

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta



PROSTOROVÁ STATISTIKA BODOVÝCH PROCESŮ S APLIKACEMI

DISERTAČNÍ PRÁCE

Mgr. Radka Lechnerová

Školitel: Prof. RNDr. Viktor Beneš, DrSc.

Studijní obor: m-4 Pravděpodobnost a matematická statistika

Praha, 2010

Poděkování

Děkuji mému školiteli panu prof. RNDr. Viktoru Benešovi, DrSc. za jeho pomoc a odborné vedení během mého doktorského studia. Dále děkuji Ing. Pavlu Ctiborovi z ÚFP AVČR, RNDr. Margatitě Slámové, CSc. a RNDr. Petru Slámovi z VÚK Panenské Břežany za poskytnutí reálných dat a konzultace výsledků jejich zpracování. Zvláštní poděkování patří celé mé rodině za velkou podporu během mého studia.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou disertační práci napsala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 15. 3. 2010

Mgr. Radka Lechnerová

Obsah

1	Úvod	7
2	Použité teoretické základy	10
2.1	Morfologické transformace	10
2.2	Modely objektů	13
2.2.1	Parametry objektů	13
2.2.2	Globální charakteristiky, objemový podíl	17
2.3	Bodové procesy	20
2.3.1	Charakteristiky bodových procesů	21
2.3.2	Sumární statistiky	24
2.3.3	Příklady bodových procesů	28
2.3.4	Konečné bodové procesy dané hustotou	33
2.3.5	Markovské bodové procesy	35
2.4	Základy markovských řetězců se spojitou množinou stavů .	36
2.5	MCMC, Metropolis-Hastingsův algoritmus	38
2.6	Lévyho proces	39
2.7	\mathfