.2. *Pro podmíněnou hustotu $r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})$ platí*

$$p(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}) = r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y}),$$

s.v. vzhledem k míře $\lambda \times \nu$.

Definice 1.4. *Nechť $\boldsymbol{X}$, $\boldsymbol{Y}$ a $\boldsymbol{Z}$ jsou definované jako výše. Nechť $S(\boldsymbol{x})$ je měřitelná funkce n proměnných taková, že $S := S(\boldsymbol{X}) = S(\boldsymbol{Y},\boldsymbol{Z})$ je náhodná veličina. Nechť $S \in \mathbb{L}_1(\Omega,\mathcal{A},P)$.* Podmíněnou střední hodnotu *náhodné veličiny S za podmínky, že vektor $\boldsymbol{Y}$ nabyl hodnoty $\boldsymbol{y}$, definujeme vztahem*

$$\mathsf{E}\,[S|\,\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{y}] = \int_{\mathbb{R}^{n-r}} S(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}) r(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{y})\ d\nu(\boldsymbol{z}),$$

pokud integrál na pravé straně existuje.

Poznámka. Položme $\mathsf{E}\,[S|\mathbf{Y} = \mathbf{y}] = f(\mathbf{y})$ a definujme symbol $\mathsf{E}\,[S|\mathbf{Y}] = f(\mathbf{Y})$. Náhodnou veličinu $\mathsf{E}\,[S|\mathbf{Y}]$ nazýváme podmíněnou střední hodnotou S při daném, ale neurčeném $\mathbf{Y}$.

Věta 1.3. *Pro $X,Y \in \mathbb{L}_1(\Omega,\mathcal{A},P)$ a náhodný vektor $\boldsymbol{Z}$ platí*

(i) pro $a,b,c \in \mathbb{R}$ je $\mathsf{E}[aX + bY + c|\boldsymbol{Z}] = a\,\mathsf{E}[X|\boldsymbol{Z}] + b\,\mathsf{E}[Y|\boldsymbol{Z}] + c$, s.j.,

(ii) pokud $X \leq Y$ s.j., pak také $\mathsf{E}[X|\boldsymbol{Z}] \leq \mathsf{E}[Y|\boldsymbol{Z}]$, s.j.,

(iii) $\mathsf{E}\,[\mathsf{E}\,[X|\boldsymbol{Z}]] = \mathsf{E}\,X$.

Věta 1.4. *Nechť $X \in \mathbb{L}_1(\Omega,\mathcal{A},P)$ a $B \in \mathcal{A}$ takové, že $P(B) > 0$. Pak platí*

$$\mathsf{E}\,[X|B] = \frac{\mathsf{E}\,\left[X\ \mathbb{I}(B)\right]}{P(B)}.$$

Věta 1.5. *(Jensenova nerovnost) Nechť* $(X_1,\ldots,X_n)^T$ *je reálný náhodný vektor s hodnotami v uzavřené konvexní množině* $D \subset \mathbb{R}^n$*, nechť* $\boldsymbol{Y}$ *je náhodný vektor a* $g : D \to \mathbb{R}$ *je spojitá konvexní funkce. Pokud platí, že* $X_1,\ldots,X_n \in \mathbb{L}_1(\Omega,\mathcal{A},P)$ *a* $g(X_1,\ldots,X_n) \in \mathbb{L}_1(\Omega,\mathcal{A},P)$*, potom*

$$\big(\mathsf{E}\,[X_1|\,\boldsymbol{Y}],\ldots,\mathsf{E}\,[X_n|\,\boldsymbol{Y}]\big)^T \in D,\ s.j.,$$

$$\mathsf{E}\,\big[g(X_1,\ldots,X_n)\,|\,\boldsymbol{Y}\big] \geq g\big(\mathsf{E}\,[X_1|\,\boldsymbol{Y}],\ldots,\mathsf{E}\,[X_n|\,\boldsymbol{Y}]\big).$$

Věta 1.6. *(Věta o transformaci) Nechť náhodný vektor* $\boldsymbol{X} = (X_1,\ldots,X_n)^T$ *má hustotu* f *vzhledem k Lebesgueově míře v* $\mathbb{R}^n$*, nechť* $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ *je regulární a prosté na otevřené množině* G*, pro níž platí* $\int_G f(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x} = 1$*. Označme inverzní zobrazení ke* g *jako* $g^{-1} : g(G) \to G$*. Pak náhodný vektor* $\boldsymbol{Y} = g(\boldsymbol{X})$ *má hustotu vzhledem k Lebesgueově míře a tato hustota je rovna*

$$h(\boldsymbol{y}) = \begin{cases} f\big(g^{-1}(\boldsymbol{y})\big)\,|J_{g^{-1}}(\boldsymbol{y})|, & \boldsymbol{y} \in g(G), \\ 0, & \boldsymbol{y} \notin g(G), \end{cases}$$

kde $J_{g^{-1}}$ *značí jakobián zobrazení* g^{-1}*.*

Věta 1.7. *(Lindebergova CLV) Nechť* $\boldsymbol{X}_1$*,* $\boldsymbol{X}_2$*, ... jsou nezávislé náhodné vektory, které mají stejné rozdělení se střední hodnotou* $\boldsymbol{\mu}$ *a s konečnou varianční maticí* $\boldsymbol{\Sigma}$*. Pak pro* $n \to \infty$ *platí*

$$\sqrt{n}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{\mu}\right) \xrightarrow{d} N(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\Sigma}).$$

Poznámka. Nechť X_1, X_2, ..., X_n je náhodný výběr z rozdělení se střední hodnotou $\mu \in \mathbb{R}$ a konečným rozptylem $\sigma^2 > 0$, který není známý. Pak asymptotický interval spolehlivosti pro μ na hladině významnosti α je

$$\left(\overline{X}_n - \sqrt{\frac{S_n^2}{n}}\,t_{n-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right),\ \overline{X}_n + \sqrt{\frac{S_n^2}{n}}\,t_{n-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\right), \tag{1.1}$$

kde $t_{n-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)$ je $\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)$tý kvantil Studentova t-rozdělení o $n-1$ stupních volnosti a $\overline{X}_n$ a S_n^2 jsou výběrový průměr, resp. výběrový rozptyl, které definujeme jako

$$\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_i, \quad S_n^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X}_n)^2.$$

1.2 Základní věty a definice z teorie náhodných procesů

Definice 1.5. *Nechť* $\{X(t),\ t \in T\}$*,* $T \subset \mathbb{R}$ *je rodina náhodných veličin na pravděpodobnostním prostoru* $(\Omega,\mathcal{A},P)$*. Potom* $\{X(t),\ t \in T\}$ *se nazývá* náhodný (stochastický) proces*.*

Poznámka. Pokud je množina T konečná nebo spočetná, pak se jedná o proces s diskrétním časem. Pokud je množina T intervalem, jde o proces se spojitým časem.

Definice 1.6. *Čtvercovou matici reálných čísel nazýváme* stochastickou, *pokud jsou její prvky nezáporné, nejvýše rovné* 1 *a pokud součet prvků v každém jejím řádku je roven* 1.

Definice 1.7. *Řekneme, že proces* $\{X_t,\ t \in T\}$ *je* striktně stacionární, *jestliže pro libovolné* $n \in \mathbb{N}$, *pro libovolná reálná* $x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n$ *a konečně pro libovolná* $t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_n$ *a* h *taková, že* $t_k \in T$, $t_k + h \in T$, $1 \leq k \leq n$, *platí*

$$F_{t_1,\ldots,t_n}(x_1,\ldots,x_n) = F_{t_1+h,\ldots,t_n+h}(x_1,\ldots,x_n),$$

kde $F_{t_1,\ldots,t_n}$, *resp.* $F_{t_1+h,\ldots,t_n+h}$, *značí distribuční funkci vektoru* $(X_{t_1},\ldots,X_{t_n})^T$, *resp.* $(X_{t_1+h},\ldots,X_{t_n+h})^T$.

1.2.1 Markovův řetězec s diskrétním časem

Definice 1.8. *Nechť* $T = \{0,1,\ldots\}$ *a nechť* $\{X_t,\ t \in T\}$ *je náhodná posloupnost nezáporných celočíselných veličin s hodnotami v množině* $S \subseteq \mathbb{N}_0$, *kde* S *je taková, že*

$$i \in S \quad \Leftrightarrow \quad \exists t\ :\ P(X_t = i) > 0.$$

Řekneme, že $\{X_t,\ t \in T\}$ *je* Markovův řetězec s diskrétním časem *a množinou stavů* S, *jestliže pro každé* $t \in T$ *a* $i,j,i_{t-1},\ldots,i_0 \in S$ *taková, že*

$$P(X_t = i, X_{t-1} = i_{t-1},\ldots,X_0 = i_0) > 0,$$

platí

$$P\left(X_{t+1} = j | X_t = i, X_{t-1} = i_{t-1},\ldots,X_0 = i_0\right) = P\left(X_{t+1} = j | X_t = i\right).$$

Definice 1.9. *V Markovově řetězci s diskrétním časem definujeme* pravděpodobnosti přechodu

$$p_{ij}(n,m) = P(X_m = j | X_n = i), \quad i,j \in S,\ n,m \in T,\ n \leq m.$$

Pokud je $p_{ij}(n,m)$ *pro každé* $i,j \in S$ *funkcí rozdílu* $m - n$, *pak takový řetězec nazýváme* homogenní. *V homogenním řetězci značíme pravděpodobnosti přechodu o jeden krok* $p_{ij}(n,n+1) = p_{ij}$. *Matici* $\boldsymbol{P} = (p_{ij})_{i,j \in S}$ *nazýváme* maticí pravděpodobností přechodu.

Poznámka. Matice pravděpodobností přechodu řetězce s diskrétním časem a množinou stavů S je stochastická, neboť její prvky jsou nezáporné a nejvýše rovné 1 z definice pravděpodobnosti, a také platí

$$\sum_{j \in S} p_{ij} = \sum_{j \in S} P(X_1 = j | X_0 = i) = 1.$$

1.2.2 Markovův řetězec se spojitým časem

Definice 1.10. *Náhodný proces* $\{X(t),\ t \geq 0\}$ *celočíselných nezáporných náhodných veličin s množinou stavů* $S \subseteq \mathbb{N}_0$ *se nazývá* Markovův řetězec se spojitým časem, *jestliže pro všechna* $i,j,i_0,\ldots,i_n \in S$ *a* $0 < t_0 < t_1 < \cdots < t_n < t < s$ *platí*

$$P\big(X(s) = j\ |X(t) = i, X(t_n) = i_n,\ldots,X(t_0) = i_0\big) = P\big(X(s) = j | X(t) = i\big).$$

Tento vztah nazýváme markovskou vlastností.

Definice 1.11. *V Markovově řetězci se spojitým časem definujeme* pravděpodobnosti přechodu

$$p_{ij}(s,t) = P(X(t) = j | X(s) = i), \quad i,j \in S, \quad 0 \leq s \leq t.$$

Pokud je $p_{ij}(s,t)$ pro každé $i,j \in S$ funkcí rozdílu $t-s$, pak takový řetězec nazýváme homogenní. *Matici $\boldsymbol{P}$ vytvořenou z prvků $p_{ij}(t)$, kde $i,j \in S$, nazýváme* maticí pravděpodobností přechodu *řetězce v čase t.*

Poznámka. Matice pravděpodobností přechodu řetězce se spojitým časem je stochastická, což lze odvodit analogicky diskrétnímu případu.

Věta 1.8. *Nechť $\{X(t), t \geq 0\}$ je homogenní Markovův řetězec s množinou stavů $S \subseteq \mathbb{N}_0$ a maticemi pravděpodobností přechodu $\boldsymbol{P}(t)$ pro $t \geq 0$. Potom existují limity*

$$\lim_{h \to 0+} \frac{p_{ij}(h)}{h} = q_{ij}, \qquad 0 \leq q_{ij} < \infty,\ i,j \in S,\ i \neq j,$$
$$\lim_{h \to 0+} \frac{1 - p_{ii}(h)}{h} = q_i, \qquad 0 \leq q_i \leq \infty,\ i \in S.$$

Definice 1.12. *Prvky q_{ij} z Věty 1.8 nazýváme* intenzitami přechodu *ze stavu i do stavu j, q_i pak označujeme jako* celková intenzita výstupu *ze stavu i. Pokud dodefinujeme prvek*

$$q_{ii} = -q_i = \lim_{h \to 0+} \frac{p_{ii}(h) - 1}{h}, \quad i \in S,$$

pak matici $\boldsymbol{Q} = (q_{ij})_{i,j \in S}$ nazýváme maticí intenzit přechodu.

Věta 1.9. *Nechť $\{X(t), t \geq 0\}$ je homogenní Markovův řetězec s množinou stavů $S = \{0,1,\dots\}$ a maticí intenzit přechodu $\boldsymbol{Q}$. Potom platí*

$$P\big(X(t) = i,\ s \leq t \leq s + \tau | X(s) = i\big) = e^{-q_i \tau}, \qquad q_i < \infty,$$
$$= 0, \qquad q_i = \infty.$$

Věta 1.10. *Nechť $\{X(t), t \geq 0\}$ je homogenní Markovův řetězec s maticí intenzit přechodu $\boldsymbol{Q}$. Nechť celková intenzita $q_i = 0$ pro nějaké $i \in S$. Potom $p_{ii}(t) = 1$ pro každé $t \geq 0$. Nechť pro celkovou intenzitu platí $0 < q_i < \infty$, potom doba setrvání ve stavu i je náhodná veličina, která má exponenciální rozdělení s parametrem q_i, tj. s hustotou*

$$f(x) = q_i\ e^{-q_i x}, \quad x \geq 0.$$

Věta 1.11. *Nechť $\{X(t), t \geq 0\}$ je homogenní Markovův řetězec s maticí intenzit přechodu $\boldsymbol{Q}$. Nechť $i \in S$, $0 < q_i < \infty$ a τ_i je čas výstupu ze stavu i. Potom*

$$P\big(X(\tau_i) = j | X(0) = i\big) = \frac{q_{ij}}{q_i}, \quad j \in S,\ i \neq j.$$

Věta 1.12. *Nechť $m \in \mathbb{N}$ a $\boldsymbol{Q}$ je matice $m \times m$ s nezápornými prvky q_{ij}, $i \neq j$, jejíž součty v jednotlivých řádcích jsou rovné nule. Potom existuje jediné společné řešení soustav diferenciálních rovnic*

$$\boldsymbol{P}'(t) = \boldsymbol{Q}\ \boldsymbol{P}(t), \quad \boldsymbol{P}'(t) = \boldsymbol{P}(t)\ \boldsymbol{Q},$$

které je při počáteční podmínce $\boldsymbol{P}(0) = \boldsymbol{I}$ rovno

$$\boldsymbol{P}(t) = \exp(t\,\boldsymbol{Q}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k\,\boldsymbol{Q}^k}{k!}.$$

Navíc $\boldsymbol{P}(t)$ je matice pravděpodobností přechodu nějakého homogenního Markovova řetězce se spojitým časem a s množinou stavů $S = \{1,2,\ldots,m\}$.

Kapitola 2

Odhad metodou maximální věrohodnosti

2.1 Spojité pozorování

Nechť $X(t)$ je homogenní Markovův řetězec se spojitým časem, který může nabývat stavů $\{1,\ldots,m\}$, s maticí intenzit přechodu $\mathbf{Q}$. Předpokládejme nejprve, že máme k dispozici spojité pozorování tohoto řetězce v určitém časovém intervalu. Tedy známe jednu konkrétní trajektorii $\{X_\omega(t),\ t \in [0,\tau]\}$. Naším cílem je z pozorování odhadnout matici intenzit přechodu $\mathbf{Q}$ v modelu Markovova řetězce.

Označíme symboly $i_1,\ \ldots,\ i_n$ posloupnost stavů, kterými řetězec postupně prošel, a $\tau_1,\ \ldots,\ \tau_n$ doby setrvání řetězce v jednotlivých stavech. Celou situaci můžeme znázornit schématem

$$i_1(\tau_1)\ \to\ i_2(\tau_2)\ \to \cdots \to\ i_n(\tau_n).$$

Označíme důležité charakteristiky pro pozorovanou trajektorii.

- $N_{ij}(\sigma,\tau)$ pro $i,j = 1,\ldots,m$, $i \neq j$ značí počet přeskoků řetězce ze stavu i do stavu j v časovém intervalu $[\sigma,\tau]$, kde $\sigma \leq \tau$. Zkráceně budeme značit $N_{ij}(\tau) = N_{ij}(0,\tau)$ pro $\tau \geq 0$.
- $R_i(\sigma,\tau)$ pro $i = 1,\ldots,m$ značí celkový čas strávený řetězcem ve stavu i v časovém intervalu $[\sigma,\tau]$, kde $\sigma \leq \tau$. Analogicky předchozímu budeme značit $R_i(\tau) = R_i(0,\tau)$ pro $\tau \geq 0$.

Intenzity přechodu odhadneme metodou maximální věrohodnosti. Věrohodnostní funkci spočítáme s použitím Vět 1.9, 1.10 a 1.11, str. 10, následovně

$$\begin{aligned} L_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) &= q_{i_1}\ e^{-\tau_1 q_{i_1}}\ \frac{q_{i_1 i_2}}{q_{i_1}}\ q_{i_2}\ e^{-\tau_2 q_{i_2}}\ \frac{q_{i_2 i_3}}{q_{i_2}} \cdots q_{i_{n-1}}\ e^{-\tau_{n-1} q_{i_{n-1}}}\ \frac{q_{i_{n-1} i_n}}{q_{i_{n-1}}}\ e^{-\tau_n q_{i_n}} = \\ &= q_{i_1 i_2}\ q_{i_2 i_3} \cdots q_{i_{n-1} i_n}\ e^{-\tau_1 q_{i_1} - \tau_2 q_{i_2} - \ldots - \tau_n q_{i_n}} = \prod_{i=1}^{m} \prod_{j \neq i} q_{ij}^{N_{ij}(\tau)}\ \prod_{l=1}^{m} e^{-q_l R_l(\tau)} = \\ &= \prod_{i=1}^{m} \prod_{j \neq i} q_{ij}^{N_{ij}(\tau)}\ e^{-q_{ij} R_i(\tau)}. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Logaritmickou věrohodnostní funkci získáme zlogaritmováním funkce (2.1).

$$l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) = \log L_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j \neq i} \big(N_{ij}(\tau) \ \log q_{ij} - q_{ij} R_i(\tau) \big). \tag{2.2}$$

Maximálně věrohodný odhad je definován jako maximum funkce $l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})$ vzhledem k proměnným q_{ij}, $i,j = 1,\ldots,m$, $i \neq j$. Pro jeho nalezení položíme jednotlivé parciální derivace rovné nule.

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})}{\partial q_{ij}} = N_{ij}(\tau)\frac{1}{q_{ij}} - R_i(\tau), \\ \widehat{q}_{ij} &= \frac{N_{ij}(\tau)}{R_i(\tau)}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Ze vztahu (2.3) vidíme, že $\widehat{q}_{ij}$ existuje pouze v případě, že $R_i(\tau) > 0$. V opačném případě nemáme o stavu i žádnou informaci, a tedy nemůžeme na základě pozorování o tomto stavu nic odhadovat.

2.2 Diskrétní pozorování

Nyní se na vše podíváme z více reálného úhlu. Model zůstane stejný, stále zkoumáme homogenní Markovův řetězec se spojitým časem $\{X(t),\ t \in [0,\tau]\}$, který může nabývat stavů $\{1,\ldots,m\}$, s maticí intenzit přechodu $\mathbf{Q}$. Místo spojitého pozorování ale budeme mít k dispozici jen údaje v daných časových okamžicích $t_1, \ldots, t_n$, tedy jednu realizaci $\{X_\omega(t_1), \ldots, X_\omega(t_n)\}$. Předpokládáme, že $t_1 = 0$ a $t_n = \tau$. Následující úvahy jsou převzaté z textu [4].

Proces $Y_i = X(t_i)$, $i = 1,\ldots,n$, je obecně nehomogenní Markovův řetězec s diskrétním časem, maticí pravděpodobností přechodu $\mathbf{P}(\Delta_i)$ v čase i, kde Δ_i značí velikost kroku, tedy $\Delta_i = t_{i+1} - t_i$. Dále víme, že matici pravděpodobností přechodu lze spočítat z matice intenzit přechodu pomocí Věty 1.12, str. 11.

Věrohodnostní funkce pro diskrétní data je tedy dána vztahem

$$L_n(\mathbf{Q}) = \prod_{i=1}^{n-1} p_{x_i x_{i+1}}(\Delta_i), \quad \mathbf{Q} \in \mathcal{Q}, \tag{2.4}$$

kde $x_1, \ldots, x_n$ jsou jednotlivá pozorování, $p_{x_i x_{i+1}}(\Delta_i)$ je prvek matice $\mathbf{P}(\Delta_i)$ se souřadnicemi x_i a x_{i+1} a konečně $\mathcal{Q}$ značí množinu všech možných matic intenzit přechodu, tedy matic s reálnými čísly, jejichž prvky mimo diagonálu jsou nezáporné a součet v jednotlivých řádcích je roven 0.

V případě ekvidistantních časových okamžiků pozorování (tzn. $\Delta_i = \Delta > 0$) je řetězec $\{Y_1,\ldots,Y_n\}$ homogenní s maticí pravděpodobností přechodu $\mathbf{P}(\Delta)$ a celou funkci (2.4) můžeme zjednodušit na

$$L_n(\mathbf{Q}) = \prod_{i=1}^{m} \prod_{j=1}^{m} p_{ij}(\Delta)^{K_{ij}(n)}, \quad \mathbf{Q} \in \mathcal{Q},$$

kde $K_{ij}(n)$ je počet přeskoků ze stavu i do stavu j v řetězci $\{Y_1,\ldots,Y_n\}$.

Pokud tedy předpokládáme, že pozorování tvoří homogenní Markovův řetězec s diskrétním časem, stavy $\{1,\ldots,m\}$ a maticí pravděpodobností přechodu $\mathbf{P}$, pak můžeme položit $p_{ij} = p_{ij}(\Delta)$ a vztah pro věrohodnostní funkci přepíšeme následovně

$$L_n(\mathbf{P}) = \prod_{i=1}^{m}\prod_{j=1}^{m} p_{ij}^{K_{ij}(n)}, \quad \mathbf{P} \in \mathcal{P}.$$

Zde $\mathcal{P}$ značí množinu všech matic pravděpodobností přechodu o rozměrech $m \times m$ podle Definice 1.11, str. 10.

Nyní najdeme, podobně jako ve spojitém případě, maximálně věrohodný odhad $\widehat{p}_{ij}$. Hledáme extrém logaritmické věrohodnostní funkce

$$l_n(\mathbf{P}) = \log L_n(\mathbf{P}) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} K_{ij}(n)\ \log p_{ij},$$

vzhledem k p_{ij}, $i,j = 1,\ldots,m$, který je navíc vázaný na podmínky $\sum_{j=1}^{m} p_{ij} = 1$, $i = 1,\ldots,m$. Využijeme větu o Lagrangeových multiplikátorech, viz např. [18], Theorem 1. Předpokládejme, že v $\{\widehat{p}_{ij},\ i,j = 1,\ldots,m\}$ je extrém funkce l_n, pak existují $\lambda_1,\ldots,\lambda_m \in \mathbb{R}$ takové, že

$$\frac{K_{ij}}{\widehat{p}_{ij}} - \lambda_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \widehat{p}_{ij} = \frac{K_{ij}}{\lambda_i}, \quad i,j = 1,\ldots,m.$$

Navíc pro každé $i = 1,\ldots,m$ platí

$$1 = \sum_{j=1}^{m} \widehat{p}_{ij} = \sum_{j=1}^{m} \frac{K_{ij}}{\lambda_i} = \frac{1}{\lambda_i}\sum_{j=1}^{m} K_{ij} \quad \Rightarrow \quad \lambda_i = \sum_{j=1}^{m} K_{ij}.$$

Dohromady dostáváme

$$\widehat{p}_{ij} = \frac{K_{ij}}{\sum_{j=1}^{m} K_{ij}}. \tag{2.5}$$

Nyní definujeme množinu matic

$$\mathcal{P}_0 = \{\exp(\Delta\mathbf{Q}),\ \mathbf{Q} \in \mathcal{Q}\}.$$

Pak zřejmě platí, že $\mathcal{P}_0 \subset \mathcal{P}$, neboť pro $\mathbf{P} \in \mathcal{P}_0$ existuje $\mathbf{Q} \in \mathcal{Q}$ taková, že $\mathbf{P} = \exp(\Delta\mathbf{Q})$, a protože $\mathbf{Q}$ je matice intenzit, pak $\exp(\Delta\mathbf{Q})$ je podle Věty 1.12, str. 11, stochastická matice, a tedy $\mathbf{P} \in \mathcal{P}$.

Předpokládejme, že jsem již spočítali matici $\widehat{\mathbf{P}}$ podle vztahu (2.5). Může nastat několik situací, které dále shrnuje Věta 2.1.

- Pokud $\widehat{\mathbf{P}} \in \mathcal{P}_0$, pak existuje $\widehat{\mathbf{Q}} \in \mathcal{Q}$ taková, že $\widehat{\mathbf{P}} = \exp(\Delta\widehat{\mathbf{Q}})$, navíc věrohodnostní funkce $L_n(\mathbf{Q})$ nabývá svého maxima právě v $\widehat{\mathbf{Q}}$, tedy $\widehat{\mathbf{Q}}$ je maximálně věrohodný odhad. Zde ale může nastat problém v tom, že maticová exponenciála není prostá funkce, a tedy pro jeden konkrétní odhad $\widehat{\mathbf{P}}$ může existovat více matic $\widehat{\mathbf{Q}}$.

- Pokud $\widehat{\mathbf{P}} \notin \mathcal{P}_0$, pak je situace obecně nejasná, hlavně z důvodu komplikované struktury $\mathcal{P}_0$.

Označme pro potřeby následujícího tvrzení množinu

$$\mathcal{P}_+ = \big\{\mathbf{P} \in \mathcal{P},\ \det(\mathbf{P}) > 0\big\},$$

pak platí, že $\mathcal{P}_+ \supseteq \mathcal{P}_0$. Dále nechť $\delta\mathcal{P}_0$ značí hranici $\mathcal{P}_0$ vzhledem k $\mathcal{P}_+$ a konečně nechť $\mathcal{P}_{00}$ značí množinu všech matic přechodu $\mathbf{P} \in \mathcal{P}_0$, pro které je $\mathbf{Q}$ jednoznačně určena vztahem $\mathbf{P} = \exp(\Delta\mathbf{Q})$.

Věta 2.1. *([4], Theorem 1)Nechť pro $\widehat{\boldsymbol{P}}$ nalezenou pomocí vztahu* (2.5) *platí, že $\widehat{\boldsymbol{P}} \in \mathcal{P}_0$. Pak maximálně věrohodný odhad matice intenzit $\widehat{\boldsymbol{Q}}$ existuje a je řešením rovnice*

$$\widehat{\boldsymbol{P}} = \exp(\Delta\,\widehat{\boldsymbol{Q}}).$$

Pokud $\widehat{\boldsymbol{P}} \notin \mathcal{P}_0$, pak buď maximálně věrohodný odhad $\widehat{\boldsymbol{Q}}$ existuje a splňuje podmínku $\exp(\Delta\,\widehat{\boldsymbol{Q}}) \in \delta\mathcal{P}_0$, nebo věrohodnostní funkce nemá maximum v $\mathcal{Q}$.

Pokud skutečná matice intenzit $\boldsymbol{Q}_0$ splňuje podmínku $\exp(\Delta\,\boldsymbol{Q}_0) \in Int(\mathcal{P}_0)$ a pokud je Markovův proces ergodický, pak pravděpodobnost, že maximálně věrohodný odhad existuje, jde k 1 pro $n \to \infty$ a

$$\exp(\Delta\,\widehat{\boldsymbol{Q}}) \xrightarrow{n\to\infty} \exp(\Delta\,\boldsymbol{Q}_0), \quad s.j.$$

Pokud navíc $\boldsymbol{Q}_0$ splňuje podmínku $\exp(\Delta\,\boldsymbol{Q}_0) \in \mathcal{P}_{00}$, pak pravděpodobnost, že maximálně věrohodný odhad je jednoznačně určený, jde k 1 pro $n \to \infty$ a

$$\widehat{\boldsymbol{Q}} \xrightarrow{n\to\infty} \boldsymbol{Q}_0, \quad s.j.,$$

pro Δ dostatečně malé.

Kapitola 3

EM algoritmus

V této kapitole budeme i nadále odhadovat matici intenzit z diskrétního pozorování. Připomeňme, že se zabýváme modelem homogenního Markovova řetězce $\{X(t),\ t \in [0,\tau]\}$ a máme k dispozici jen pozorování v určitých okamžicích $Y_i = X(t_i)$, $i = 1,\ldots,n$ kde $t_1 = 0$ a $t_n = \tau$. Předpokládejme, že tyto časové okamžiky jsou ekvidistantní, tzn. $t_{k+1} - t_k = \Delta > 0$ pro $k = 1,\ldots,n-1$. Využijeme věrohodnostní funkci (2.2), str. 13, z podkapitoly o spojitém pozorování, tentokrát ji však maximalizujeme pomocí tzv. EM algoritmu.

Obecně lze říci, že EM algoritmus je iterativní metoda, která hledá maximálně věrohodný odhad parametru v parametrickém pravděpodobnostním rozdělení. V každém iteračním kroku vyjdeme z dosud nejlepšího odhadu daného parametru, s jeho pomocí spočteme tzv. Q-funkci, což je střední hodnota logaritmické věrohodnostní funkce podmíněná parametrem na vstupu a diskrétním pozorováním. Tuto Q-funkci následně maximalizujeme a tím získáme nový odhad hledaného parametru, se kterým začíná další iterace.

Název algoritmu vznikl zkrácením anglického termínu the Expectation-Maximization algorithm a v tomto názvu jsou schovány dva výše zmíněné základní kroky, a to počítání Q-funkce (E-krok) a její maximalizace (M-krok). V literatuře lze podrobný popis nalézt např. v [6].

3.1 E-krok

Cílem E-kroku je napočítat Q-funkci, která je v našem případě definovaná následujícím způsobem

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})|\mathbf{Y} = \mathbf{y}\right],$$

kde $l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})$ je logaritmická věrohodnostní funkce z (2.2), str. 13, $\mathbf{Y} = \{Y_1,\ldots,Y_n\}$ jsou pozorované náhodné veličiny, $\mathbf{y} = \{y_1,\ldots,y_n\}$ jsou konkrétní napozorované hodnoty a $\mathbf{Q}_0$ je daná matice intenzit.

Výraz můžeme díky linearitě podmíněné střední hodnoty (Věta 1.3, str.7) rozepsat

$$\begin{aligned}&\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})|\mathbf{Y} = \mathbf{y}\right] = \\ &= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j\neq i}\log q_{ij}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y} = \mathbf{y}\right] - \sum_{i=1}^{m}\sum_{j\neq i} q_{ij}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y} = \mathbf{y}\right].\end{aligned}$$

Nejtěžší úlohou v tomto kroku je napočítání

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right], \quad \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right].$$

Využijeme postup výpočtu, který je převzatý z článku [4]. Pro $i,j = 1,\ldots,m$ a $t \geq 0$ nejprve označíme

$$\widetilde{M}_{ij}^{k}(t) = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_k(t)|X(t)=j,X(0)=i\right], \quad k=1,\ldots,m, \tag{3.1}$$

$$\widetilde{f}_{ij}^{kl}(t) = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{kl}(t)|X(t)=j,X(0)=i\right], \quad k,l=1,\ldots,m,\ k\neq l. \tag{3.2}$$

Pak (3.1) vyjadřuje průměrnou dobu setrvání ve stavu k v časovém intervalu $[0,t]$ v Markovově řetězci, který vychází ze stavu i a končí ve stavu j. Podobně (3.2) vyjadřuje průměrný počet přeskoků ze stavu k do stavu l v časovém intervalu $[0,t]$ v Markovově řetězci, který vychází ze stavu i a končí ve stavu j.

Věta 3.1. *Podmíněné střední hodnoty* $\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{ij}(\tau)|\,\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{y}\right]$ *a* $\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_i(\tau)|\,\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{y}\right]$ *lze pro* $i,j = 1,\ldots,m$, $i \neq j$, *vyjádřit pomocí vztahů*

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_i(\tau)|\,\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{y}\right] = \sum_{k=1}^{n-1} \widetilde{M}_{y_k y_{k+1}}^{i}(t_{k+1}-t_k) = \sum_{k=1}^{n-1} \widetilde{M}_{y_k y_{k+1}}^{i}(\Delta), \tag{3.3}$$

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{ij}(\tau)|\,\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{y}\right] = \sum_{k=1}^{n-1} \widetilde{f}_{y_k y_{k+1}}^{ij}(t_{k+1}-t_k) = \sum_{k=1}^{n-1} \widetilde{f}_{y_k y_{k+1}}^{ij}(\Delta). \tag{3.4}$$

Důkaz. Nechť $A(\alpha,\beta)$ souhrnně označuje $R_i(\alpha,\beta)$ i $N_{ij}(\alpha,\beta)$ pro libovolně zvolená $i,j = 1,\ldots,m$, $i \neq j$ a $0 \leq \alpha \leq \beta$. Z aditivity $A(\alpha,\beta)$ a z linearity podmíněné střední hodnoty plyne

$$A(0,\tau) = \sum_{k=1}^{n-1} A(t_k,t_{k+1}),$$

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(0,\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] = \sum_{k=1}^{n-1} \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right].$$

Nechť $k \in \{1,\ldots,n-1\}$ je pevně zvolené. Protože $A(t_k,t_{k+1})$ nezávisí na hodnotách řetězce v časech $t_{k+2}, \ldots, t_n$, dostáváme

$$\begin{aligned}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] &= \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|Y_1=y_1,Y_2=y_2,\ldots,Y_n=y_n\right] = \\ &= \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|Y_1=y_1,\ldots,Y_{k+1}=y_{k+1}\right].\end{aligned}$$

Z Markovské vlastnosti řetězce dále odvodíme, že hodnota statistik v intervalu $[t_k,t_{k+1}]$ nezávisí na chování řetězce v časech $t_1, \ldots, t_{k-1}$. Díky homogenitě Markovova řetězce můžeme ještě přesunout zkoumaný časový interval $[t_k,t_{k+1}]$ do počátku, tzn. do intervalu $[0,t_{k+1}-t_k] = [0,\Delta]$.

$$\begin{aligned}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] &= \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|Y_k=y_k,Y_{k+1}=y_{k+1}\right] = \\ &= \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(0,t_{k+1}-t_k)|Y_1=y_k,Y_2=y_{k+1}\right] = \\ &= \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(0,\Delta)|Y_1=y_k,Y_2=y_{k+1}\right].\end{aligned}$$

Celkem tedy pro střední dobu setrvání ve stavu $i \in \{1,\ldots,m\}$ máme

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(0,\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] = \sum_{k=1}^{n-1}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] =$$
$$= \sum_{k=1}^{n-1}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(0,\Delta)|Y_1=y_k,Y_2=y_{k+1}\right] = \sum_{k=1}^{n-1}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_i(\Delta)|Y_1=y_k,Y_2=y_{k+1}\right] =$$
$$= \sum_{k=1}^{n-1}\widetilde{M}^i_{y_k y_{k+1}}(\Delta),$$

Analogicky pro střední počet přeskoků mezi stavy $i,j \in \{,1\ldots,m\}$, $i \neq j$, odvodíme

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(0,\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] = \sum_{k=1}^{n-1}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(t_k,t_{k+1})|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] =$$
$$= \sum_{k=1}^{n-1}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[A(0,\Delta)|Y_1=y_k,Y_2=y_{k+1}\right] = \sum_{k=1}^{n-1}\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{ij}(\Delta)|Y_1=y_k,Y_2=y_{k+1}\right] =$$
$$= \sum_{k=1}^{n-1}\widetilde{f}^{ij}_{y_k y_{k+1}}(\Delta).$$

❑

Pro výpočet $\widetilde{M}^k_{ij}(t)$ nám stačí najít upravenou veličinu $M^k_{ij}(t)$ definovanou jako

$$M^k_{ij}(t) = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\Big[R_k(t)\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\Big],$$

neboť podle Věty 1.4 platí

$$\widetilde{M}^k_{ij}(t) = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_k(t)|X(t)=j,X(0)=i\right] = \frac{\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_k(t)\mathbb{I}(X(t)=j)|X(0)=i\right]}{P(X(t)=j|X(0)=i)} =$$
$$= \frac{M^k_{ij}(t)}{p_{ij}(t)} = \frac{M^k_{ij}(t)}{\left(\exp(t\mathbf{Q})\right)_{ij}} = \frac{M^k_{ij}(t)}{\mathbf{e}_i^T\exp(t\mathbf{Q})\mathbf{e}_j}. \tag{3.5}$$

Analogicky také stačí spočítat veličinu $f^{kl}_{ij}(t)$ definovanou jako

$$f^{kl}_{ij}(t) = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\Big[N_{kl}(t)\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\Big],$$

neboť můžeme provést následující úpravu

$$\widetilde{f}^{kl}_{ij}(t) = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{kl}(t)|X(t)=j,X(0)=i\right] = \frac{\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{kl}(t)\mathbb{I}(X(t)=j)|X(0)=i\right]}{P(X(t)=j|X(0)=i)} =$$
$$= \frac{f^{kl}_{ij}(t)}{p_{ij}(t)} = \frac{f^{kl}_{ij}(t)}{\left(\exp(t\mathbf{Q})\right)_{ij}} = \frac{f^{kl}_{ij}(t)}{\mathbf{e}_i^T\exp(t\mathbf{Q})\mathbf{e}_j}. \tag{3.6}$$

3.1.1 Výpočet pomocí diferenciálních rovnic

Nejprve uvedeme pomocné tvrzení, které následně využijeme při hledání vyjádření funkcí M_{ij}^k a f_{ij}^{kl}.

Lemma 3.2. *([2], Theorem 2.1) Nechť $\boldsymbol{s} = (s_1, \ldots, s_m)^T$ je vektor reálných čísel a $\boldsymbol{Z} = (z_{ab})_{a,b=1}^m$ je reálná $m \times m$ matice s jedničkami na diagonále. Označme následující podmíněnou střední hodnotu*

$$V_{ij}^*(\boldsymbol{s},\boldsymbol{Z},t) = \mathsf{E}\left[\exp\left(-\sum_{l=1}^m s_l R_l(t)\right)\prod_{a,b=1}^m z_{ab}^{N_{ab}(t)}\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right], \quad t \geq 0.$$

Pak platí, že

$$V^*(\boldsymbol{s},\boldsymbol{Z},t) = \exp\Big(\big[\boldsymbol{Q} * \boldsymbol{Z} - diag(\boldsymbol{s})\big]t\Big), \tag{3.7}$$

kde $*$ značí Hadamardův součin, tedy $(\boldsymbol{Q} * \boldsymbol{Z})_{ab} = (\boldsymbol{Q})_{ab}(\boldsymbol{Z})_{ab}$.

Důkaz. Důkaz lemmatu je kvůli své délce a náročnosti zařazen na konec práce, do Přílohy 1, str. 64.

❑

Věta 3.3. *([4], Theorem 2)Funkce M_{ij}^k je řešením diferenciální rovnice*

$$\frac{d}{dt}M_{ij}^k(t) = \sum_{l=1}^m M_{il}^k(t)q_{lj} + \exp(t\boldsymbol{Q})_{ij}\delta_{jk}$$

s počáteční podmínkou $M_{ij}^k(0) = 0$.

Důkaz. Nechť $i,j,k \in \{1,\ldots,m\}$ a $t \geq 0$. Využijeme Lemmatu 3.2 se speciální volbou jednotlivých proměnných, kde

- $s_k = s$,
- $s_h = 0$, $h \neq k$,
- $z_{ab} = 1$, pro všechna $a,b = 1,\ldots,m$.

Vztah (3.7) pak můžeme upravit následujícím způsobem

$$V_{ij}^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) = \mathsf{E}\left[e^{-sR_k(t)}\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right] = \left(e^{(\mathbf{Q}-\mathbf{S})t}\right)_{ij},$$

kde $\mathbf{S}$ značí matici s jediným nenulovým prvkem s na souřadnicích $k \times k$. Obě strany rovnice zderivujeme vzhledem k s a dosadíme $s = 0$.

$$\mathsf{E}\left[-R_k(t)e^{-sR_k(t)}\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right] = \left(-e^{(\mathbf{Q}-\mathbf{S})t}(\mathbf{1}_{kk}t)\right)_{ij},$$
$$\mathsf{E}\left[-R_k(t)\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right] = \left(-e^{\mathbf{Q}t}(\mathbf{1}_{kk}t)\right)_{ij},$$

Přenásobením rovnice hodnotou (-1), pak na levé straně dostáváme vyjádření veličiny $M_{ij}^k(t)$.

$$M_{ij}^k(t) = \mathsf{E}\left[R_k(t)\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right] = \left(e^{\mathbf{Q}t}(\mathbf{1}_{kk}t)\right)_{ij}.$$

Celou rovnici nyní zderivujeme vzhledem k t a dostáváme

$$\frac{d}{dt}M_{ij}^k(t) = \left(e^{\mathbf{Q}t}(\mathbf{1}_{kk}t\mathbf{Q})\right)_{ij} + \left(e^{\mathbf{Q}t}\mathbf{1}_{kk}\right)_{ij} = \sum_{h=1}^{m} M_{ih}^k(t)q_{hj} + \big(\exp(t\mathbf{Q})\big)_{ij}\delta_{jk}.$$

Navíc platí

$$M_{ij}^k(0) = \left(e^{\mathbf{Q}0}\left(\mathbf{1}_{kk}0\right)\right)_{ij} = 0.$$

❑

Věta 3.4. *([4], Theorem 3)Funkce f_{ij}^{kl} je řešením diferenciální rovnice*

$$\frac{d}{dt}f_{ij}^{kl}(t) = \sum_{h=1}^{m} f_{ih}^{kl}(t)q_{hj} + q_{kl}\exp(t\boldsymbol{Q})_{ik}\delta_{jl}$$

s počáteční podmínkou $f_{ij}^{kl}(0) = 0$.

Důkaz. Nechť $i,j,k,l \in \{1,\ldots,m\}$, kde $k \neq l$ a nechť $t \geq 0$. Opět využijeme Lemmatu 3.2 se speciální volbou jednotlivých proměnných, kde

- $\mathbf{s} = (0,\ldots,0)^T$,
- $z_{ab} = 1$ pro $a,b = 1,\ldots,m$, $(a,b) \neq (k,l)$
- $z_{ab} = z$ pro $(a,b) = (k,l)$.

Vztah (3.7) tedy upravíme

$$V_{ij}^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) = \mathsf{E}\left[z^{N_{kl}(t)}\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right] = \left(e^{(\mathbf{Q}*\mathbf{Z})t}\right)_{ij}.$$

Obě strany rovnice zderivujeme vzhledem k z a dosadíme $z = 1$, tím na levé straně získáme vyjádření veličiny $f_{ij}^{kl}(t)$.

$$\mathsf{E}\left[N_{kl}(t)z^{N_{kl}(t)-1}\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right] = \left(e^{(\mathbf{Q}*\mathbf{Z})t}\left(\mathbf{Q}*\mathbf{1}_{kl}\right)t\right)_{ij},$$
$$\mathsf{E}\left[N_{kl}(t)\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right] = f_{ij}^{kl}(t) = \left(e^{\mathbf{Q}t}\left(\mathbf{Q}*\mathbf{1}_{kl}\right)t\right)_{ij}.$$

Nakonec rovnici zderivujeme vzhledem k t a máme

$$\frac{d}{dt}f_{ij}^{kl}(t) = \Big(e^{\mathbf{Q}t}\big(\left(\mathbf{Q}*\mathbf{1}_{kl}\right)t\big)\mathbf{Q}\Big)_{ij} + \left(e^{\mathbf{Q}t}\left(\mathbf{Q}*\mathbf{1}_{kl}\right)\right)_{ij} =$$
$$= \sum_{h=1}^{m} f_{ih}^{kl}(t)q_{hj} + q_{kl}\exp(t\mathbf{Q})_{ik}\delta_{jl}.$$

Počáteční podmínka pro diferenciální rovnici je

$$f_{ij}^{kl}(0) = \left(e^{\mathbf{Q}0}\left(\mathbf{Q}\mathbf{1}_{kl}\right)0\right)_{ij} = 0.$$

❑

Pro nalezení $M_{ij}^{k}(t)$ a $f_{ij}^{kl}(t)$ můžeme tedy řešit soustavu diferenciálních rovnic z Vět 3.3 a 3.4, a to např. numerickou Runge-Kuttovou metodou. V následující kapitole uvedeme ale ještě druhou možnost výpočtu, tzv. uniformizační metodu.

3.1.2 Uniformizační metoda

Než přistoupíme k popisu metody samotné, uvedeme zde dvě pomocná tvrzení, týkající se Dirichletova a beta rozdělení. Ta následně využijeme k důkazu klíčových vztahů z uniformizační metody.

Lemma 3.5. *([5], Section 2.3) Nechť W_1, W_2, ..., W_{n+1} jsou nezávislé náhodné veličiny, takové, že $W_i \sim \Gamma(\lambda,\alpha_i)$, $\alpha_i > 0$, $i = 1,\ldots,n+1$, $\lambda > 0$. Označme dále*

$$S_{n+1} = \sum_{i=1}^{n+1} W_i, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_i \\ \vdots \\ \alpha_{n+1} \end{pmatrix}.$$

Pak

$$\left(\frac{W_1}{S_{n+1}}, \frac{W_2}{S_{n+1}}, \ldots, \frac{W_{n+1}}{S_{n+1}}\right)^T \sim \ Dir(\boldsymbol{\alpha}),$$

kde $Dir(\boldsymbol{\alpha})$ značí Dirichletovo rozdělení s vektorovým parametrem $\boldsymbol{\alpha}$.

Důkaz. Náhodná veličina S_{n+1} je součtem nezávislých náhodných veličin W_i s rozdělením $\Gamma(\lambda,\alpha_i)$, tedy $S_{n+1} \sim \Gamma\left(\lambda, \sum_{i=1}^{n+1}\alpha_i\right)$ a její hustota je

$$f_S(z) = \frac{\lambda^{\alpha_1+\cdots+\alpha_{n+1}}}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^{n+1}\alpha_i\right)} z^{\alpha_1+\ldots\alpha_{n+1}-1}\ e^{-\lambda z}, \quad z \geq 0. \tag{3.8}$$

K důkazu dále využijeme Větu 1.6 str. 8, o transformaci náhodných vektorů, s následující volbou transformační funkce g

$$\begin{pmatrix} Z \\ U_1 \\ \vdots \\ U_n \end{pmatrix} := g\left(\begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ \vdots \\ W_{n+1} \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} S_{n+1} \\ \frac{W_1}{S_{n+1}} \\ \vdots \\ \frac{W_n}{S_{n+1}} \end{pmatrix},$$

kde $Z \geq 0$ s.j., $U_i \in (0,1)$ s.j. a $\sum_{i=1}^{n} U_i < 1$ s.j. Vyjádříme odpovídající inverzní transformaci

$$\begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ \vdots \\ W_{n+1} \end{pmatrix} = g^{-1}\left(\begin{pmatrix} Z \\ U_1 \\ \vdots \\ U_n \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} U_1 Z \\ \vdots \\ U_n Z \\ \left(1 - \sum_{i=1}^{n} U_i\right) Z \end{pmatrix}.$$

Spočítáme jakobián inverzní transformace pomocí rozvoje podle prvního řádku, resp. prvního sloupce.

$$J_{g^{-1}} = \begin{vmatrix} u_1 & z & 0 & \dots & 0 \\ u_2 & 0 & z & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \\ u_n & 0 & 0 & \dots & z \\ 1-\sum_{i=1}^n u_i & -z & -z & \dots & -z \end{vmatrix} =$$

$$= u_1 \begin{vmatrix} 0 & z & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & z \\ -z & -z & \dots & -z \end{vmatrix} - z \begin{vmatrix} u_2 & z & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ u_n & 0 & \dots & z \\ 1-\sum_{i=1}^n u_i & -z & \dots & -z \end{vmatrix} =$$

$$= u_1(-1)^{n+1}(-z) \begin{vmatrix} z & 0 & \dots & 0 \\ 0 & z & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & z \end{vmatrix} - z \begin{vmatrix} u_2 & z & \dots & 0 \\ \vdots & & & \\ u_n & 0 & \dots & z \\ 1-\sum_{i=1}^n u_i & -z & \dots & -z \end{vmatrix} =$$

$$= u_1(-1)^n z^n - z\left(u_2(-1)^{n-1}z^{n-1} - z\left(u_3(-1)^{n-2}z^{n-2} - \dots\right.\right. =$$

$$= u_1(-1)^n z^n + u_2(-1)^n z^n + \dots + u_n(-1)^n z^n + \left(1 - \sum_{i=1}^n u_i\right)(-1)^n z^n =$$

$$= (-1)^n z^n.$$

Tedy v absolutní hodnotě je $|J_{g^{-1}}| = z^n$, neboť náhodná veličina Z nabývá skoro jistě nezáporných hodnot. Hustota náhodného vektoru $(W_1,\dots,W_{n+1})^T$ je díky nezávislosti jednotlivých marginál součinem $n+1$ hustot gamma rozdělení.

$$f(w_1,\dots,w_{n+1}) = \frac{\lambda^{\alpha_1}}{\Gamma(\alpha_1)} w_1^{\alpha_1-1} e^{-\lambda w_1} \dots \frac{\lambda^{\alpha_{n+1}}}{\Gamma(\alpha_{n+1})} w_{n+1}^{\alpha_{n+1}-1} e^{-\lambda w_{n+1}} =$$

$$= \frac{\lambda^{\alpha_1+\dots\alpha_{n+1}}}{\prod_{i=1}^{n+1}\Gamma(\alpha_i)} w_1^{\alpha_1-1} \dots w_{n+1}^{\alpha_{n+1}-1}\ e^{-\lambda(w_1+\dots+w_{n+1})},$$

$$w_i \geq 0,\ i = 1,\dots,n+1.$$

Po transformaci tedy dostáváme hustotu

$$f(z,u_1,\dots,u_n) =$$

$$= \frac{\lambda^{\alpha_1+\dots\alpha_{n+1}}}{\prod_{i=1}^{n+1}\Gamma(\alpha_i)} (u_1 z)^{\alpha_1-1} \dots (u_n z)^{\alpha_n-1} \left(z\left(1-\sum_{i=1}^n u_i\right)\right)^{\alpha_{n+1}-1} e^{-\lambda z}\ z^n =$$

$$= \frac{\lambda^{\alpha_1+\dots\alpha_{n+1}}}{\prod_{i=1}^{n+1}\Gamma(\alpha_i)} u_1^{\alpha_1-1} \dots u_n^{\alpha_n-1} \left(1-\sum_{i=1}^n u_i\right)^{\alpha_{n+1}-1} e^{-\lambda z}\ z^{\alpha_1+\dots+\alpha_n-1},$$

$$z \geq 0,\ u_i \in (0,1),\ i = 1,\dots,n,\ \sum_{i=1}^n u_i < 1. \quad (3.9)$$

Ze znalosti hustoty (3.8) pro $Z = S_{n+1}$ můžeme funkci (3.9) rozložit na součin dvou hustot, z nichž jedna odpovídá náhodné veličině Z a druhá náhodnému vektoru $(U_1,\ldots,U_n)^T$.

$$f(z,u_1,\ldots,u_n) =$$
$$= \frac{\lambda^{\alpha_1+\ldots\alpha_{n+1}}}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^{n+1}\alpha_i\right)} z^{\alpha_1+\cdots+\alpha_n-1} e^{-\lambda z} \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^{n+1}\alpha_i\right)}{\prod_{i=1}^{n+1}\Gamma(\alpha_i)} u_1^{\alpha_1-1}\ldots u_n^{\alpha_n-1}\left(1-\sum_{i=1}^{n}u_i\right)^{\alpha_{n+1}-1},$$
$$z \geq 0,\ u_i \in (0,1),\ i = 1,\ldots,n,\ \sum_{i=1}^{n} u_i < 1.$$

Tedy Z a $(U_1,\ldots,U_n)^T$ jsou tedy navzájem nezávislé a hustota tohoto náhodného vektoru je

$$f(u_1,\ldots,u_n) = \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^{n+1}\alpha_i\right)}{\prod_{i=1}^{n+1}\Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^{n} u_i^{\alpha_i-1}\left(1-\sum_{i=1}^{n}u_i\right)^{\alpha_{n+1}-1},$$
$$u_i \in (0,1),\ i = 1,\ldots,n,\ \sum_{i=1}^{n} u_i < 1.$$

Navíc platí, že $U_{n+1} = \frac{W_{n+1}}{S_{n+1}} = 1 - \sum_{i=1}^{n} U_n$, takže

$$f(u_1,\ldots,u_{n+1}) = \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^{n+1}\alpha_i\right)}{\prod_{i=1}^{n+1}\Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^{n+1} u_i^{\alpha_i-1},$$
$$u_i \in (0,1),\ i = 1,\ldots,n+1,\ \sum_{i=1}^{n+1} u_i = 1,$$

což je hustota rozdělení $Dir(\boldsymbol{\alpha})$.

❑

Lemma 3.6. *([5], Section 2.2) Nechť $(U_1,\ldots,U_n)^T$ je náhodný vektor s rozdělením $Dir(\boldsymbol{\alpha})$, kde $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1,\ldots,\alpha_{n+1})^T$. Součet prvků vektoru $\boldsymbol{\alpha}$ označme A. Pak marginální rozdělení náhodné veličiny U_i pro $i = 1,\ldots,n$ je $B(\alpha_i, A-\alpha_i)$, kde $B(\alpha,\beta)$ značí beta rozdělení s parametry α a β.*

Důkaz. Sdružená hustota náhodného vektoru s Dirichletovým rozdělením určeným parametrem $\boldsymbol{\alpha}$ je

$$f(u_1,\ldots,u_n) = \frac{\Gamma(A)}{\prod_{i=1}^{n+1}\Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^{n} u_i^{\alpha_i-1}\left(1-\sum_{i=1}^{n}u_i\right)^{\alpha_{n+1}-1},$$
$$u_i \in (0,1),\ i = 1,\ldots,n,\ \sum_{i=1}^{n} u_i < 1.$$

Pro náhodnou veličinu U_1 je tedy marginální hustota

$$f(u_1) = \\ = \int_0^{1-u_1} \dots \int_0^{1-\sum_{i=1}^{n-1} u_i} \frac{\Gamma(A)}{\prod_{i=1}^{n+1} \Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^{n} u_i^{\alpha_i - 1} \left(1 - \sum_{i=1}^{n} u_i\right)^{\alpha_{n+1}-1} du_n \dots du_2, \\ u_1 \in (0,1).$$

Provedeme substituci $u_n = v_n(1 - u_1 - \dots - u_{n-1})$ a dostáváme

$$f(u_1) = \int_0^{1-u_1} \dots \int_0^{1-u_1-\dots-u_{n-2}} \int_0^1 \frac{\Gamma(A)}{\prod_{i=1}^{n+1} \Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^{n-1} u_i^{\alpha_i - 1} \cdot \\ \cdot \left(1 - \sum_{i=1}^{n-1} u_i\right)^{\alpha_{n+1}+\alpha_n-1} v_n^{\alpha_n - 1}(1 - v_n)^{\alpha_{n+1}-1} \, dv_n \, du_{n-1} \dots du_2, \quad u_1 \in (0,1).$$

Využijeme znalost tvaru hustoty rozdělení $B(\alpha_n,\alpha_{n+1})$, jejíž integrování přes interval (0,1) dává 1, a odstraníme tím vnitřní integrál podle proměnné v_n.

$$f(u_1) = \int_0^{1-u_1} \dots \int_0^{1-u_1-\dots-u_{n-2}} \frac{\Gamma(A)}{\prod_{i=1}^{n-1} \Gamma(\alpha_i)\,\Gamma(\alpha_n + \alpha_{n+1})} \prod_{i=1}^{n-1} u_i^{\alpha_i - 1} \cdot \\ \cdot \left(1 - \sum_{i=1}^{n-1} u_i\right)^{\alpha_{n+1}+\alpha_n-1} du_{n-1} \dots du_2, \quad u_1 \in (0,1).$$

Analogický postup aplikujeme i na zbylé integrály. Dostáváme výsledek

$$f(u_1) = \frac{\Gamma(A)}{\Gamma(\alpha_1)\,\Gamma(A - \alpha_1)} u_1^{\alpha_1 - 1} (1 - u_1)^{A - \alpha_1 - 1}, \quad u_1 \in (0,1),$$

což je hustota rozdělení $B(\alpha_1,A - \alpha_1)$. Ze symetrie hustoty $f(u_1,\dots,u_n)$ vzhledem k jednotlivým proměnným pak vyplývá, že $U_i \sim B(\alpha_i,A - \alpha_i)$, $i = 1,\dots,n$. ❑

Nyní již přistoupíme k samotné uniformizační metodě. Podrobný popis této metody lze nalézt v textu [7]. Prvotním cílem při utváření metody bylo nalézt vhodný vzorec pro výpočet matice pravděpodobností přechodu $\mathbf{P}(t)$. Nechť $\mathbf{Q} = (q_{ij})_{i,j=1}^{m}$ je matice intenzit, $\lambda \geq max\{-q_{ii},\, i = 1,\dots,m\}$ a $\mathbf{B} = (b_{ij})_{i,j=1}^{m}$ je matice definovaná vztahem

$$\mathbf{B} = \mathbf{I} + \frac{1}{\lambda}\mathbf{Q}.$$

Zde vidíme, že omezení pro λ bylo voleno tak, aby matice $\mathbf{B}$ splňovala definici matice pravděpodobností přechodu. Pak můžeme vyjádřit

$$\mathbf{P}(t) = \exp(\mathbf{Q}t) = \exp\left(\lambda(\mathbf{B} - \mathbf{I})t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{B}^n \frac{(\lambda t)^n}{n!} \, e^{-\lambda t}.$$

V praxi se tedy pro aproximaci může využít konečné sumy s dostatečně velkým počtem sčítanců K

$$\mathbf{P}(t) \approx \sum_{n=0}^{K} \mathbf{B}^n \frac{(\lambda t)^n}{n!} \, e^{-\lambda t}.$$

Kromě tohoto závěru ale získáváme zcela jiný postup konstrukce Markovova procesu se spojitým časem, pomocí kterého budeme právě moci explicitně vyjádřit funkce $M_{ij}^k(t)$ i $f_{ij}^{kl}(t)$. Nechť $T_0 = 0, T_1, T_2, \ldots$ jsou časy událostí Poissonova procesu s parametrem $\lambda > 0$. Nechť $\{z_0,z_1,z_2,\ldots\}$ je Markovův řetězec s diskrétním časem a s maticí pravděpodobností přechodu $\mathbf{B}$, nezávislý na časech T_k, $k \in \mathbb{N}_0$. Nyní definujeme proces se spojitým časem $\{v(t),\, t \geq 0\}$ následovně

$$v(t) = z_k, \quad T_k \leq t < T_{k+1}.$$

Pak zřejmě jde o Markovův řetězec se spojitým časem a intenzitami přechodu $q_{ij} = \lambda\, b_{ij}$, pro $i,j = 1,\ldots,m$, $i \neq j$, tedy proces, ke kterému jsme se chtěli dopracovat. Nechť $T > 0$, najdeme největší $J \in \mathbb{N}$ takové, že $T_J < T$. Celkovou dobu setrvání v jednotlivých stavech a počty přeskoků mezi stavy můžeme přepsat takto

$$R_k(T) = \sum_{i=0}^{J} \mathbb{I}(z_i = k)(T_{i+1} - T_i), \quad k = 1,\ldots,m, \tag{3.10}$$

$$N_{kl}(T) = \sum_{i=1}^{J} \mathbb{I}\big((z_{i-1},z_i) = (k,l)\big), \quad k,l = 1,\ldots,m,\ k \neq l, \tag{3.11}$$

kde $T_{J+1} = T$. Vztahy (3.10) a (3.11) pak lze shrnout do jediného

$$H = \psi(z_0)f(T_1) + \sum_{i=1}^{J} \Phi(z_{i-1},z_i)f(T_{i+1} - T_i), \tag{3.12}$$

s následujícími volbami funkcí

- $f(t) = t$ a $\Phi(z_1,z_2) = \psi(z_2) = \mathbb{I}(z_2 = k)$ pro $R_k(T)$,
- $f \equiv 1$, $\psi(z) \equiv 0$ a $\Phi(z_1,z_2) = \mathbb{I}\left((z_1,z_2) = (k,l)\right)$ pro $N_{kl}(T)$.

Naším cílem je spočítat podmíněnou střední hodnotu $\mathsf{E}\,[H\ \mathbb{I}(v(T) = b)|v(0) = a]$, neboť tím získáme zároveň vyjádření pro veličinu $\mathsf{E}\,[R_k(T)\mathbb{I}(v(T) = b)|v(0) = a]$ i $\mathsf{E}\,[N_{kl}(T)\mathbb{I}(v(T) = b)|v(0) = a]$.

Definujeme pomocnou matici $\mathbf{M}(n) = (M_{ab}(n))_{a,b=1}^m$ vztahem

$$M_{ab}(n) = \mathsf{E}\left[\mathbb{I}(z_n = b)\left(\psi(z_0) + \sum_{i=1}^{m} \Phi(z_{i-1},z_i)\right)|z_0 = a\right]$$

Označíme matici $\mathbf{\Phi} = (\Phi(a,b))_{a,b=1}^m$ a dále $diag(\boldsymbol{\psi})$ pro nás bude značit diagonální matici s vektorem $(\psi(1),\ldots,\psi(m))^T$ na diagonále. Dále nechť

$$\delta(n,T,f) = \mathsf{E}\ \big(f(TU)\big),$$

kde U je náhodná veličina s beta rozdělením $B(1,n)$.

Lemma 3.7. *([7], Theorem 1)Nechť H je veličina definovaná vztahem* (3.12)*. Potom platí*

$$\mathsf{E}\left[H\ \mathbb{I}\big(v(T) = b\big)|v(0) = a\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \delta(n,T,f)\ M_{ab}(n)\ e^{-\lambda T}\frac{(\lambda T)^n}{n!}.$$

Matice $\boldsymbol{M}(n)$ *je dána rekurzí*

$$\boldsymbol{M}(n) = \boldsymbol{M}(n-1)\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^{n-1}(\boldsymbol{\Phi} * \boldsymbol{B}), \quad n \geq 1. \tag{3.13}$$

S počáteční podmínkou $\boldsymbol{M}(0) = diag(\boldsymbol{\psi})$. *Její řešení je*

$$\boldsymbol{M}(n) = diag(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{B}^n + \sum_{h=0}^{n-1} \boldsymbol{B}^l(\boldsymbol{\Phi} * \boldsymbol{B})\boldsymbol{B}^{n-1-h}. \tag{3.14}$$

Důkaz. Pro dané $J = n$, časy událostí Poissonova procesu $T_0 = 0$, T_1, ..., T_n a $T_{n+1} = T$ definujme náhodné veličiny $W_i = T_i - T_{i-1}$, $i = 1,\ldots,n+1$. Pak W_1, W_2, ..., W_{n+1} jsou nezávislé náhodné veličiny s rozdělením $Exp(\lambda)$ a jejich součet S_{n+1} má rozdělení $\Gamma(\lambda,n+1)$. Podle Lemmatu 3.5 je

$$\left(\frac{W_1}{S_{n+1}},\frac{W_2}{S_{n+1}},\ldots,\frac{W_{n+1}}{S_{n+1}}\right)^T \sim \; Dir\left((1,\ldots,1)^T\right).$$

Marginální rozdělení složek vektoru, tedy rozdělení náhodných veličin $\frac{W_i}{S_{n+1}}$, kde $i = 1,\ldots,n+1$, jsou $B(1,n)$ podle Lemmatu 3.6. Navíc podmíněné rozdělení vektoru $(T_1,T_2 - T_1,\ldots,T_{n+1} - T_n)^T$ při daném $J = n$ je stejné jako podmíněné rozdělení vektoru $(W_1,W_2,\ldots,W_{n+1})^T$ při daném $S_{n+1} = T$. Dohromady dostáváme

$$\left(\frac{W_1}{T},\frac{W_2}{T},\ldots,\frac{W_{n+1}}{T}\right)^T | S_{n+1} = T \;\sim\; Dir\left((1,\ldots,1)^T\right),$$

$$\frac{W_i}{S_{n+1}} \;\sim\; \frac{W_i}{T} | S_{n+1} = T \;\sim\; B(1,n).$$

Nyní aplikujeme uniformizační metodu.

$$\begin{aligned}
&\mathsf{E}\,[H\ \mathbb{I}(v(T) = b)|v(0) = a,J = n] = \\
&= \mathsf{E}\left[\left(\psi(z_0)f(T_1) + \sum_{i=1}^{J} \Phi(z_{i-1},z_i)f(T_{i+1} - T_i)\right) \cdot \right. \\
&\qquad\qquad \left. \cdot\, \mathbb{I}(v(T) = b)|v(0) = a,J = n\right] = \\
&= \mathsf{E}\left[\left(\psi(z_0)f(W_1) + \sum_{i=1}^{n} \Phi(z_{i-1},z_i)f(W_{i+1})\right) \mathbb{I}(z_n = b)|z_0 = a,S_{n+1} = T\right] = \\
&= \delta(n,T,f)\,\mathsf{E}\left[\mathbb{I}(z_n = b)\left(\psi(z_0) + \sum_{i=1}^{n} \Phi(z_{i-1},z_i)\right)|z_0 = a\right] = \\
&= \delta(n,T,f)\ M_{ab}(n).
\end{aligned} \tag{3.15}$$

S využitím vztahu (3.15) tedy dostáváme

$$\begin{aligned}
&\mathsf{E}\left[H\ \mathbb{I}\big(v(T) = b\big)|v(0) = a\right] = \mathsf{E}\left[\mathsf{E}\left[H\ \mathbb{I}\big(v(T) = b\big)|v(0) = a,J\right]\right] = \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \mathsf{E}\left[H\ \mathbb{I}\big(v(T) = b\big)|v(0) = a,J = n\right] P(J = n) = \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \delta(n,T,f)\ M_{ab}(n)\ e^{-\lambda T}\frac{(\lambda T)^n}{n!}.
\end{aligned}$$

Zřejmě platí

$$M_{ab}(0) = \mathsf{E}\left[\psi(z_0)\mathbb{I}(z_0 = b)|z_0 = a\right] = \psi(a)\mathbb{I}(a = b).$$

Pro $n \geq 1$ odvodíme rekurentní vztah

$$M_{ab}(n) = \mathsf{E}\left[\mathbb{I}(z_n = b)\left(\psi(z_0) + \sum_{i=1}^{n}\Phi(z_{i-1},z_i)\right)|z_0 = a\right] =$$
$$= \sum_{c=1}^{m}\mathsf{E}\left[\mathbb{I}(z_n = b)\mathbb{I}(z_{n-1} = c)\left(\psi(z_0) + \sum_{i=1}^{n-1}\Phi(z_{i-1},z_i) + \Phi(z_{n-1},z_n)\right)|z_0 = a\right] =$$
$$= \sum_{c=1}^{m} M_{ac}(n-1)\mathbf{B}_{cb} + \sum_{c=1}^{m}(\mathbf{B}^{n-1})_{ac}\Phi(c,b)\mathbf{B}_{cb}.$$

Pak maticový zápis této rekurze je (3.13) a jejím řešením je (3.14).

❑

Nyní uvedený postup využijeme při hledání $M_{ij}^k(t)$ a $f_{ij}^{kl}(t)$ v našem původním modelu. Zvolíme tedy $\lambda \geq max\{-q_{ii},\, i = 1,\ldots,m\}$ a matici

$$\mathbf{B} = \mathbf{I} + \frac{1}{\lambda}\mathbf{Q},$$

pak víme z principu uniformizační metody, že Lemma 3.7 můžeme aplikovat i na náš pozorovaný proces $X(t)$.

Věta 3.8. *([7], Corollary 2)Veličinu $M_{ij}^k(t)$ můžeme spočítat následovně*

$$M_{ij}^k(t) = e^{-\lambda t}\frac{1}{\lambda}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\lambda t)^{n+1}}{(n+1)!}\sum_{h=0}^{n}\left(\boldsymbol{B}^h\right)_{ik}\left(\boldsymbol{B}^{n-h}\right)_{kj}.$$

Důkaz. Připomeňme, že funkce $M_{ij}^k(t)$ je definována jako

$$M_{ij}^k(t) = \mathsf{E}\left[R_k(t)\mathbb{I}\big(X(t) = j\big)|X(0) = i\right],$$

využijeme Lemma 3.7 s takovou volbou jednotlivých funkcí, aby $H = R_k(t)$, tedy $T = t$, $f(t) = t$ a

$$\boldsymbol{\Phi} = \Big(\Phi(a,b)\Big)_{a,b=1}^{m} = \Big(\mathbb{I}\,(b = k)\Big)_{a,b=1}^{m} = \mathbf{1}_{\cdot k},$$
$$diag(\boldsymbol{\psi}) = diag\Big(\big(\psi(1),\ldots,\psi(m)\big)^T\Big) = diag\Big(\big(\mathbb{I}(1 = k),\ldots,\mathbb{I}(m = k)\big)^T\Big) = \mathbf{1}_{kk},$$
$$\delta(n,T,f) = \mathsf{E}\,\big(f(TU)\big) = \mathsf{E}\left[f\left(T\frac{W_1}{T}\right)|S_{n+1} = T\right] = T\,\mathsf{E}\left[\frac{W_1}{T}|S_{n+1} = T\right] =$$
$$= \frac{T}{n+1},$$

kde $\mathbf{1}_{\cdot k}$ značí matici s jediným nenulovým k-tým sloupcem, ve kterém jsou všechny prvky rovné 1.

Po dosazení dostáváme

$$M_{ij}^k(t) = \mathsf{E}\left[H\ \mathbb{I}\big(v(t)=j\big)|v(0)=i\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t}{n+1}\ M_{ij}(n)\ \frac{(\lambda t)^n}{n!}\ e^{-\lambda t} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t}{n+1} \left(\mathbf{1}_{kk}\ \mathbf{B}^n + \sum_{h=0}^{n-1} \mathbf{B}^h\ (\mathbf{1}_{.k} * \mathbf{B})\ \mathbf{B}^{n-1-h}\right)_{ij} \frac{(\lambda t)^n}{n!}\ e^{-\lambda t} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t}{n+1} \left(\sum_{h=0}^{n} (\mathbf{B}^h)_{ik} (\mathbf{B}^{n-h})_{kj}\right) \frac{(\lambda t)^n}{n!}\ e^{-\lambda t} =$$
$$= e^{-\lambda t} \frac{1}{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^{n+1}}{(n+1)!} \sum_{h=0}^{n} \left(\mathbf{B}^h\right)_{ik} \left(\mathbf{B}^{n-h}\right)_{kj}.$$

❑

Věta 3.9. *([7], Corollary 3)Veličinu $f_{ij}^{kl}(t)$ můžeme spočítat následovně*

$$f_{ij}^{kl}(t) = q_{kl}\ e^{-\lambda t}\ \frac{1}{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^{n+1}}{(n+1)!} \sum_{h=0}^{n} \left(\boldsymbol{B}^h\right)_{ik} \left(\boldsymbol{B}^{n-h}\right)_{lj}.$$

Důkaz. Při důkazu budeme postupovat naprosto analogicky jako u Věty 3.8. Připomeňme, že funkce $f_{ij}^{kl}(t)$ je definována jako

$$f_{ij}^{kl}(t) = \mathsf{E}\left[N_{kl}(t)\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right],$$

využijeme Lemma 3.7 s takovou volbou jednotlivých funkcí, aby $H = N_{kl}(t)$, tedy $T = t$, $f \equiv 1$ a

$$\boldsymbol{\Phi} = \Big(\Phi(a,b)\Big)_{a,b=1}^{m} = \Big(\mathbb{I}\big((a,b)=(k,l)\big)\Big)_{a,b=1}^{m} = \mathbf{1}_{kl},$$
$$diag(\boldsymbol{\psi}) = diag\Big(\big(\psi(1),\ldots,\psi(m)\big)^T\Big) = diag\left((0,\ldots,0)^T\right) = \mathbf{0},$$
$$\delta(n,T,f) = \mathsf{E}\left(f(TU)\right) = \mathsf{E}\left[f\left(T\frac{W_1}{T}\right)|S_{n+1}=T\right] = \mathsf{E}\left[1|S_{n+1}=T\right] = 1.$$

Po dosazení dostáváme

$$f_{ij}^{kl}(t) = \mathsf{E}\left[H\ \mathbb{I}\big(v(t)=j\big)|v(0)=i\right] = \sum_{n=0}^{\infty} M_{ij}(n)\ \frac{(\lambda t)^n}{n!}\ e^{-\lambda t} =$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{h=0}^{n-1} \mathbf{B}^h \mathbf{B}_{kl} \mathbf{B}^{n-1-h}\right)_{ij} \frac{(\lambda t)^n}{n!}\ e^{-\lambda t} =$$
$$= e^{-\lambda t}\ q_{kl}\ \frac{1}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{h=0}^{n-1} (\mathbf{B}^h)_{ik} (\mathbf{B}^{n-1-h})_{lj}\right) \frac{(\lambda t)^n}{n!} =$$
$$= e^{-\lambda t}\ q_{kl}\ \frac{1}{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^{n+1}}{(n+1)!} \sum_{h=0}^{n} \left(\mathbf{B}^h\right)_{ik} \left(\mathbf{B}^{n-h}\right)_{lj}.$$

❑

3.2 M-krok

V tomto kroku dochází k maximalizaci Q-funkce $\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]$ vzhledem ke $\mathbf{Q}$, což probíhá podle vztahu (2.3), str. 13. Dostáváme tedy odhady

$$\widehat{q}_{ij} = \frac{\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]}{\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]}, \quad i,j=1,\ldots,m,\ i\neq j.$$

3.3 Souhrn kroků algoritmu a konvergence

Samotný postup při odhadu matice intenzit $\widehat{\mathbf{Q}}$ pomocí EM algoritmu lze nalézt například v textu [4] a vypadá následovně.

Nechť $\mathbf{Q}_0$ je libovolně zvolená matice intenzit Markovova procesu se stavovým prostorem $\{1,2,\ldots,m\}$. Nechť $\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_0$.

1. V modelu s maticí intenzit $\mathbf{Q}$ spočítáme pro všechna $i,j=1,\ldots,m,\ i\neq j$ veličiny

$$M^i_{y_k y_{k+1}}(\Delta),\ f^{ij}_{y_k y_{k+1}}(\Delta), \quad k=1,\ldots,n-1,$$

pomocí Vět 3.3 a 3.4, pokud chceme numericky řešit diferenciální rovnice, nebo pomocí Vět 3.8 a 3.9, pokud chceme využít uniformizační metodu. Tyto veličiny následně upravíme na

$$\widetilde{M}^i_{y_k,y_{k+1}}(\Delta), \quad \widetilde{f}^{ij}_{y_k,y_{k+1}}(\Delta),$$

s využitím vztahů (3.5) a (3.6).

2. Spočítáme $\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]$, $\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]$ pro $i,j=1,\ldots,m,\ i\neq j$ pomocí rovnic (3.3) a (3.4).

3. Spočítáme pro všechna $i,j=1,\ldots,m,\ i\neq j$

$$\widehat{q}_{ij} = \frac{\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]}{\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]}, \quad \widehat{q}_{ii} = -\sum_{j\neq i}\widehat{q}_{ij}$$

a dostáváme další odhad matice intenzit $\widehat{\mathbf{Q}}$.

4. Nechť $\mathbf{Q} := \widehat{\mathbf{Q}}$, přejdeme zpět na krok **1**.

Jedná se o iterativní algoritmus, kde výstup z k-té iterace označíme jako $\mathbf{Q}_k$, $k\in\mathbb{N}$. Je třeba dále uvést podmínky, za kterých dojde k zastavení výpočtu. Běžně se kroky opakují, dokud pro malé $\epsilon>0$ nenastane jedna z následujících podmínek.

- Odhadnutá matice se dále příliš nemění ve smyslu maticové normy, tedy platí
$$\|\mathbf{Q}_{k+1}-\mathbf{Q}_k\|<\epsilon, \quad k\in\mathbb{N}_0.$$
- Logaritmická věrohodnostní funkce pro diskrétní pozorování se dále příliš nemění, tedy platí
$$|L_n(\mathbf{Q}_{k+1})-L_n(\mathbf{Q}_k)|<\epsilon, \quad k\in\mathbb{N}_0.$$

Nyní je třeba rozebrat otázku konvergence odhadu získaného pomocí EM algoritmu. Tuto teorii nalezneme podrobně rozebranou např. v [6] nebo [13]. Dokážeme nejprve větu o monotonii, která říká, že pro posloupnost odhadů $\{\mathbf{Q}_k\}$ a logaritmickou věrohodnostní funkci l_n platí následující nerovnost

$$l_n\left(\mathbf{Q}_{k+1}\right) \geq l_n\left(\mathbf{Q}_k\right).$$

Věta 3.10. *([6], Theorem 2.1) Nechť $\boldsymbol{X}$, $\boldsymbol{Y}$ jsou náhodné vektory a $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$ jsou jejich nosiče, kde $\boldsymbol{X}$ reprezentuje kompletní pozorovatelná data a $\boldsymbol{Y}$ reprezentuje měření. Nechť mají oba vektory hustoty závislé na parametru $\theta \in \Theta$. Předpokládejme, že nosič $\mathcal{X}$ nezávisí na θ a platí*

$$p\left(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x},\theta\right) = p\left(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x}\right), \quad \theta \in \Theta,\ \boldsymbol{y} \in \mathcal{Y},\ \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}.$$

Pak pro $\theta \in \Theta$ a jakékoliv $\boldsymbol{y} \in \mathcal{Y}$ takové, že $\mathcal{X}(\boldsymbol{y}) = \{\boldsymbol{x},\, p\left(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}\right) > 0\} \neq \emptyset$ platí

$$Q\left(\theta|\theta^{(k)}\right) \geq Q\left(\theta^{(k)}|\theta^{(k)}\right) \ \Rightarrow\ l\left(\theta\right) \geq l\left(\theta^{(k)}\right),$$

kde $l\left(\theta\right) = \log p\left(\boldsymbol{y}|\theta\right)$, Q je Q-funkce a $\theta^{(k)} \in \Theta$ je odhad parametru θ získaný z k-té iterace EM algoritmu.

Důkaz. Princip důkazu spočívá v tom, že postupnými úpravami funkce $l(\theta)$ nalezneme její odhad zdola, vyjádřený pomocí Q-funkce.

$$\begin{aligned}
&l(\theta) = \\
&= \log p(\mathbf{y}|\theta) = \log \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)\ d\mathbf{x} = \log \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} \frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)}{p\left(\mathbf{x}|\mathbf{y},\theta^{(k)}\right)}\, p\left(\mathbf{x}|\mathbf{y},\theta^{(k)}\right)\ d\mathbf{x} = \\
&= \log \mathsf{E}_{\theta^{(k)}}\left[\frac{p(\mathbf{X},\mathbf{y}|\theta)}{p\left(\mathbf{X}|\mathbf{y},\theta^{(k)}\right)}\ |\mathbf{y}\right] \geq \mathsf{E}_{\theta^{(k)}}\left[\log \frac{p(\mathbf{X},\mathbf{y}|\theta)}{p\left(\mathbf{X}|\mathbf{y},\theta^{(k)}\right)}\ |\mathbf{y}\right] = \qquad (3.16) \\
&= \mathsf{E}_{\theta^{(k)}}\left[\log \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{X},\theta)\ p(\mathbf{X}|\theta)\ p\left(\mathbf{y}|\theta^{(k)}\right)}{p\left(\mathbf{y}|\mathbf{X},\theta^{(k)}\right)\ p\left(\mathbf{X}|\theta^{(k)}\right)}\ |\mathbf{y}\right] = \\
&= \mathsf{E}_{\theta^{(k)}}\left[\log \frac{p(\mathbf{X}|\theta)\ p\left(\mathbf{y}|\theta^{(k)}\right)}{p\left(\mathbf{X}|\theta^{(k)}\right)}\ |\mathbf{y}\right] = \\
&= \mathsf{E}_{\theta^{(k)}}\left[\log p(\mathbf{X}|\theta)|\mathbf{y}\right] + \mathsf{E}_{\theta^{(k)}}\left[\log p\left(\mathbf{y}|\theta^{(k)}\right)|\mathbf{y}\right] - \mathsf{E}_{\theta^{(k)}}\left[\log p\left(\mathbf{X}|\theta^{(k)}\right)|\mathbf{y}\right] = \\
&= Q\left(\theta|\theta^{(k)}\right) + l\left(\theta^{(k)}\right) - Q\left(\theta^{(k)}|\theta^{(k)}\right).
\end{aligned}$$

V řádku (3.16) jsme využili Jensenovu nerovnost (Věta 1.5, str. 8). Tedy

$$l(\theta) \geq l\left(\theta^{(k)}\right) + Q\left(\theta|\theta^{(k)}\right) - Q\left(\theta^{(k)}|\theta^{(k)}\right) \geq l\left(\theta^{(k)}\right).$$

❑

Protože M-krok algoritmu hledá $\theta^{(k+1)} = argmax\ Q\left(\theta|\theta^{(k)}\right)$, pak určitě také platí

$$Q\left(\theta^{(k+1)}|\theta^{(k)}\right) \geq Q\left(\theta^{(k)}|\theta^{(k)}\right) \quad \Rightarrow \quad l\left(\theta^{(k+1)}\right) \geq l\left(\theta^{(k)}\right).$$

Větu 3.10 aplikujeme na naši konkrétní situaci, tedy parametr θ je pro nás matice intenzit $\mathbf{Q}$ a

$$l(\theta) = l_n(\mathbf{Q}), \quad Q\left(\theta|\theta^{(k)}\right) = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_k}\left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})|\mathbf{Y} = \mathbf{y}\right].$$

Dostáváme, že $l_n(\mathbf{Q}_{k+1}) \geq l_n(\mathbf{Q}_k)$, stejná nerovnost pak platí také pro funkci L_n, což vyplývá z monotonie logaritmu. Takže odhad vystupující z iterace EM algoritmu nikdy nebude méně věrohodný, než ten vstupní. EM algoritmus najde vrchol věrohodnostní funkce L_n, ale nezaručuje, že se bude jednat o globální maximum. Proto je lepší provést několik počátečních voleb $\mathbf{Q}_0$ a ze získaných odhadů pak vybrat ten s nejvyšší věrohodností.

Monotonie posloupnosti $\{L_n(\mathbf{Q}_k)\}$ ale nezaručuje konvergenci posloupnosti $\{\mathbf{Q}_k\}$. Podmínky pro tuto konvergenci nalezneme např. v [13] pod číselným označením (3.18) - (3.21) a (3.23). Ověříme jejich platnost.

(3.18) Prostor $\mathcal{Q}$ je d-rozměrný Eukleidovský podprostor $\mathbb{R}^d$. Toto je splněno v našem případě pro $d = m(m-1)$.

(3.19) Množina $\{\mathbf{Q} \in \mathcal{Q} : L_n(\mathbf{Q}) \geq L_n(\mathbf{Q}_0)\}$ je kompaktní pro každou $\mathbf{Q}_0$ takovou, že $L_n(\mathbf{Q}_0) > -\infty$. Problém zde nastává na hranici $\mathcal{Q}$, kde platí

$$\det\left(\exp(\mathbf{Q}_k)\right) \xrightarrow{k\to\infty} 0.$$

Toto můžeme obejít zúžením parametrického prostoru na

$$\mathcal{Q}_\epsilon = \left\{\mathbf{Q} \in \mathcal{Q} : \det\left(\exp(\mathbf{Q})\right) \geq \epsilon\right\},$$

kde $\epsilon > 0$ volíme malé.

(3.20) Funkce $\mathbf{Q} \mapsto L_n(\mathbf{Q})$ je spojitá a diferencovatelná na $Int\mathcal{Q}$. Podmínka je splněna, neboť funkce $\mathbf{Q} \mapsto \exp(\mathbf{Q})$ je spojitá na $\mathcal{Q}$ a diferencovatelná na $Int\mathcal{Q}$, tedy tam, kde $q_{ij} > 0, \forall i \neq j$.

(3.21) Odhad $\mathbf{Q}_{k+1}$ řeší rovnici

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_k}\left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})|\mathbf{Y} = \mathbf{y}\right] = 0.$$

Pokud $\mathbf{Q}_0 \in Int\mathcal{Q}$, pak toto platí pro celé $\mathcal{Q}$, neboť pro takové $\mathbf{Q}_0$ jsou všechny očekávané časy strávené ve stavech a všechny očekávané počty přeskoků kladné, tedy $\mathbf{Q}_1$ má mimo diagonálu kladné prvky, $\mathbf{Q}_1 \in Int\mathcal{Q}$. Dalšími iteracemi dostaneme $\mathbf{Q}_k \in Int\mathcal{Q}$ pro každé k. Může se ale stát, že pro zúžený parametrický prostor $\mathcal{Q}_\epsilon$ bude posloupnost $\{\mathbf{Q}_k\}$ konvergovat k hranici, kde $\det(\exp(\mathbf{Q})) = \epsilon$, pak nebude podmínka (3.21) splněna.

(3.23) Funkce $(\mathbf{Q},\mathbf{Q}_0) \mapsto \mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q})|\mathbf{Y} = \mathbf{y}\right]$ je spojitá. To platí z vyjádření $\tilde{M}_{ij}(t)$ a $\tilde{f}_{ij}^{kl}(t)$, které jsme odvodili v předchozím textu.

Celkově lze tedy z předchozích podmínek formulovat následující větu o konvergenci odhadu získaného pomocí EM algoritmu.

Věta 3.11. *([4], Theorem 4) Nechť $\boldsymbol{Q}_0 \in Int\mathcal{Q}$, tedy $(\boldsymbol{Q}_0)_{ij} > 0$, $\forall i \neq j$. Pak posloupnost $\{\boldsymbol{Q}_k\}$ buď konverguje ke stacionárnímu bodu věrohodnostní funkce L_n, nebo platí, že* $\det(\exp(\boldsymbol{Q}_k)) \to 0$ *pro* $k \to \infty$.

Pokud nastane druhá možnost, pak zřejmě maximálně věrohodný odhad neexistuje. Rozumná volba počáteční matice $\mathbf{Q}_0$ je tedy taková, aby $\det(\exp(\mathbf{Q}_0))$ byl dostatečně vzdálený od 0.

Pokud v počáteční matici $\mathbf{Q}_0$ je jeden z prvků nulový, pak očekávaný počet přeskoků mezi danými stavy zůstává nulový i v dalších iteracích algoritmu, a tedy $\mathbf{Q}_k$ leží na hranici $\mathcal{Q}$, kde některé z předchozích podmínek konvergence nemusí být splněné. Pokud je tedy potřeba mít v počáteční matici nulový prvek, je lepší zúžit o tento prvek parametrický prostor $\mathcal{Q}$. Lepší variantou je ale použití MCMC metody, která bude rozebrána v další kapitole.

3.4 Rozptyl odhadů

Odhad rozptylů a kovariancí maximálně věrohodných odhadů můžeme získat postupem z [14], tedy využitím informační matice, která vypadá pro diagonální prvky následovně

$$J(\mathbf{Q})_{ij,ij} = -\frac{\partial^2}{\partial q_{ij}^2} \mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right]$$

a pro prvky mimo diagonálu je

$$J(\mathbf{Q})_{ij,i'j'} = -\frac{\partial^2}{\partial q_{i'j'} \partial q_{ij}} \mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right],$$

Z podmínek regularity pro věrohodnostní funkci $L_\tau^{(c)}$ (viz [1], Definice 7.8) platí

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[\frac{\partial}{\partial q_{ij}} \log L_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right] = \mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[\frac{\partial}{\partial q_{ij}} l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right] = 0,$$

tedy s využitím vztahu (2.3), str. 13, máme

$$\begin{aligned}
&\mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[\frac{\partial}{\partial q_{ij}} \sum_{k=1}^{m} \sum_{l \neq k} \big(\log q_{kl} N_{kl}(\tau) - q_{kl} R_k(\tau) \big) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right] = \\
&= \mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[\frac{1}{q_{ij}} N_{ij}(\tau) - R_i(\tau) + \right. \\
&\qquad \left. + \sum_{k=1}^{m} \sum_{l \neq k} \left(\log q_{kl} \frac{\partial}{\partial q_{ij}} N_{kl}(\tau) - q_{kl} \frac{\partial}{\partial q_{ij}} R_k(\tau) \right) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right] = \\
&= \sum_{k=1}^{m} \sum_{l \neq k} \left(\log q_{kl} \, \frac{\partial}{\partial q_{ij}} \mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[N_{kl}(\tau) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right] - q_{kl} \, \frac{\partial}{\partial q_{ij}} \mathsf{E}_{\mathbf{Q}} \left[R_k(\tau) | \mathbf{Y} = \mathbf{y} \right] \right) = 0.
\end{aligned}$$

Pro diagonální prvky informační matice dostáváme

$$
\begin{aligned}
&J(\mathbf{Q})_{ij,ij} = \\
&= -\frac{\partial^2}{\partial q_{ij}^2}\left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j\neq i}\log q_{ij}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] - \sum_{i=1}^{m}\sum_{j\neq i} q_{ij}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]\right) = \\
&= -\frac{\partial}{\partial q_{ij}}\left(\frac{1}{q_{ij}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] - \mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{k=1}^{m}\sum_{l\neq k}\left(\log q_{kl}\;\frac{\partial}{\partial q_{ij}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{kl}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] - q_{kl}\;\frac{\partial}{\partial q_{ij}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_k(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]\right)\right) = \\
&= \frac{1}{q_{ij}^2}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] - \frac{1}{q_{ij}}\frac{\partial}{\partial q_{ij}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] + \\
&\qquad\qquad + \frac{\partial}{\partial q_{ij}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right].
\end{aligned}
$$

Pro prvky mimo diagonálu máme

$$
\begin{aligned}
&J(\mathbf{Q})_{i'j',ij} = \\
&= -\frac{\partial^2}{\partial q_{i'j'}\partial q_{ij}}\left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j\neq i}\log q_{ij}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] - \right. \\
&\qquad\qquad \left. - \sum_{i=1}^{m}\sum_{j\neq i} q_{ij}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]\right) = \\
&= -\frac{\partial}{\partial q_{i'j'}}\left(\frac{1}{q_{ij}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] - \mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{k=1}^{m}\sum_{l\neq k}\left(\log q_{kl}\;\frac{\partial}{\partial q_{i'j'}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{kl}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] - q_{kl}\;\frac{\partial}{\partial q_{i'j'}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_k(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right]\right)\right) = \\
&= -\frac{1}{q_{ij}}\frac{\partial}{\partial q_{i'j'}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right] + \frac{\partial}{\partial q_{i'j'}}\,\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}\left[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}\right].
\end{aligned}
$$

Odhad varianční matice vektoru $(\widehat{q}_{12},\widehat{q}_{13},\ldots,\widehat{q}_{m,m-1})^T$ pak získáme jako inverzi informační matice v bodě maximálně věrohodného odhadu $J(\widehat{\mathbf{Q}})^{-1}$. Tedy prvky $\left(J(\widehat{\mathbf{Q}})^{-1}\right)_{ij,i'j'}$ jsou odhady kovariancí $\widehat{q}_{ij}$ a $\widehat{q}_{i'j'}$ a prvky $\left(J(\widehat{\mathbf{Q}})^{-1}\right)_{ij,ij}$ jsou odhady rozptylů $\widehat{q}_{ij}$.

Kapitola 4

Markov Chain Monte Carlo

V této kapitole nalezneme odhad matice intenzit metodou zvanou Markov Chain Monte Carlo (MCMC).

Nejprve si znovu připomeneme situaci, ze které vycházíme. Pozorujeme Markovův řetězec se spojitým časem $\{X(t),\ t \in [0,\tau]\}$, přičemž k dispozici máme jen napozorované hodnoty pro $Y_i = X_{t_i},\ i = 1,\ldots,n$, z jedné realizace tohoto procesu v časech $t_1 = 0, t_2, \ldots, t_n = \tau$, označené $\mathbf{y} = \{y_1, \ldots y_n\}$. Naším cílem je z pozorovaných hodnot odhadnout matici intenzit $\mathbf{Q}$ Markovova řetězce.

MCMC přístup zjednodušeně řečeno spočívá v tom, že opakujeme simulaci matice intenzit $\mathbf{Q}$ za pomoci spojité trajektorie uměle vytvořené z pozorovaných hodnot a výchozí matice $\mathbf{Q}_0$ a výsledek následně použijeme jako další výchozí matici $\mathbf{Q}_0$. K pochopení celého problému je nutné nejprve rozebrat teoretickou stránku tohoto přístupu.

4.1 Bayesovský přístup

Nyní uvedeme Bayesovu větu, na které jsou postaveny základy této metody odhadování.

Věta 4.1. *(Bayes, [8], Věta 1.1) Nechť $\boldsymbol{X}$ je náhodný vektor s pravděpodobnostním rozdělením daným hustotou $f(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})$, kde $\boldsymbol{\theta}$ je náhodný vektorový parametr. Rozdělení parametru $\boldsymbol{\theta}$ je určeno hustotou $g(\boldsymbol{\theta})$. Pak pro podmíněnou hustotu $h(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})$ parametru $\boldsymbol{\theta}$ při daném $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$ platí*

$$h(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x}) = \frac{f(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})g(\boldsymbol{\theta})}{\int f(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})g(\boldsymbol{\theta})\ d\boldsymbol{\theta}},$$

je-li jmenovatel různý od nuly. V opačném případě položíme tuto hustotu rovnu nule.

Důkaz. Z Věty 1.2, str. 7, vyplývá, že $f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})g(\boldsymbol{\theta})$ je hustota vektoru $(\boldsymbol{\theta},\mathbf{X})^T$, pak

$$\int f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})g(\boldsymbol{\theta})\ d\boldsymbol{\theta}$$

je marginální hustota vektoru $\mathbf{X}$. Bayesův vztah následně plyne z Věty 1.1, str. 7.

❑

Poznámka. Hustota $g(\boldsymbol{\theta})$ z předchozí věty se nazývá *apriorní hustota*, což vyjadřuje, že se jedná o rozdělení vstupující do výpočtu. Naproti tomu hustota $h(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ se nazývá *aposteriorní hustota*, neboť vystupuje z výpočtu. Aposteriorní hustota v sobě kombinuje informace z apriorní hustoty a pozorovaných hodnot $\mathbf{X} = \mathbf{x}$.

Definice 4.1. *([8], Kapitola 2.2) Nechť $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_n)^T$ je náhodný výběr s hustotou $f(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})$ vzhledem k σ-konečné míře λ, nechť $\boldsymbol{\theta} \in \boldsymbol{\Theta} \neq \emptyset$ je náhodný vektorový parametr. Systém $\mathcal{G}$ apriorních hustot $g(\boldsymbol{\theta})$ je* konjugovaný s hustotami $\{f(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{\theta} \in \boldsymbol{\Theta}\}$, *jestliže při velkém rozsahu náhodného výběru n a při libovolných $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$, pro které*

$$0 < \int_{\boldsymbol{\Theta}} f(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta}) g(\boldsymbol{\theta}) \, d\lambda(\boldsymbol{\theta}) < \infty,$$

patří aposteriorní hustota $h(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})$ do systému $\mathcal{G}$.

V Bayesově větě 4.1 si můžeme povšimnout, že pro aposteriorní hustotu platí vztah

$$h(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x}) = c \; f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) g(\boldsymbol{\theta}),$$

kde c je konstanta nezávislá na $\boldsymbol{\theta}$. Jedná se tedy pouze o normující konstantu, která zaručuje, že se bude jednat o hustotu. Znalost této konstanty není při výpočtech podstatná. Proto budeme dále používat značení

$$h(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x}) \propto f(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) g(\boldsymbol{\theta}),$$

které lze vyjádřit slovy rovno až na konstantu. Pokud tuto teorii aplikujeme na naši situaci, můžeme vše zapsat následovně

$$\Phi(\mathbf{Q}|\mathbf{x}) = \frac{f(\mathbf{x}|\mathbf{Q})\Phi(\mathbf{Q})}{\int f(\mathbf{x}|\mathbf{Q})\Phi(\mathbf{Q}) \, d\mathbf{Q}} \propto f(\mathbf{x}|\mathbf{Q})\Phi(\mathbf{Q}),$$

kde $\Phi(\mathbf{Q})$ je apriorní hustota a $\Phi(\mathbf{Q}|\mathbf{x})$ je aposteriorní hustota.

4.2 Algoritmus

Algoritmus popisovaný v této podkapitole můžeme nalézt např. v článku [3]. Nejprve zvolíme systém apriorních hustot. Ten je podle zkušeností vhodné volit

$$\Phi(\mathbf{Q}) \propto \prod_{i=1}^{m} \prod_{j \neq i} q_{ij}^{\alpha_{ij}-1} e^{-q_{ij}\beta_i}, \tag{4.1}$$

kde α_{ij},$\beta_i > 0$, pro všechna i,$j = 1, \ldots, m$, jsou volitelné parametry. Vidíme, že tento systém hodnot je podobný věrohodnostní funkci $L_\tau^{(c)}$, (2.1), str. 12, kterou jsme definovali ve druhé kapitole při odhadování metodou maximální věrohodnosti pro spojité pozorování.

Dále si můžeme povšimnout, že tvar $\Phi(\mathbf{Q})$, (4.1), odpovídá situaci, kde jednotlivá navzájem nezávislá q_{ij} mají rozdělení $\Gamma(\beta_i, \alpha_{ij})$. Systém těchto apriorních rozdělení je konjugovaný pro model spojitých pozorování na intervalu $[0,\tau]$, neboť platí

$$\Phi(\mathbf{Q}|\mathbf{x}) \propto L_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) \; \Phi(\mathbf{Q}) \propto \prod_{i=1}^{m} \prod_{j \neq i} q_{ij}^{(N_{ij}(\tau)+\alpha_{ij})-1} e^{-q_{ij}(R_i(\tau)+\beta_i)}. \tag{4.2}$$

Samotný algoritmus lze shrnout do několika kroků.

1. Vybereme počáteční matici intenzit $\mathbf{Q}_0$ z apriorního rozdělení (4.1), položíme $\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_0$.

2. S využitím matice intenzit $\mathbf{Q}$ nasimulujeme trajektorii Markovova řetězce $\{X(t),\, t \in [0,\tau]\}$ takovou, že $X(t_i) = y_i$, pro $i = 1,\ldots,n$.

3. Spočítáme pro vygenerovanou trajektorii veličiny $N_{ij}(\tau)$ a $R_i(\tau)$, pro všechna $i,j = 1,\ldots,m$, $i \neq j$.

4. Spočítáme aposteriorní rozdělení pomocí (4.2) a provedeme výběr další matice intenzit $\mathbf{Q}$.

5. Přejdeme zpět na krok **2.**

Výběr trajektorie ve druhém kroku budeme provádět pomocí tzv. zamítací metody. Pro každé $i = 1,\ldots,n-1$ budeme simulovat Markovův řetězec na intervalu $[t_i,t_{i+1}]$ s počáteční hodnotou $X(t_i) = y_i$ a maticí intenzit $\mathbf{Q}$, přičemž požadujeme, aby pro tuto nasimulovanou trajektorii zároveň platilo, že $X(t_{i+1}) = y_{i+1}$. Pokud trajektorie nebude toto splňovat, simulaci zopakujeme.

Celý postup je variantou metody, která se nazývá Gibbsův výběrový plán. Algoritmem získáme posloupnost $(\mathbf{Q}_k,X^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$, kde k značí pořadové číslo iterace. Takovou posloupnost pak můžeme po odstranění prvních K iterací (tzv. burn-in period) považovat za striktně stacionární a také ergodickou v tom smyslu, že platí

$$\frac{1}{M}\sum_{i=K+1}^{K+M} \mathbf{Q}_i \xrightarrow{M\to\infty} \mathsf{E}\left[\mathbf{Q}|\mathbf{x}\right],$$

Výsledný odhad získaný metodou MCMC tedy dostaneme jako průměr hodnot v posloupnosti $\left(\mathbf{Q}_k,X^{(k)}\right)_{k>K}$, získané Gibbsovým výběrovým plánem, tedy

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{MC} = \frac{1}{M}\sum_{i=K+1}^{K+M} \mathbf{Q}_i.$$

Při velkém M platí asymptotická normalita pro aposteriorní rozdělení, kde střední hodnotou je výběrový průměr matic v posloupnosti $\widehat{\mathbf{Q}}^{MC}$ nebo maximálně věrohodný odhad $\widehat{\mathbf{Q}}^{EM}$, získaný pomocí EM algoritmu (Sekce 3.3, str. 29), a rozptylem pak inverze pozorované informační matice $J(\widehat{\mathbf{Q}})^{-1}$ (Sekce 3.4, str. 32). Odhad rozptylu lze tedy také provést následujícím vztahem

$$J(\widehat{\mathbf{Q}})^{-1} \sim \frac{1}{M-1}\sum_{i=K+1}^{K+M} v(\mathbf{Q}_i - \widehat{\mathbf{Q}}^{MC})v(\mathbf{Q}_i - \widehat{\mathbf{Q}}^{MC})^T, \tag{4.3}$$

kde funkce $v(\cdot)$ vytvoří z matice sloupcový vektor o rozměrech $m(m-1)\times 1$. Při nahrazení odhadu pro střední hodnotu odhadem získaným z EM algoritmu $\widehat{\mathbf{Q}}$ dostáváme vztah

$$J(\widehat{\mathbf{Q}})^{-1} \sim \frac{1}{M-1}\sum_{i=K+1}^{K+M} v(\mathbf{Q}_i - \widehat{\mathbf{Q}}^{EM})v(\mathbf{Q}_i - \widehat{\mathbf{Q}}^{EM})^T. \tag{4.4}$$

Tedy $J(\widehat{\mathbf{Q}})^{-1}$ je matice o rozměrech $m(m-1) \times m(m-1)$, jejíž diagonální prvky vyjadřují rozptyl odhadů intenzit $\widehat{q}_{ij}$, $i \neq j$. Další možnost, jak zhodnotit přesnost vypočítaných odhadů intenzit přechodu, je určit intervaly spolehlivosti založené na asymptoticky normálním rozdělení posloupnosti $(\mathbf{Q}_k, X^{(k)})_{k>K}$. Ty jsou na asymptotické hladině spolehlivosti 0,95 určeny podle vztahu (1.1), str. 8 následovně

$$(b_l, b_u) = \left(\widehat{\mathbf{Q}}^{MC} - \sqrt{\frac{1}{M} S^2}\ t_{M-1}(0{,}975)\ ,\ \widehat{\mathbf{Q}}^{MC} + \sqrt{\frac{1}{M} S^2}\ t_{M-1}(0{,}975) \right), \quad (4.5)$$

kde b_l značí dolní mez, b_u horní mez intervalu spolehlivosti, S^2 je nestranný odhad rozptylu posloupnosti a $t_{M-1}(0{,}975)$ je 0,975tý kvantil Studentova t-rozdělení o $M-1$ stupních volnosti.

Kapitola 5

Zobecnění pro více pozorování

Až doteď jsme se zabývali situací, kdy máme k dispozici jen jediné pozorování procesu $\{X(t),\, t \in [0,\tau]\}$, ať už se jednalo o případ spojitý nebo diskrétní. Celou dosud rozebranou teorii lze ale poměrně jednoduchým způsobem aplikovat na obecnější pohled, kde máme k dispozici celkem N pozorovaných trajektorií náhodných procesů $\{X_i(t),\, t \in [0,\tau]\}$, $i = 1,\ldots,N$, které jsou navzájem nezávislé Markovovy řetězce se spojitým časem, společnou stavovou množinou $\{1,\ldots,m\}$ a společnou maticí intenzit $\mathbf{Q}$. Uvedeme si zde jen příklad některých změn, kterými se toto zobecnění projeví.

Při spojitém pozorování se věrohodnostní funkce změní následovně

$$L_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) = \prod_{k=1}^{N} \prod_{i=1}^{m} \prod_{j \neq i} q_{ij}^{N_{ij}^k(\tau)}\; e^{-q_{ij} R_i^k(\tau)} = \prod_{i=1}^{m} \prod_{j \neq i} q_{ij}^{N_{ij}(\tau)}\; e^{-q_{ij} R_i(\tau)},$$

kde veličiny $N_{ij}^k(\tau)$ a $R_i^k(\tau)$ odpovídají jednotlivým trajektoriím a

$$N_{ij}(\tau) = \sum_{k=1}^{N} N_{ij}^k(\tau), \quad R_i(\tau) = \sum_{k=1}^{N} R_i^k(\tau).$$

Pro odhadování z diskrétního pozorování pak máme k dispozici hodnoty i-tého řetězce $X_i(t_k^i) = y_k^i$, $k = 1,\ldots,n_i$, v časech $0 \leq t_1^i \leq \cdots \leq t_{n_i}^i \leq \tau$, můžeme tedy každý řetězec $\{X_i(t),\, t \in [0,\tau]\}$, $i = 1,\ldots,N$, pozorovat s jinou frekvencí a v jiných časech. Podívejme se nyní například na to, jak se změní Q-funkce v EM algoritmu.

$$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}_0}\left[l_\tau^{(c)}(\mathbf{Q}) | \mathbf{Y}_1 = \mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{Y}_N = \mathbf{y}_N\right],$$

kde $\mathbf{Y}_i = \{Y_1^i,\ldots,Y_{n_i}^i\}$, $i = 1,\ldots,N$, jsou pozorované náhodné veličiny, konkrétně $Y_k^i = X_i(t_k^i)$, $k = 1,\ldots,n_i$, a $\mathbf{y}_i = \{y_1^i,\ldots,y_{n_i}^i\}$ jsou pozorované hodnoty. Celý EM algoritmus pak probíhá analogicky jednorozměrnému případu.

Při použití MCMC postupu musíme ve druhém kroku algoritmu simulovat všech N trajektorií nezávisle na sobě, tak, aby platilo, že $X_i(t_k^i) = y_k^i$, pro všechna $k = 1,\ldots,n_i$ a $i = 1,\ldots,N$. Zbytek opět probíhá analogicky jako v situaci s jednou pozorovanou trajektorií.

Kapitola 6

Simulační studie

Nyní přistoupíme k implementaci postupů popsaných v předchozích kapitolách. Výpočty jsou naprogramované v systému *Wolfram Mathematica 9.0 Student Edition.*

Prvním důležitým krokem je volba matice intenzit přechodu, kterou pak budeme zpětně odhadovat. Vybereme pro naší simulaci klasický model telefonní ústředny, tedy model Markovova řetězce se spojitým časem, ve kterém obecně matice intenzit přechodu vypadá následovně

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} -\lambda & \lambda & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \mu & -(\lambda+\mu) & \lambda & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 2\mu & -(\lambda+2\mu) & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\big(\lambda+(N-1)\mu\big) & \lambda \\ 0 & 0 & 0 & \dots & N\mu & -N\mu \end{pmatrix},$$

kde μ a λ jsou kladné intenzity a $N \in \mathbb{N}$ vyjadřuje celkový počet linek. Jako vhodný rozměr matice, resp. počet stavů, zvolíme 5, což je dostatečně vysoké číslo pro zajímavější trajektorie řetězce a zároveň není tak vysoké, aby algoritmy běžely příliš dlouho. V obecném tvaru matice bude parametr N roven 4, zbylé parametry stanovíme jako $\mu = \frac{1}{10}$ a $\lambda = \frac{1}{4}$. Mějme tedy matici

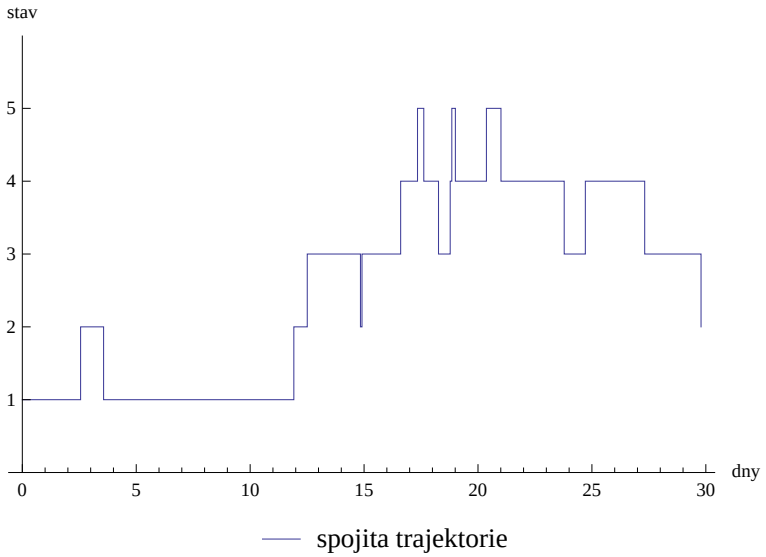
$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} -0{,}25 & 0{,}25 & 0 & 0 & 0 \\ 0{,}1 & -0{,}35 & 0{,}25 & 0 & 0 \\ 0 & 0{,}2 & -0{,}45 & 0{,}25 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}3 & -0{,}55 & 0{,}25 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}4 & -0{,}4 \end{pmatrix}.$$

V modelu telefonní ústředny jednotlivé stavy vyjadřují počet telefonních linek, které jsou v daném okamžiku obsazené, jsou tedy označeny $\{0{,}1,\dots\}$. V této práci ovšem čísla přiřazená jednotlivých stavům vyjadřují pouze jejich pořadí. I v simulaci tedy budeme uvažovat množinu stavů $\{1,\dots,5\}$, přičemž pro návrat k interpretaci modelu telefonní ústředny je potřeba u každého stavu snížit jeho pořadové číslo o jedničku.

Pro simulaci trajektorie je dále nutné zvolit počáteční stav. Ten vybereme pomocí funkce *RandomChoice[]*, která provede pseudonáhodný výběr ze zadaného pravděpodobnostního rozdělení. V našem případě bude vybírat ze spočteného stacionárního rozdělení, jehož odvození můžeme nalézt např. ve skriptech [16].

$$\pi_j = \frac{\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{j-1}}{(j-1)!} \left(\sum_{k=1}^{5} \frac{\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{k-1}}{(k-1)!} \right)^{-1}, \quad j = 1, \ldots, 5.$$

Nyní již nasimulujeme trajektorii Markovova řetězce se spojitým časem, jehož matice intenzit přechodu je $\mathbf{Q}$. Toto provedeme pomocí funkcí *ContinuousMarkovProcess[]* a *RandomFunction[]*. Budeme simulovat chování řetězce na pětiletém intervalu, přičemž pro zjednodušení uvažujme kalendářní konvenci s 30 dny v měsíci a 360 dny v roce. Pro představu o chování řetězce se můžeme podívat na průběh trajektorie v rámci prvního měsíce (viz Obrázek 6.1).



Obrázek 6.1: Trajektorie zadaného Markovova řetězce v prvním měsíci.

6.1 Odhad ze spojitého pozorování

První odhad matice intenzit provedeme ze spojitého pozorování. Napočítáme veličiny $R_i(\tau)$ a $N_{ij}(\tau)$, $i,j = 1, \ldots, 5$, tedy doby strávené v jednotlivých stavech a četnosti přeskoků mezi stavy, kde τ je rovno 1800 (viz Tabulky 6.1 a 6.2).

	1	2	3	4	5
$R_i(\tau)$	108,65	354,39	572,75	501,75	262,46

Tabulka 6.1: Doby setrvání ve stavech ve spojité trajektorii.

Z těchto veličin vyjádříme maximálně věrohodné odhady pro jednotlivé intenzity přechodu podle vztahu (2.3), str. 13. Zlomek bude definován pro všechny prvky mimo diagonálu, neboť všechny doby setrvání ve stavech jsou nenulové. Máme tedy dostatečnou informaci o každém stavu, abychom na jejím základě mohli stanovit odhad intenzity přechodu. Diagonální prvky dopočítáme podle definice matice intenzit.

$N_{ij}(\tau)$	1	2	3	4	5
1	-	33	0	0	0
2	32	-	95	0	0
3	0	94	-	129	0
4	0	0	128	-	125
5	0	0	0	125	-

Tabulka 6.2: Četnosti přeskoků ve spojité trajektorii.

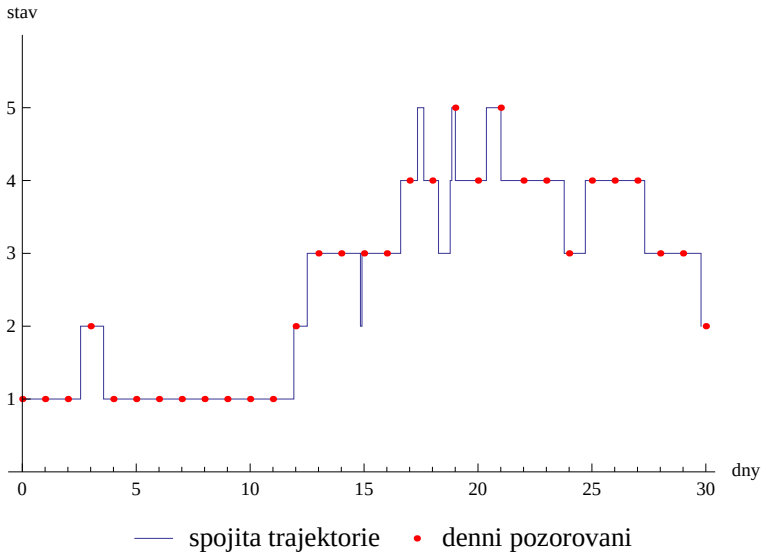
Získáváme odhad matice

$$\widehat{\mathbf{Q}}^S = \begin{pmatrix} -0{,}30372 & 0{,}30372 & 0 & 0 & 0 \\ 0{,}09030 & -0{,}35837 & 0{,}26807 & 0 & 0 \\ 0 & 0{,}16412 & -0{,}38935 & 0{,}22523 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}25511 & -0{,}50424 & 0{,}24913 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}47627 & -0{,}47627 \end{pmatrix}.$$

Postup tohoto odhadu je jednoduchý a probíhá přímým výpočtem. Využíváme ale kompletní trajektorii, kterou v praxi k dispozici spíše nemáme. Odhad jsme provedli pro následné porovnávání s výsledky získanými z diskrétní trajektorie.

6.2 Odhad z diskrétního pozorování

Diskrétní trajektorii vytvoříme tak, že ze spojité vybereme soubor denních pozorování v okamžicích 0, 1, ..., 1800 (viz Obrázek 6.2), tedy celkový počet napozorovaných hodnot je $n = 1801$.



Obrázek 6.2: Denní pozorování v rámci prvního měsíce.

Vidíme, že při vybírání diskrétních hodnot ze spojité trajektorie se občas některá informace o pohybu řetězce ztratí, proto tento odhad nikdy nebude tak přesný jako $\widehat{\mathbf{Q}}^S$.

6.2.1 Výpočet z matice pravděpodobností přechodu

Nejdříve napočítáme pro nasimulovanou diskrétní trajektorii veličiny $K_{ij}(n)$ a $K_{i\cdot}(n)$ pro $i,\ j = 1,\ \ldots,\ 5$, které vyjadřují počty přeskoků mezi stavy a jejich souhrny (viz Tabulka 6.3).

$K_{ij}(n)$	1	2	3	4	5	$K_{i\cdot}(n)$
1	75	26	5	0	0	106
2	25	264	66	10	0	365
3	4	68	399	87	9	567
4	1	7	88	325	76	497
5	0	0	9	76	180	265

Tabulka 6.3: Četnosti přeskoků při denním pozorování.

Nyní vyjádříme odhady jednotlivých pravděpodobností přechodu mezi stavy, a to pomocí vztahu (2.5), str. 14. Odhad matice pravděpodobností přechodu pak vypadá takto

$$\widehat{\mathbf{P}} = \begin{pmatrix} 0{,}70755 & 0{,}24528 & 0{,}04717 & 0 & 0 \\ 0{,}06849 & 0{,}72329 & 0{,}18082 & 0{,}02740 & 0 \\ 0{,}00705 & 0{,}11993 & 0{,}70370 & 0{,}15344 & 0{,}01587 \\ 0{,}00201 & 0{,}01408 & 0{,}17706 & 0{,}65392 & 0{,}15292 \\ 0 & 0 & 0{,}03396 & 0{,}28679 & 0{,}67925 \end{pmatrix}.$$

Zbývá už jen vyjádřit ze vztahu $\mathbf{P} = \exp(\Delta\mathbf{Q})$ odhad matice intenzity přechodu, Δ je v tomto případě rovno jedné. K tomu využijeme funkci *MatrixLog[]*.

$$\widehat{\mathbf{Q}} = \begin{pmatrix} -0{,}36279 & 0{,}34593 & 0{,}02437 & -0{,}00857 & 0{,}00106 \\ 0{,}09692 & -0{,}36221 & 0{,}25648 & 0{,}01210 & -0{,}00329 \\ 0{,}00159 & 0{,}17183 & -0{,}40374 & 0{,}23342 & -0{,}00310 \\ 0{,}00221 & -0{,}00225 & 0{,}27087 & -0{,}51007 & 0{,}23924 \\ -0{,}00044 & -0{,}00217 & -0{,}00772 & 0{,}44880 & -0{,}43846 \end{pmatrix}.$$

Na výsledku odhadu vidíme hlavní nedokonalost v tom, že mimo diagonálu se nacházejí i záporná čísla, což odporuje definici matice intenzit přechodu. Provedeme tedy ještě úpravu, kterou můžeme v literatuře nalézt popsanou např. v [10]. Prvky mimo diagonálu, které jsou záporné, nahradíme nulou a diagonální prvky pak přepočteme, aby součet v řádku byl nulový.

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{D} = \begin{pmatrix} -0{,}37136 & 0{,}34593 & 0{,}02437 & 0 & 0{,}00106 \\ 0{,}09692 & -0{,}36550 & 0{,}25648 & 0{,}01210 & 0 \\ 0{,}00159 & 0{,}17183 & -0{,}40684 & 0{,}23342 & 0 \\ 0{,}00221 & 0 & 0{,}27087 & -0{,}51232 & 0{,}23924 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}44880 & -0{,}44880 \end{pmatrix}.$$

Při počítání odhadu velmi záleží na tom, zda jsme schopni v rozumném čase dopočítat maticový logaritmus z odhadnuté matice pravděpodobností přechodu, což pro naše zadání proběhlo bez problému. Ostatní kroky a výpočty jsou pro počítačový software jednoduché.

6.2.2 EM algoritmus

Nyní budeme odhadovat matici intenzit pomocí EM algoritmu. Jako počáteční matici použijeme odhad z diskrétního pozorování, $\mathbf{Q}_0 = \widehat{\mathbf{Q}}^D$. Pro tuto matici je $\det(\Delta\mathbf{Q}_0) = 0{,}121869$, je tedy dostatečně vzdálen od nuly. EM algoritmus by měl tento hrubý odhad zpřesnit. Kritérium pro ukončení algoritmu pro nás bude malá odchylka dvou po sobě jdoucích odhadů

$$\|\mathbf{Q}_{k+1} - \mathbf{Q}_k\| < \epsilon = 0.00001, \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Nejprve se podrobněji podíváme na první iteraci a některé průběžné výsledky, abychom si udělali konkrétní představu o celém průběhu výpočtu.

Iterace začíná E-krokem, který budeme řešit pomocí soustav diferenciálních rovnic z Věty 3.3, str. 19, a Věty 3.4, str. 20. Funkce $M_{ij}^k(1)$ a $f_{ij}^{kl}(1)$ budeme hledat pomocí funkce *NDSolve[]*. Argument obou těchto funkcí odpovídá kroku mezi pozorováními. Navíc si můžeme všimnout, že vstupní matice obsahuje nuly, které chceme zachovat i pro výstupy z dalších iterací. Můžeme proto položit $f_{ij}^{kl}(1) = 0$, pokud $(\mathbf{Q}_0)_{kl} = 0$. Dále vyjádříme $\widetilde{M}_{ij}^k(1)$ a $\widetilde{f}_{ij}^{kl}(1)$ podle vztahů (3.5) a (3.6), str. 18.

Napočítáme střední doby setrvání ve stavech a také střední počty přeskoků mezi stavy. Výsledky zároveň porovnáme s hodnotami získanými z trajektorie simulované ze zadání (viz Tabulky 6.4 a 6.5).

	1	2	3	4	5
$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}[R_i(\tau)\|\mathbf{Y} = \mathbf{y}]$	105,59	365,44	566,64	496,54	265,80
$R_i(\tau)$	108,65	354,39	572,75	501,75	262,46

Tabulka 6.4: Doby setrvání ve stavech v EM algoritmu při denním pozorování.

$\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}[N_{ij}(\tau)\|\mathbf{Y} = \mathbf{y}]$	1	2	3	4	5
1	–	36,05	2,33	0	0,01
2	35,54	–	92,82	3,83	0
3	0,89	96,14	–	129,88	0
4	0,95	0	131,76	–	117,22
5	0	0	0	117,23	–
$N_{ij}(\tau)$	1	2	3	4	5
1	–	33	0	0	0
2	32	–	95	0	0
3	0	94	–	129	0
4	0	0	128	–	125
5	0	0	0	125	–

Tabulka 6.5: Četností přeskoků v EM algoritmu při denním pozorování.

Vidíme, že již první krok EM algoritmu dává ve středních hodnotách těchto veličin podobné výsledky. To je způsobeno hlavně tím, že matice intenzit vstupující do EM algoritmu je již sama o sobě odhadem.

Nyní už zbývá jen napočítat odhad matice intenzit, který bude z iterace vystupovat. Mimodiagonální prvky spočítáme z veličin ve výše uvedených tabulkách, diagonální prvky pak doplníme tak, aby součet v řádcích byl nulový. Dostáváme odhad matice intenzit

$$\mathbf{Q}_1 = \begin{pmatrix} -0{,}36349 & 0{,}34142 & 0{,}02202 & 0 & 0{,}00005 \\ 0{,}09724 & -0{,}36174 & 0{,}25401 & 0{,}01049 & 0 \\ 0{,}00158 & 0{,}16967 & -0{,}40045 & 0{,}22921 & 0 \\ 0{,}00192 & 0 & 0{,}26536 & -0{,}50336 & 0{,}23608 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}44104 & -0{,}44104 \end{pmatrix}.$$

S touto maticí na vstupu pak začíná druhá iterace. V prvním iteračním kroku byla norma rozdílu vstupní a výstupní matice $\|\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_0\| = 0{,}0157193$. Po doběhnutí algoritmu jsme získali odhad matice

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{EM} = \begin{pmatrix} -0{,}36247 & 0{,}34725 & 0{,}01522 & 0 & 0 \\ 0{,}09680 & -0{,}36215 & 0{,}26044 & 0{,}00491 & 0 \\ 0{,}00187 & 0{,}16864 & -0{,}40041 & 0{,}22990 & 0 \\ 0{,}00167 & 0 & 0{,}26249 & -0{,}49640 & 0{,}23224 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}43417 & -0{,}43417 \end{pmatrix}.$$

Celkem proběhlo 47 iterací, výpočet trval 1 hodinu, 26 minut a 14,51 vteřin.

6.2.3 MCMC algoritmus

Poslední metodou odhadu matice intenzit, kterou nyní vyzkoušíme, je Monte Carlo Markov Chain. Nejprve musíme vybrat vhodné apriorní rozdělení. Toto rozdělení bude mít tvar

$$\Phi(\mathbf{Q}) \propto \prod_{i=1}^{5} \prod_{i \neq j} q_{ij}^{\alpha_{ij}-1} e^{-q_{ij}\beta_i},$$

kde α_{ij} a β_i, i,$j = 1, \ldots, 5$, budou námi zvolené kladné parametry. Jednou z možností je určit tyto parametry jako nějaké jednoduché konstanty, např. všechny rovné jedné. My ale provedeme takovou volbu, která v sobě již nese základní informaci o hledané matici intenzit. Stejně jako v EM algoritmu k tomu využijeme odhad matice intenzit $\widehat{\mathbf{Q}}^{D}$. Z apriorního rozdělení vidíme, že jednotlivá $q_{ij} \sim \Gamma(\beta_i,\alpha_{ij})$, $i \neq j$, budeme proto na okamžik předpokládat, že toto rozdělení je pro všechny prvky matice intenzit totožné, tedy neznámé parametry jsou α a β. Předpokládejme dále, že prvky matice $\widehat{\mathbf{Q}}^{D}$ ležící mimo diagonálu tvoří náhodný výběr z rozdělení $\Gamma(\beta,\alpha)$. Pomocí momentové metody nyní můžeme oba parametry odhadnout. Z obecného gamma rozdělení vyjádříme střední hodnotu i rozptyl.

$$\mathsf{E}\ q_{ij} = \frac{\alpha}{\beta}, \quad var\ q_{ij} = \frac{\alpha}{\beta^2}.$$

Jako odhad střední hodnoty $\widehat{\mathsf{E}\ q_{ij}}$ vezmeme výběrový průměr, za odhad rozptylu $\widehat{var\ q_{ij}}$ dosadíme výběrový rozptyl. Z obou rovnic pak vyjádříme vztahy pro odhady obou parametrů

$$\widehat{\beta} = \frac{\widehat{\mathsf{E}\ q_{ij}}}{\widehat{varq_{ij}}}, \quad \widehat{\alpha} = \frac{(\widehat{\mathsf{E}\ q_{ij}})^2}{\widehat{varq_{ij}}}.$$

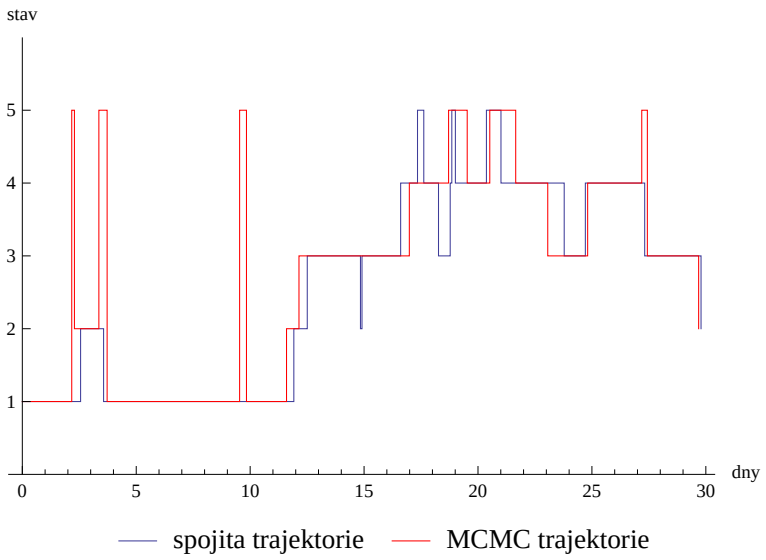
Dopočtené hodnoty odhadů parametrů jsou: $\widehat{\alpha} = 0{,}539423$, $\widehat{\beta} = 5{,}12562$.

Nyní pomocí funkce *RandomVariate[]* vybereme z apriorního rozdělení počáteční matici intenzit pro algoritmus, diagonální prvky opět dopočítáváme ze součtu v řádcích.

$$\mathbf{Q}_0 = \begin{pmatrix} -0{,}72627 & 0{,}08340 & 0{,}03923 & 0{,}02594 & 0{,}57770 \\ 0{,}00023 & -0{,}06664 & 0{,}01014 & 0{,}04085 & 0{,}01543 \\ 0{,}00034 & 0{,}07319 & -0{,}08110 & 0{,}00730 & 0{,}00027 \\ 0{,}01065 & 0{,}03826 & 0{,}00709 & -0{,}11286 & 0{,}05686 \\ 0{,}31003 & 0{,}13587 & 0{,}42323 & 0{,}48552 & -1{,}35465 \end{pmatrix}.$$

Stejně jako u EM algoritmu, i v této sekci se nejprve podrobně podíváme na průběh první iterace algoritmu. Máme již vybranou matici z apriorního rozdělení, nyní tedy pomocí této matice nasimulujeme spojitou trajektorii Markovova řetězce, takovou, která v časech pozorování prochází odpozorovanou diskrétní trajektorií. K tomu opět využijeme zabudované funkce *RandomFunction[]* a *ContinuousMarkovProcess[]*. Simulujeme jednotlivé části trajektorie mezi sousedními pozorováními a výsledky nakonec napojíme na sebe.

Je zajímavé takto poskládanou trajektorii porovnat s trajektorií nasimulovanou přímo ze zadání (viz Obrázek 6.3).



Obrázek 6.3: MCMC trajektorie a trajektorie ze zadání při denním pozorování.

Obě trajektorie se od sebe příliš neliší, to je způsobené hlavně výběrem počáteční matice a také denní frekvencí, kde vzdálenost od sousedních pozorování není tak velká, aby se řetězec příliš odchýlil.

Nyní na vytvořené trajektorii napočítáme doby setrvání ve stavech a četnosti přeskoků mezi stavy. Tyto hodnoty porovnáme s hodnotami získanými z trajektorie simulované ze zadání (viz Tabulky 6.6 a 6.7).

	1	2	3	4	5
$R_i(\tau)$ z MCMC	105,61	369,72	553,72	494,99	275,96
$R_i(\tau)$	108,65	354,39	572,75	501,75	262,58

Tabulka 6.6: Doby setrvání ve stavech v MCMC algoritmu při denním pozorování.

$N_{ij}(\tau)$ z MCMC	1	2	3	4	5
1	-	21	3	1	41
2	2	-	52	30	39
3	5	84	-	75	5
4	12	11	35	-	130
5	46	7	79	83	-
$N_{ij}(\tau)$	1	2	3	4	5
1	-	33	0	0	0
2	32	-	95	0	0
3	0	94	-	129	0
4	0	0	128	-	125
5	0	0	0	125	-

Tabulka 6.7: Četnosti přeskoků v MCMC algoritmu při denním pozorování.

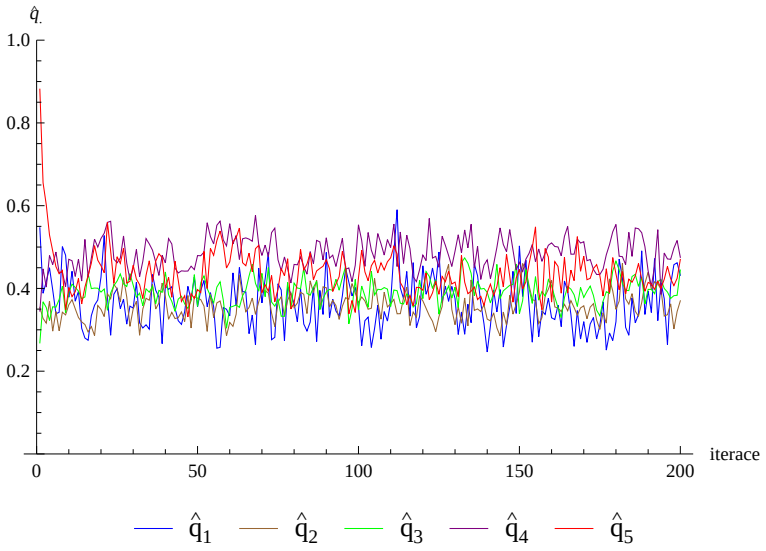
Jednotlivé doby setrvání ve stavech přibližně odpovídají, ovšem počty přeskoků jsou v nově nasimulované trajektorii mnohem více rozvrstvené, řetězec zde neskáče jen mezi sousedními stavy. Důvod je takový, že naše zvolené apriorní rozdělení je tvořené náhodným výběrem prvků q_{ij}, $i \neq j$ ze společného gamma rozdělení. Dalšími iteracemi MCMC procesu by se tyto nepřesnosti měly částečně eliminovat.

Posledním krokem v první iteraci je vytvoření aposteriorního rozdělení a výběr další matice intenzit pomocí funkce *RandomVariate[]*. Takto vybraná matice na konci první iterace má tvar

$$\mathbf{Q}_1 = \begin{pmatrix} -0{,}54653 & 0{,}18052 & 0{,}02955 & 0{,}00820 & 0{,}32826 \\ 0{,}00356 & -0{,}35439 & 0{,}15857 & 0{,}07062 & 0{,}12165 \\ 0{,}00322 & 0{,}12988 & -0{,}26838 & 0{,}13234 & 0{,}00294 \\ 0{,}02735 & 0{,}01931 & 0{,}06722 & -0{,}34524 & 0{,}23136 \\ 0{,}19337 & 0{,}03349 & 0{,}28366 & 0{,}37099 & -0{,}88151 \end{pmatrix}.$$

V této matici již prvky mimo diagonálu nepocházejí ze stejného gamma rozdělení, vyšší hodnoty intenzit přechodu bychom měli získat nad a pod hlavní diagonálou, ostatní členy by se měly postupně zmenšovat. Některé prvky matice $\mathbf{Q}_1$ takové chování zatím nevykazují, proto ale v této metodě odhadu provádíme velké množství iterací.

Nyní již spustíme celý MCMC algoritmus. Celkem necháme proběhnout 1000 iterací. Je potřeba také určit, jak velkou počáteční část z posloupnosti odhadů vyřadíme, tedy tzv. *burn-in period*. K tomu by nám mohl posloužit graf, který zobrazuje vývoj hodnot celkových intenzit přechodu v průběhu prvních 200 iterací (viz Obrázek 6.4).



Obrázek 6.4: Vývoj celkových intenzit při denním pozorování.

Protože celková intenzita přechodu vyjadřuje součet všech intenzit v řádku matice, můžeme ji považovat za souhrnný ukazatel vývoje tohoto řádku. Pokud by v nějaké počáteční sekvenci algoritmu celková intenzita rostla nebo klesala k nějaké hodnotě, u které by následně setrvala, vyřadili bychom tuto počáteční sekvenci a výsledný odhad počítali bez ní.

Odhady celkových intenzit se v průběhu algoritmu pohybují okolo přibližně stejných hodnot, výjimku tvoří jen několik iterací na začátku. Není tedy potřeba odhadnutou posloupnost příliš měnit, odstraníme pouze prvních 5 matic, které eliminují vliv volby koeficientů v apriorním rozdělení. Tato vyřazená sekvence by měla být delší, kdybychom pro apriorní rozdělení vybrali koeficienty α a β bez jakéhokoliv ohledu na výsledky předchozích odhadů.

Výsledný odhad matice intenzit pomocí MCMC algoritmu nyní získáme zprůměrováním posloupnosti odhadů, bez prvních pěti členů. Dostáváme odhad

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{MC} = \begin{pmatrix} -0{,}36499 & 0{,}32965 & 0{,}02412 & 0{,}00593 & 0{,}00529 \\ 0{,}09531 & -0{,}35819 & 0{,}25225 & 0{,}00855 & 0{,}00208 \\ 0{,}00417 & 0{,}16264 & -0{,}39434 & 0{,}22409 & 0{,}00344 \\ 0{,}00264 & 0{,}00503 & 0{,}25370 & -0{,}48705 & 0{,}22569 \\ 0{,}00233 & 0{,}00248 & 0{,}00724 & 0{,}41953 & -0{,}43158 \end{pmatrix}.$$

Výpočet 1000 iterací algoritmu celkem trval 2 hodiny, 11 minut a 44,87 vteřin.

6.2.4 Rozptyl odhadů a intervaly spolehlivosti

K získaným odhadům matice intenzit přechodu je vhodné připojit také odhad jejich rozptylu. V teoretické části tohoto textu jsme rozebírali způsob, jakým lze napočítat odhad rozptylu přes inverzi Fisherovy informační matice.

Tento postup je ale výpočetně velmi náročný, neboť je v něm potřeba vyjádřit veličiny $\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}[R_i(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}]$ a $\mathsf{E}_{\mathbf{Q}}[N_{ij}(\tau)|\mathbf{Y}=\mathbf{y}]$ obecně vzhledem ke $\mathbf{Q}$, abychom je dále mohli parciálně derivovat. Využijeme proto spíše posloupnost odhadů z MCMC algoritmu, a vztah (4.3), str. 36 (viz Tabulka 6.8).

	1	2	3	4	5
1	–	0,0041563	0,0005437	0,0000622	0,0000472
2	0,0003471	–	0,0009577	0,0000724	0,0000079
3	0,0000174	0,0004251	–	0,0005277	0,0000166
4	0,0000095	0,0000283	0,0007296	–	0,0007926
5	0,0000085	0,0000111	0,0000793	0,0025676	–

Tabulka 6.8: Rozptyl MCMC odhadu při denním pozorování.

Nejvyšší rozptyl vychází u prvků nad a pod hlavní diagonálou, neboť na těchto pozicích dochází k nejvyššímu počtu přeskoků. Odhady rozptylů pro diagonálu neuvádíme, protože tyto prvky neodhadujeme, ale odvozujeme z ostatních.

Drobnou modifikací výpočtu odhadu rozptylu pak je využití $\widehat{\mathbf{Q}}^{EM}$ jako odhadu střední hodnoty matice intenzit, jak je uvedeno ve vztahu (4.4), str. 36. Tímto způsobem pak kombinujeme výsledky z obou algoritmů (viz Tabulka 6.9).

	1	2	3	4	5
1	–	0,0044662	0,0006228	0,0000974	0,0000752
2	0,0003493	–	0,0010248	0,0000856	0,0000123
3	0,0000227	0,0004612	–	0,0005615	0,0000284
4	0,0000105	0,0000536	0,0008068	–	0,0008356
5	0,0000139	0,0000172	0,0001317	0,0027823	–

Tabulka 6.9: Rozptyl s využitím EM odhadu při denním pozorování.

Hodnoty nyní vycházejí o trochu větší, ale celkově lze říci, že obě metody dávají přibližně stejný odhad rozptylu. Pro každou odhadnutou intenzitu ještě můžeme napočítat 95procentní interval spolehlivosti (b_l,b_u) podle vztahu (4.5), str. 26 (viz Tabulka 6.10).

		1	2	3	4	5
1	b_l	–	0,32564	0,02267	0,00544	0,00486
	b_u	–	0,33366	0,02557	0,00642	0,00572
2	b_l	0,09416	–	0,25032	0,00802	0,00191
	b_u	0,09647	–	0,25417	0,00908	0,00226
3	b_l	0,00391	0,16136	–	0,22266	0,00319
	b_u	0,00443	0,16392	–	0,22552	0,00369
4	b_l	0,00244	0,00470	0,25202	–	0,22393
	b_u	0,00283	0,00536	0,25539	–	0,22744
5	b_l	0,00215	0,00228	0,00668	0,41638	–
	b_u	0,00251	0,00269	0,00779	0,42268	–

Tabulka 6.10: Intervaly spolehlivosti při denním pozorování.

6.3 Porovnání odhadů

Celkem jsme napočítali čtyři různé odhady, nyní je porovnáme se zadanou $\mathbf{Q}$. Porovnání provedeme na základě normy rozdílu $\|\widehat{\mathbf{Q}} - \mathbf{Q}\|$ (viz Tabulka 6.11).

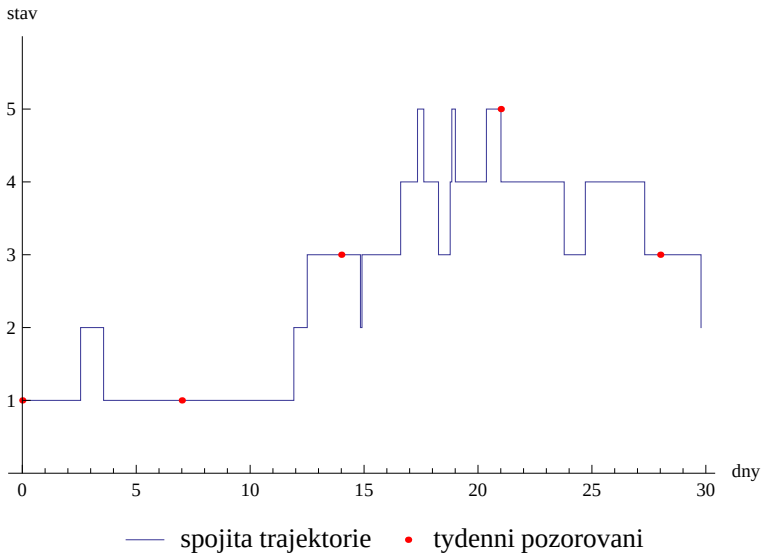
	odchylka
odhad výpočtem ze spojité trajektorie	0,120115
odhad výpočtem z diskrétní trajektorie	0,157336
EM algoritmus	0,150683
MCMC algoritmus	0,143376

Tabulka 6.11: Porovnání odhadů z denního pozorování.

Odchylky od zadané matice odpovídají našemu očekávání v tom, že odhad ze spojité trajektorie vychází jako nejpřesnější, zatímco odhad z diskrétní trajektorie jako nejméně přesný. Oba iterační algoritmy pak výchozí matici přibližují té zadané, přičemž MCMC algoritmus v tomto porovnání vychází jako přesnější.

6.4 Týdenní pozorování

V další části této simulační studie budeme výše uvedené metody odhadování aplikovat na diskrétní pozorování, jejichž frekvence je týdenní. V rámci prvního měsíce pak získáme jen 5 pozorování (viz Obrázek 6.5).



Obrázek 6.5: Týdenní pozorování v rámci prvního měsíce.

S velkými mezerami mezi pozorováními se hodně informací o průběhu trajektorie ztrácí, proto očekáváme, že vypočtené odhady budou méně přesné. Algoritmy již nebudeme rozebírat tak podrobně, zaměříme se hlavně na jejich výsledky. První odhad je pomocí výpočtu přes matici pravděpodobností přechodu. Během

okamžiku dostáváme výsledek

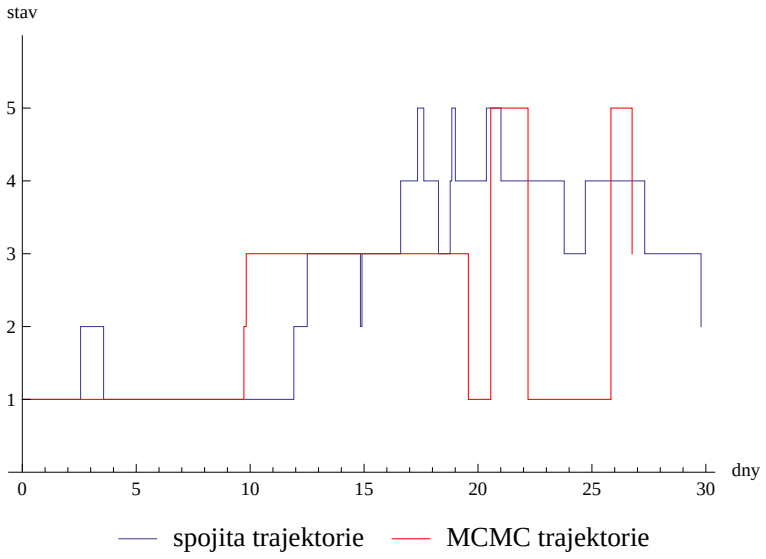
$$\widehat{\mathbf{Q}}^{D} = \begin{pmatrix} -0{,}58338 & 0{,}09326 & 0{,}14133 & 0{,}34878 & 0 \\ 0{,}02642 & -0{,}37309 & 0{,}14284 & 0 & 0{,}20384 \\ 0 & 0{,}00559 & -0{,}29428 & 0{,}28869 & 0 \\ 0{,}02620 & 0{,}16147 & 0 & -0{,}45648 & 0{,}26881 \\ 0 & 0 & 0{,}25561 & 0{,}13812 & -0{,}39373 \end{pmatrix}.$$

Oproti denním pozorováním si můžeme povšimnout rozdílu v tom, že odhadnutá matice obsahuje poměrně vysoké hodnoty intenzit i na prvcích, které neleží nad nebo pod hlavní diagonálou a správně by měly být nulové. V týdenní trajektorii totiž řetězec vlivem vynechání delších úseků často skáče i dále než jen mezi sousedními stavy.

EM algoritmus odhadl matici intenzit přechodu po 242 iteracích a výpočet trval 5 hodin, 22 minut a 12,10 vteřin, tedy mnohonásobně déle než u denního pozorování. Odhad matice intenzit vypadá takto

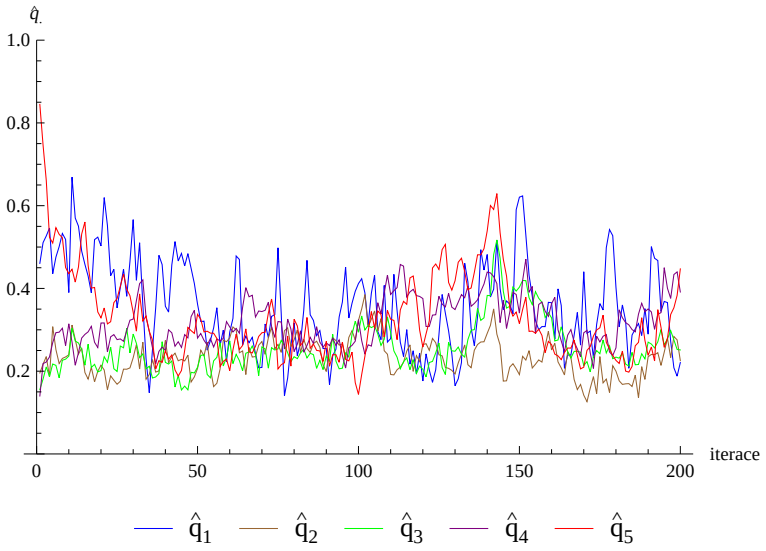
$$\widehat{\mathbf{Q}}^{EM} = \begin{pmatrix} -0{,}22048 & 0{,}18600 & 0 & 0{,}03448 & 0 \\ 0{,}01688 & -0{,}25636 & 0{,}23947 & 0 & 0 \\ 0 & 0{,}08110 & -0{,}25081 & 0{,}16970 & 0 \\ 0{,}02464 & 0{,}07175 & 0 & -0{,}28769 & 0{,}19130 \\ 0 & 0 & 0{,}16057 & 0{,}14339 & -0{,}30396 \end{pmatrix}.$$

MCMC algoritmus znovu provedl 1000 iterací v celkovém čase 24 minut a 25,68 vteřin, což je o hodně kratší doba než při dennímu odhadu. Podívejme se nyní, jak se v první iteraci bude lišit poskládaná trajektorie, vytvořená zamítací metodou, od té originální (viz Obrázek 6.6). Trajektorie jsou již velmi odlišné, protože mezi pozorováními jsou velké mezery, kdy o vývoji trajektorie nevíme nic.



Obrázek 6.6: MCMC trajektorie a trajektorie ze zadání při týdenním pozorování.

Pro určení délky počáteční sekvence, kterou z posloupnosti odhadů vyřadíme, použijeme stejnou metodu jako u denního pozorování, tedy bude pozorovat vývoj hodnot prvků na diagonále (viz Obrázek 6.7).



Obrázek 6.7: Vývoj celkových intenzit při týdenním pozorování.

Ani nyní nelze vypozorovat nějaký úsek, jehož vyřazení by výrazně zpřesnilo výsledný odhad, odstraníme tedy pro výpočet výsledného odhadu prvních 50 prvků posloupnosti, neboť již odhad vstupující do MCMC algoritmu je při týdenním pozorování méně přesný.

Můžeme si ale povšimnout, že oproti vývoji při denním pozorování se od sebe hodnoty celkových intenzit v jednotlivých iteracích více liší. To je způsobené hlavně krokem v algoritmu, který simuluje části trajektorií mezi body pozorování. Simulace týdenní trajektorie přináší daleko větší volnost při pohybu řetězce, než pouhý přechod mezi dny.

Odhad metodou MCMC algoritmu je

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{MC} = \begin{pmatrix} -0{,}52654 & 0{,}14489 & 0{,}12043 & 0{,}16621 & 0{,}09502 \\ 0{,}03428 & -0{,}27372 & 0{,}18829 & 0{,}03204 & 0{,}01911 \\ 0{,}02676 & 0{,}06761 & -0{,}28602 & 0{,}14194 & 0{,}04972 \\ 0{,}02912 & 0{,}07941 & 0{,}05721 & -0{,}32261 & 0{,}15686 \\ 0{,}03315 & 0{,}04130 & 0{,}14360 & 0{,}16352 & -0{,}38158 \end{pmatrix}.$$

Dále spočítáme odhad rozptylu, tentokrát pouze s využitím posloupnosti získané Gibbsovým výběrovým plánem v MCMC algoritmu (viz Tabulka 6.12) a 95procentní intervaly spolehlivosti (viz Tabulka 6.13).

	1	2	3	4	5
1	–	0,0177639	0,0381327	0,0310566	0,0142512
2	0,0019703	–	0,0038657	0,0010007	0,0003792
3	0,0010689	0,0023785	–	0,0037629	0,0020136
4	0,0009069	0,0029080	0,0023409	–	0,0031063
5	0,0012686	0,0015343	0,0076426	0,0111217	–

Tabulka 6.12: Rozptyl MCMC odhadu při týdenním pozorování.

		1	2	3	4	5
1	b_l	–	0,13640	0,10800	0,15499	0,08742
	b_u	–	0,15338	0,13287	0,17743	0,10262
2	b_l	0,03145	–	0,18433	0,03002	0,01787
	b_u	0,03710	–	0,19225	0,03405	0,02035
3	b_l	0,02468	0,06450	–	0,13803	0,04866
	b_u	0,02884	0,07071	–	0,14584	0,05258
4	b_l	0,02721	0,07598	0,05413	–	0,15331
	b_u	0,03104	0,08285	0,06029	–	0,16041
5	b_l	0,03088	0,03881	0,13804	0,15681	–
	b_u	0,03542	0,04379	0,14917	0,17024	–

Tabulka 6.13: Intervaly spolehlivosti při týdenním pozorování.

Rozptyly odhadů pro týdenní pozorování vycházejí o poznání vyšší než při denní frekvenci, což odpovídá našemu očekávání. Na závěr rozboru už jen porovnáme odhady pomocí normy rozdílu od zadané matice (viz Tabulka 6.14).

	odchylka
odhad výpočtem ze spojité trajektorie	0,120115
odhad výpočtem z diskrétní trajektorie	0,564106
EM algoritmus	0,551701
MCMC algoritmus	0,493868

Tabulka 6.14: Porovnání odhadů z týdenního pozorování.

Odchylka při odhadu ze spojité trajektorie samozřejmě zůstává stejná, vidíme ale velký nárůst v dalších řádcích tabulky. To potvrzuje naše prvotní očekávání, že při méně frekventovaném pozorování dochází ke větší nepřesnosti odhadů. I nadále ale platí, že z diskrétních odhadů dopadl nejhůře výpočet z matice pravděpodobnosti přechodu a nejlépe pak odhad z MCMC algoritmu.

6.5 Měsíční pozorování

Poslední výběr diskrétních pozorování bude probíhat na měsíční bázi. Z pětiletého období získáváme pouze 61 hodnot, odhady tedy zřejmě budou nepřesné.

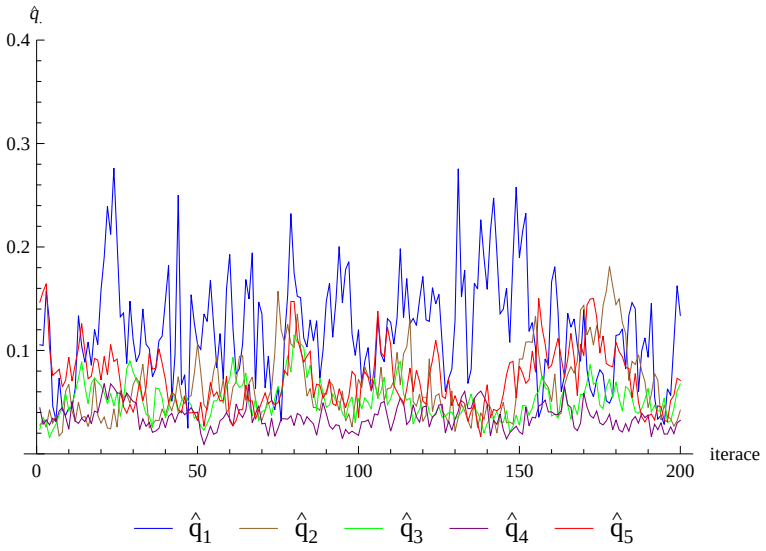
Odhad výpočtem přes matici pravděpodobností přechodu i tentokrát proběhl bez problémů a dostáváme výsledek

$$\widehat{\mathbf{Q}}^D = \begin{pmatrix} -0{,}15506 & 0{,}09523 & 0 & 0 & 0{,}05984 \\ 0 & -0{,}03896 & 0{,}00309 & 0{,}01485 & 0{,}02101 \\ 0{,}00536 & 0{,}00868 & -0{,}04669 & 0{,}03265 & 0 \\ 0{,}01283 & 0{,}00015 & 0{,}00090 & -0{,}02439 & 0{,}01051 \\ 0 & 0 & 0{,}05767 & 0 & -0{,}05767 \end{pmatrix}.$$

EM algoritmus běžel tentokrát přes 182 iterací v celkové době 3 hodiny, 41 minut a 17,95 vteřin. Výsledný odhad vypadá následovně

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{EM} = \begin{pmatrix} -0{,}15849 & 0{,}09093 & 0 & 0 & 0{,}06757 \\ 0 & -0{,}03667 & 0{,}00859 & 0{,}00756 & 0{,}02052 \\ 0 & 0{,}00713 & -0{,}03628 & 0{,}02914 & 0 \\ 0{,}01641 & 0{,}00032 & 0{,}00333 & -0{,}02806 & 0{,}00801 \\ 0 & 0 & 0{,}04362 & 0 & -0{,}04362 \end{pmatrix}.$$

Stejně jako u týdenního pozorování proběhl MCMC algoritmus velmi rychle, 1000 iterací skončilo po 6 minutách a 28,46 vteřinách. Znovu si prohlédneme vývoj celkových intenzit (viz Obrázek 6.8). Zvolíme opět *burn-in period* rovnou 50.



Obrázek 6.8: Vývoj celkových intenzit při měsíčním pozorování.

Výsledný odhad matice intenzit pomocí MCMC algoritmu je

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{MC} = \begin{pmatrix} -0{,}12328 & 0{,}03099 & 0{,}03387 & 0{,}01607 & 0{,}04235 \\ 0{,}00902 & -0{,}06253 & 0{,}01659 & 0{,}01325 & 0{,}02368 \\ 0{,}00447 & 0{,}00780 & -0{,}04946 & 0{,}03107 & 0{,}00612 \\ 0{,}00751 & 0{,}01205 & 0{,}00906 & -0{,}03972 & 0{,}01110 \\ 0{,}00714 & 0{,}01036 & 0{,}03831 & 0{,}00706 & -0{,}06283 \end{pmatrix}.$$

Napočítáme rozptyl odhadu posloupnosti z MCMC algoritmu (viz Tabulka 6.15) a 95procentní intervaly spolehlivosti (viz Tabulka 6.16).

	1	2	3	4	5
1	–	0,0010230	0,0020688	0,0006199	0,0019741
2	0,0002318	–	0,0003863	0,0002557	0,0005464
3	0,0000328	0,0000924	–	0,0002483	0,0000721
4	0,0000663	0,0001380	0,0001395	–	0,0001157
5	0,0001049	0,0002591	0,0003749	0,0001048	–

Tabulka 6.15: Rozptyl MCMC odhadu při měsíčním pozorování.

		1	2	3	4	5
1	b_l	–	0,32461	0,02129	0,00443	0,00259
	b_u	–	0,33058	0,02346	0,00511	0,00304
2	b_l	0,10094	–	0,25400	0,00756	0,00100
	b_u	0,10269	–	0,25666	0,00839	0,00118
3	b_l	0,00321	0,17447	–	0,23363	0,00208
	b_u	0,00359	0,17622	–	0,23568	0,00237
4	b_l	0,00120	0,00245	0,30049	–	0,23318
	b_u	0,00139	0,00284	0,30329	–	0,23567
5	b_l	0,00111	0,00174	0,01107	0,34232	–
	b_u	0,00131	0,00202	0,01235	0,34603	–

Tabulka 6.16: Intervaly spolehlivosti při měsíčním pozorování.

Závěrem už jen porovnáme odhady, znovu na základě normy rozdílu (viz Tabulka 6.17). Zde vidíme změnu oproti předchozím srovnáním, odhad z EM algoritmu vychází méně přesný než odhad výpočtem z matice pravděpodobností přechodu. Důvod můžeme hledat v tom, že jsme algoritmus nenechali doběhnout k zadanému ϵ, a to hlavně z důvodu velké časové náročnosti výpočtů.

	odchylka
odhad výpočtem ze spojité trajektorie	0,120115
odhad výpočtem z diskrétní trajektorie	0,904573
EM algoritmus	0,903793
MCMC algoritmus	0,884495

Tabulka 6.17: Porovnání odhadů z měsíčního pozorování.

6.6 Vliv frekvence pozorování

Doteď jsme porovnávali metody odhadování jen v rámci jednotlivých podkapitol, tedy v rámci jedné frekvence. Nyní sepíšeme všechny předchozí výsledky dohromady, abychom si mohli udělat představu o tom, jak frekvence pozorování ovlivňuje přesnost odhadu a také délku výpočtu (viz Tabulky 6.18 a 6.19).

	denní	týdenní	měsíční
Výpočet ze spojité trajektorie	0,120115	0,120115	0,120115
Výpočet z diskrétní trajektorie	0,157336	0,564106	0,904573
EM algoritmus	0,150683	0,551701	0,903793
MCMC algoritmus	0,143376	0,493868	0,884495

Tabulka 6.18: Vliv frekvence pozorování na přesnost odhadu.

	EM algoritmus	MCMC algoritmus
denní	1 h 26 min 14,51 s	2 h 11 min 44,87 s
týdenní	5 h 22 min 12,15 s	24 min 25,68 s
měsíční	3 h 41 min 17,95 s	6 min 28,46 s

Tabulka 6.19: Vliv frekvence pozorování na dobu výpočtu.

Z odhadů pro diskrétní trajektorii ve všech případech vychází nejlépe MCMC algoritmus a nejhůře odhad výpočtem přes matici pravděpodobností přechodu.

Zatímco časová náročnost u EM algoritmu při snížení frekvence pozorování roste, u MCMC algoritmu je tento vývoj přesně opačný. Náročnost v EM algoritmu způsobuje hlavně řešení dvou soustav diferenciálních rovnic. *Mathematica* tyto soustavy řeší na intervalu odpovídajícímu rozestupu jednotlivých pozorování. Pro nižší frekvenci pozorování, a tedy i delší interval, pak roste doba výpočtu. Naproti tomu zkracování času výpočtu u MCMC algoritmu způsobuje snížení počtu úseků, na kterých simulujeme trajektorie.

6.7 Vliv délky pozorování

Poslední část této simulační studie se bude zabývat vlivem délky pozorování. Podíváme se, jak ovlivňuje přesnost odhadu matice intenzit volba časového intervalu, na němž data pozorujeme. Nasimulujeme znovu s maticí intenzit $\mathbf{Q}$ spojitou trajektorii, tentokrát ale bude její délka dvojnásobná, tedy 10 let. Odpovídající časový interval ve dnech je [0,3600]. Získáváme následující odhady matic.

- Odhad ze spojité trajektorie:

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{S} = \begin{pmatrix} -0{,}31303 & 0{,}31303 & 0 & 0 & 0 \\ 0{,}09806 & -0{,}36708 & 0{,}26902 & 0 & 0 \\ 0 & 0{,}17627 & -0{,}40752 & 0{,}23125 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}29586 & -0{,}54688 & 0{,}25103 \\ 0 & 0 & 0 & 0{,}39471 & -0{,}39471 \end{pmatrix}.$$

- Odhad z diskrétní trajektorie výpočtem:

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{D} = \begin{pmatrix} -0{,}35636 & 0{,}33078 & 0{,}02529 & 0 & 0{,}00029 \\ 0{,}10337 & -0{,}37275 & 0{,}25854 & 0{,}01084 & 0 \\ 0{,}00173 & 0{,}18598 & -0{,}43417 & 0{,}24646 & 0 \\ 0{,}00083 & 0 & 0{,}31615 & -0{,}56725 & 0{,}25027 \\ 0 & 0 & 0{,}01013 & 0{,}35196 & -0{,}36209 \end{pmatrix}.$$

- Odhad z diskrétní trajektorie pomocí EM algoritmu (43 iterací za 1 hodinu, 24 minut a 19,35 vteřin):

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{EM} = \begin{pmatrix} -0{,}35437 & 0{,}33105 & 0{,}02332 & 0 & 0 \\ 0{,}10319 & -0{,}36903 & 0{,}25987 & 0{,}00597 & 0 \\ 0{,}00213 & 0{,}18011 & -0{,}42076 & 0{,}23851 & 0 \\ 0{,}00021 & 0 & 0{,}30847 & -0{,}54609 & 0{,}23741 \\ 0 & 0 & 0{,}00896 & 0{,}34929 & -0{,}35825 \end{pmatrix}.$$

- Odhad z diskrétní trajektorie pomocí MCMC algoritmu (1000 iterací za 4 hodiny, 29 minut a 27 vteřin, burn-in 5):

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{MC} = \begin{pmatrix} -0{,}35756 & 0{,}32760 & 0{,}02238 & 0{,}00477 & 0{,}00282 \\ 0{,}10182 & -0{,}36621 & 0{,}25533 & 0{,}00798 & 0{,}00109 \\ 0{,}00340 & 0{,}17534 & -0{,}41561 & 0{,}23465 & 0{,}00222 \\ 0{,}00130 & 0{,}00264 & 0{,}30189 & -0{,}54025 & 0{,}23442 \\ 0{,}00121 & 0{,}00188 & 0{,}01171 & 0{,}34418 & -0{,}35898 \end{pmatrix}.$$

Z výsledků je patrné, že odhady se při použití většího vstupního datového souboru více přiblížily zadané matici intenzit přechodu $\mathbf{Q}$, což je vývoj, který bychom předpokládali.

Objektivní porovnání provedeme opět na základně maticové normy rozdílu (viz Tabulka 6.20).

	pětileté pozorování	desetileté pozorování
Výpočet ze spojité trajektorie	0,120115	0,092412
Výpočet z diskrétní trajektorie	0,157336	0,136961
EM algoritmus	0,150683	0,135085
MCMC algoritmus	0,143376	0,135553

Tabulka 6.20: Vliv délky pozorování na přesnost odhadu.

U všech odhadů došlo ke zpřesnění, největší skok pozorujeme u výpočtu ze spojité trajektorie. Pro diskrétní trajektorii vychází tentokrát nejpřesněji odhad z EM algoritmu. To je zřejmě způsobeno simulacemi delších trajektorií v jednotlivých iteracích MCMC algoritmu. Výpočet přes matici pravděpodobnosti nadále zůstává nejhorší variantou odhadu.

Porovnejme nyní ještě doby výpočtů (viz Tabulka 6.21).

	EM algoritmus	MCMC algoritmus
pětileté pozorování	1 h 26 min 14,51 s	2 h 11 min 44,87 s
desetileté pozorování	1 h 24 min 19,35 s	4 h 29 min 27,30 s

Tabulka 6.21: Vliv délky pozorování na dobu výpočtu.

Výpočet přes EM algoritmus trvá přibližně stejně dlouhou dobu, protože délka pozorování nemá žádný vliv na řešení diferenciálních rovnic, které jsou výpočetně nejnáročnější částí algoritmu. Projeví se až při počítání středních dob setrvání ve stavech a středních počtech přeskoků, a to ve formě delší sumy, což pro program nepředstavuje složitější problém. Oproti tomu MCMC algoritmus trval znatelně déle než pro pětileté pozorování, neboť v každé iteraci je potřeba zamítací metodou poskládat novou desetiletou trajektorii.

Na závěr se ještě podívejme na změnu rozptylu pro odhad z MCMC algoritmu (viz Tabulka 6.22), vidíme, že větší rozsah pozorování podle očekávání zmenšil rozptyl odhadů.

	1	2	3	4	5
1	–	0,0022982	0,0003060	0,0000300	0,0000129
2	0,0001959	–	0,0004584	0,0000440	0,0000022
3	0,0000092	0,0001978	–	0,0002711	0,0000056
4	0,0000023	0,0000101	0,0005053	–	0,0004001
5	0,0000026	0,0000052	0,0001046	0,0008912	–

Tabulka 6.22: Rozptyl MCMC odhadu při desetiletém denním pozorování.

Kapitola 7

Závěr

Cílem této diplomové práce bylo odhadnout co nejlépe matici intenzit Markovova řetězce se spojitým časem na základně diskrétně pozorovaných hodnot, dále veškeré postupy naprogramovat ve zvoleném softwaru a s jejich pomocí demonstrovat efektivitu algoritmů pro vhodně vybranou matici intenzit.

Teoretický rozbor začal s jednoduchým přístupem ke spojitému pozorování, pro které snadno napočítáme dobu strávenou v jednotlivých stavech a také četnosti přeskoků mezi stavy. Pomocí metody maximální věrohodnosti pak získáme odhad matice. V simulační studii tento odhad podle očekávání vycházel nepřesněji a nebyl problém jej dopočítat. V praxi ale takovou trajektorii zpravidla k dispozici mít nebudeme, odhad tedy sloužil hlavně pro porovnávání.

Při diskrétní trajektorii byla nejprve popsána myšlenkově jednoduchá, ale technicky obtížnější aplikace předchozího postupu, u které se využívalo maticového logaritmu. Tato metoda nemusí dávat jednoznačný výsledek, protože potřebná funkce není prostá, metoda dokonce nemusí být ani řešitelná. Při simulační studii žádný problém s výpočtem nenastal, zlogaritmovanou matici jsme vždy v závěru výpočtu upravili tak, aby splňovala předpoklady definice matice intenzit přechodu Markovova řetězce. Výsledek jsme tedy dostali ve všech případech okamžitě, ale tento odhad pro diskrétní pozorování byl podle očekávání nejméně přesný.

Náročnější postup odhadu pak následoval v další kapitole v podobě EM algoritmu. V textu byly popsané dva odlišné postupy, kterými můžeme získat výsledky pro E-krok, a to buď vyřešením soustavy diferenciálních rovnic, nebo přes uniformizační metodu. Pro konvergenci získané posloupnosti odhadů pak musí být splněné určité podmínky pro vybranou počáteční matici intenzit. V simulační studii jsme zvolili výpočet přes soustavu diferenciálních rovnic a využili jsme předchozí odhad jako vstupní matici. Ověřili jsme také, že algoritmus dával lepší výsledky než předchozí postup. Z výsledků dále vyplývá, že EM algoritmus je vhodnější spíše pro vyšší frekvence pozorování, délka pozorování pak již vliv na čas výpočtu nemá.

Posledním postupem pro odhad matice intenzit přechodu byl MCMC algoritmus, u kterého dochází k velkému množství simulací, z nich se vytváří odhady, které se na závěr zprůměrují. V simulační studii jsme prováděli vždy 1000 iterací a prvních 5 výsledků jsme vyřadili v rámci tzv. burn-in period, abychom odstranili vliv volby vstupních parametrů. Ty jsme vybrali opět na základě prvního odhadu. Z výsledků je patrné, že MCMC algoritmus je vhodnější pro menší frekvence pozorování a také pro kratší trajektorie.

Přiložená simulační studie byla prováděna na uměle vytvořené matici intenzit z modelu telefonní ústředny. V případném rozšíření této práce by bylo například možné postupy testovat na reálných datech od vybrané ratingové agentury, kde bychom zkoumali přechody konkrétní společnosti mezi jednotlivými ratingovými kategoriemi. Zároveň by bylo možné testovat odhady pro více pozorovaných trajektorií, jak bylo naznačeno v páté kapitole.

Seznam použité literatury

[1] Anděl, J.: *Základy matematické statistiky*, 2002, Karolinum, Praha.

[2] Bladt, M.,Meini, B.,Neuts, M.F.,Sericola, B.: *Distribution of reward function on continuous-time Markov chains*, 2002, Matrix-analytics Methods: Theory and Applications, Singapore: World Scientific Publishing Company, 1-4.

[3] Bladt, M., Sorensen, M.: *Efficient estimation of transition rates between credit ratings from observation at discrete time points*, 2009, Quantitative Finance 9, 147-160.

[4] Bladt, M., Sorensen, M.: *Statistical Interference for discretely observed Markov jump processes*, 2005, Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Statistical Methodology), Vol 67, No. 3, 395-410.

[5] Frigyik, B. A., Kapila, A., Gupta, M. R.: *Introduction to the Dirichlet Distribution and Related Processes*, 2010, UWEE Technical Report, Department of Electrical Engineering, University of Washington, Seattle, 9-14.

[6] Gupta, M. R., Chen, Y.: *Theory and Use of the EM Algorithm*, 2011, Foundations and Trends in Signal Processing, Vol. 4, No 3, 223-296, DOI 10.1561/2000000034.

[7] Hobolth, A., Jensen, J. L.: *Summary statistics for end-point conditioned continuous-time Markov chains*, 2011, Journal of Applied Probability, Vol. 48, No. 4, 911-924.

[8] Hušková, M.: *Bayesovské metody*, 1985, Státní pedagogické nakladatelství, Praha, 1-35.

[9] Inamura, Y.: *Estimating Continuous Time Transition Matrices from Dicretely Observed Data*, 2006, Bank of Japan Working Paper Series, No. 06-E07.

[10] Israel, R. B., Rosenthal, J. S., Wei, J. Z.: *Finding generators for Markov chains via empirical transition matrices, with applications to credit ratings*, 2001, Mathematical Finance 11, 245-265.

[11] Lachout, P.: *Teorie pravděpodobnosti*, 2004, Karolinum, Praha.

[12] MacKay, D. J. C.: *Information Theory, Interference and Learning Algorithms*, 2005, Cambridge University Press, Version 7.2, 281-466.

[13] McLachlan, G. J., Krishnan, T.: *The EM Algorithm and Extensions*, 1997, New Yersey, Wiley Series in Probability and Statistics, Second Edition, 1-84, ISBN 978-0-471-20170-0.

[14] Oakes, D.: *Direct calculation of the information matrix via the EM algorithm*, 1999, Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Statistical Methodology), Vol 61, No. 2, 479-482.

[15] Oetiker, T., Partl, H., Hyna, I., Schlegl, E.: *Ne příliš stručný úvod do systému LaTeX 2ε*, 1996, verze 2.2-Beta, překlad CZ-0.9-Beta (Kočer, M., Sýkora, P.), https://www.cstug.cz/documentation/lshortcz.html, datum přístupu 27.11.2013.

[16] Prášková, Z., Lachout, P.: *Základy náhodných procesů*, 1998, Karolinum, Praha, ISBN 80-7184-688-0.

[17] Schuette, Ch., Metzner, P.: *Markov Chain and Jump Processes: An Introduction to Markov Chain and Jump Processes on Countable State Spaces*, 2009, Berlin, 51-60.

[18] Trench, W. F.: *The Method of Lagrange Multipliers*, 2012, a supplement to the Introduction to Real Analysis, Trinity University, Texas, 1-8, ISBN 0-13-045786-8.

Seznam obrázků

6.1 Trajektorie zadaného Markovova řetězce v prvním měsíci. 40
6.2 Denní pozorování v rámci prvního měsíce. 41
6.3 MCMC trajektorie a trajektorie ze zadání při denním pozorování. 45
6.4 Vývoj celkových intenzit při denním pozorování. 47
6.5 Týdenní pozorování v rámci prvního měsíce. 49
6.6 MCMC trajektorie a trajektorie ze zadání při týdenním pozorování. 50
6.7 Vývoj celkových intenzit při týdenním pozorování. 51
6.8 Vývoj celkových intenzit při měsíčním pozorování. 53

Seznam tabulek

6.1 Doby setrvání ve stavech ve spojité trajektorii. 40
6.2 Četnosti přeskoků ve spojité trajektorii. 41
6.3 Četnosti přeskoků při denním pozorování. 42
6.4 Doby setrvání ve stavech v EM algoritmu při denním pozorování. 43
6.5 Četností přeskoků v EM algoritmu při denním pozorování. 43
6.6 Doby setrvání ve stavech v MCMC algoritmu při denním pozorování. 46
6.7 Četnosti přeskoků v MCMC algoritmu při denním pozorování. . . 46
6.8 Rozptyl MCMC odhadu při denním pozorování. 48
6.9 Rozptyl s využitím EM odhadu při denním pozorování. 48
6.10 Intervaly spolehlivosti při denním pozorování. 48
6.11 Porovnání odhadů z denního pozorování. 49
6.12 Rozptyl MCMC odhadu při týdenním pozorování. 51
6.13 Intervaly spolehlivosti při týdenním pozorování. 52
6.14 Porovnání odhadů z týdenního pozorování. 52
6.15 Rozptyl MCMC odhadu při měsíčním pozorování. 53
6.16 Intervaly spolehlivosti při měsíčním pozorování. 54
6.17 Porovnání odhadů z měsíčního pozorování. 54
6.18 Vliv frekvence pozorování na přesnost odhadu. 54
6.19 Vliv frekvence pozorování na dobu výpočtu. 55
6.20 Vliv délky pozorování na přesnost odhadu. 56
6.21 Vliv délky pozorování na dobu výpočtu. 56
6.22 Rozptyl MCMC odhadu při desetiletém denním pozorování. . . . 57

Příloha 1

V této části se vrátíme k Lemmatu 3.2, str. 19, a doplníme důkaz, který jsme z důvodu technické náročnosti neuváděli v příslušné části práce. Připomeňme ale nejprve některá důležitá označení.

- $X(t)$ je homogenní Markovův řetězec se spojitým časem, který může nabývat stavů $\{1,\ldots,m\}$, s maticí intenzit přechodu $\mathbf{Q}$.
- $N_{ij}(\sigma,\tau)$ pro $i,j = 1,\ldots,m$, $i \neq j$ značí počet přeskoků řetězce ze stavu i do stavu j v časovém intervalu $[\sigma,\tau]$, kde $\sigma \leq \tau$. Zkráceně budeme značit $N_{ij}(\tau) = N_{ij}(0,\tau)$ pro $\tau \geq 0$.
- $R_i(\sigma,\tau)$ pro $i = 1,\ldots,m$ značí celkový čas strávený řetězcem ve stavu i v časovém intervalu $[\sigma,\tau]$, kde $\sigma \leq \tau$. Analogicky předchozímu budeme značit $R_i(\tau) = R_i(0,\tau)$ pro $\tau \geq 0$.

Lemma 3.2. *([2], Theorem 2.1) Nechť $\boldsymbol{s} = (s_1,\ldots,s_m)^T$ je vektor reálných čísel a $\boldsymbol{Z} = (z_{ab})_{a,b=1}^m$ je reálná $m \times m$ matice s jedničkami na diagonále. Označme následující podmíněnou střední hodnotu*

$$V_{ij}^*(\boldsymbol{s},\boldsymbol{Z},t) = \mathsf{E}\left[\exp\left(-\sum_{l=1}^m s_l R_l(t)\right)\prod_{a,b=1}^m z_{ab}^{N_{ab}(t)}\mathbb{I}\big(X(t)=j\big)|X(0)=i\right], \quad t \geq 0.$$

Pak platí, že

$$V^*(\boldsymbol{s},\boldsymbol{Z},t) = \exp\Big(\big[\boldsymbol{Q} * \boldsymbol{Z} - diag(\boldsymbol{s})\big]t\Big),$$

kde $*$ značí Hadamardův součin, tedy $(\boldsymbol{Q} * \boldsymbol{Z})_{ab} = (\boldsymbol{Q})_{ab}(\boldsymbol{Z})_{ab}$.

Důkaz. Nechť $\mathbf{x}$ je vektor s nezápornými reálnými prvky x_i, $i = 1,\ldots,m$, a nechť $\mathbf{K}$ je matice o rozměrech $m \times m$ s nezápornými celočíselnými prvky K_{hk} pro $h,k = 1,\ldots,m$ a jedničkami na diagonále.

Označme dále pro $t \geq 0$ následující podmíněnou pravděpodobnost

$$\begin{aligned} V_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{K},t) = &P\big(R_l(t) = x_l,\ 1 \leq l \leq m;\ N_{hk}(t) = K_{hk},\ 1 \leq h,k \leq m,\ h \neq k;\\ &X(t) = j|X(0) = i\big). \end{aligned}$$

Veličina $V_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{K},t)$ tedy vyjadřuje pravděpodobnost, že Markovův řetězec se spojitým časem $X(t)$ vycházející v čase 0 ze stavu i bude v okamžiku t ve stavu j, stráví v jednotlivých stavech doby odpovídající prvkům vektoru $\mathbf{x}$ a počty přeskoků mezi navzájem různými stavy se budou řídit prvky matice $\mathbf{K}$ s příslušnými indexy.

Chování řetězce na časovém intervalu $[0,t]$ můžeme rozložit na dvě situace.

- Na daném intervalu nedojde k žádnému přeskoku, to nastává podle Věty 1.9, str. 10, s pravděpodobností

$$P\big(X(\tau)=i,\, 0\le\tau\le t|X(0)=i\big)=e^{-q_i t}.$$

  Protože nedošlo k žádnému přeskoku, musí také ve vyjádření $V_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{K},t)$ platit, že $i=j$, $K=I$ a $\mathbf{x}=t\ \mathbf{e}_i$.

- K prvnímu přeskoku dojde v čase $u\in(0,t)$ a řetězec přeskočí do nějakého stavu $r\in\{1,\ldots,m\}\setminus\{i\}$. Doba strávená ve stavu i má podle Věty 1.10, str. 10, rozdělení $Exp(q_i)$ s hustotou $f(u)=q_i\ e^{-q_i u}$ a pravděpodobnost, že při přeskoku řetězec skončí ve stavu r je $\frac{q_{ir}}{q_i}$.

S využitím těchto znalostí můžeme sestavit rekurentní rovnici

$$\begin{aligned}V_{ij}\,(\mathbf{x},\mathbf{K},t)&=\\&=\delta_{ij}\ e^{q_{ii}t}\mathbb{I}(\mathbf{K}=\mathbf{I})\mathbb{I}(\mathbf{x}=t\ \mathbf{e}_i)+ &(1)\\&+\sum_{r\neq i}\int_0^t e^{q_{ii}u}q_{ir}V_{rj}\,(\mathbf{x}-u\ \mathbf{e}_i,\mathbf{K}-\mathbf{1}_{ir},t-u)\ du. &(2)\end{aligned}$$

Veličinu $V_{ij}\,(\mathbf{x},\mathbf{K},t)$ transformujeme podle následujícího vztahu

$$V^0_{ij}(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)=\int_0^\infty\ldots\int_0^\infty\sum_{K_{hk}}\prod_{h,k=1}^m z_{hk}^{K_{hk}}\exp\left(-\sum_{l=1}^m s_l x_l\right)V_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{K},t)\ dx_1\ldots dx_m.$$

Protože rekurentní vyjádření veličiny $V_{ij}\,(\mathbf{x},\mathbf{K},t)$ je tvořeno součtem členů (1) a (2), můžeme transformovat každý sčítanec zvlášť a výsledky sečíst. Nejprve tedy budeme transformovat sčítanec (1).

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty\ldots\int_0^\infty\sum_{K_{hk}}\prod_{h,k=1}^m z_{hk}^{K_{hk}}\exp\left(-\sum_{l=1}^m s_l x_l\right)\delta_{ij}\ e^{q_{ii}t}\cdot\\&\qquad\cdot\mathbb{I}(\mathbf{K}=\mathbf{I})\mathbb{I}(\mathbf{x}=t\mathbf{e}_i)\ dx_1\ldots dx_m=\\&=\int_0^\infty\ldots\int_t^\infty\ldots\int_0^\infty\delta_{ij}\ e^{q_{ii}t}\exp\left(-\sum_{l=1}^m s_l x_l\right)\ dx_1\ldots dx_i\ldots dx_m=\\&=\delta_{ij}\ e^{q_{ii}t}\int_0^\infty\ldots\int_t^\infty\ldots\int_0^\infty\exp\left(-\sum_{l=1}^m s_l x_l\right)\ dx_1\ldots dx_i\ldots dx_m=\\&=\delta_{ij}\ e^{q_{ii}t}e^{-s_i t}\frac{1}{s_1\ldots s_m}.\end{aligned}$$

Druhý sčítanec (2) transformujeme takto:

$$\int_0^\infty \dots \int_0^\infty \sum_{K_{hk}} \prod_{h,k=1}^{m} z_{hk}^{K_{hk}} \exp\left(-\sum_{l=1}^{m} s_l x_l\right) \cdot$$

$$\cdot \sum_{r\neq i} \int_0^t e^{q_{ii}u} q_{ir} V_{rj}\left(\mathbf{x} - u\ \mathbf{e}_i, \mathbf{K} - \mathbf{1}_{ir}, t-u\right)\ du\ dx_1 \dots dx_m =$$

$$= \sum_{r\neq i} \int_0^t e^{q_{ii}u} q_{ir} \int_0^\infty \dots \int_u^\infty \dots \int_0^\infty \sum_{K_{hk}} \prod_{h,k=1}^{m} z_{hk}^{K_{hk}} \exp\left(-\sum_{l=1}^{m} s_l x_l\right) \cdot$$

$$\cdot V_{rj}\left(\mathbf{x} - u\ \mathbf{e}_i, \mathbf{K} - \mathbf{1}_{ir}, t-u\right)\ dx_1 \dots dx_i \dots dx_m\ du =$$

$$= \sum_{r\neq i} \int_0^t e^{(q_{ii}-s_i)u} q_{ir}\ z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t-u)\ du =$$

$$= \sum_{r\neq i} \int_0^t e^{(q_{ii}-s_i)(t-u)} q_{ir}\ z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},u)\ du.$$

Dohromady máme

$$V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) = \delta_{ij}\ e^{(q_{ii}-s_i)t} \frac{1}{s_1 \dots s_m} + \sum_{r\neq i} \int_0^t e^{(q_{ii}-s_i)(t-u)} q_{ir}\ z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},u)\ du.$$

$$V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) e^{(s_i-q_{ii})t} = \delta_{ij} \frac{1}{s_1 \dots s_m} + \sum_{r\neq i} \int_0^t e^{(s_i-q_{ii})u} q_{ir}\ z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},u)\ du.$$

Nyní celou rovnici zderivujeme podle t. Pro přehlednost budeme derivovat každou stranu rovnice zvlášť. Dostáváme

$$(LS): \qquad \frac{d}{dt}\left(V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) e^{(s_i-q_{ii})t}\right) =$$

$$= \frac{d}{dt}\left(V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right) e^{(s_i-q_{ii})t} + V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) e^{(s_i-q_{ii})t}(s_i - q_{ii}),$$

$$(PS): \qquad \frac{d}{dt}\left(\delta_{ij} \frac{1}{s_1 \dots s_m} + \sum_{r\neq i} \int_0^t e^{(s_i-q_{ii})u} q_{ir}\ z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},u)\ du\right) =$$

$$= \sum_{r\neq i} e^{(s_i-q_{ii})t} q_{ir}\ z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t).$$

Oba výrazy dáme znovu do rovnosti.

$$\frac{d}{dt}\left(V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right) e^{(s_i-q_{ii})t} + V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) e^{(s_i-q_{ii})t}(s_i - q_{ii}) = \sum_{r\neq i} e^{(s_i-q_{ii})t} q_{ir} z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t),$$

$$\frac{d}{dt}\left(V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right) = -s_i V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) + q_{ii} V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) + \sum_{r\neq i} q_{ir} z_{ir} V_{rj}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t),$$

$$\frac{d}{dt}\left(V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right) = -s_i V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) + \left((\mathbf{Q} * \mathbf{Z}) V^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right)_{ij}. \tag{3}$$

Vyjádříme počáteční podmínku

$$V_{ij}^0(\mathbf{s},\mathbf{Z},0) = \delta_{ij} \frac{1}{s_1 \dots s_m}.$$

Hledané $V^*_{ij}(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)$ pak získáme pomocí další transformace

$$V^*_{ij}(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) = s_1 \dots s_m \; V^0_{ij}(\mathbf{s},\mathbf{Z},t),$$

pak platí stejná diferenciální rovnice (3), jen s jinou počáteční podmínkou.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left(V^*_{ij}(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right) &= -s_i V^*_{ij}(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) + \left((\mathbf{Q}*\mathbf{Z})V^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right)_{ij}, \\ \frac{d}{dt}\left(V^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\right) &= -diag(\mathbf{s})\; V^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) + (\mathbf{Q}*\mathbf{Z})\; V^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},t)\,, \\ V^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},0) &= \mathbf{I}. \end{aligned} \tag{4}$$

Na závěr nalezneme řešení této diferenciální rovnice (4), které vypadá následovně

$$V^*(\mathbf{s},\mathbf{Z},t) = \exp\Big(\big[\mathbf{Q}*\mathbf{Z} - diag(\mathbf{s})\big]t\Big).$$

❑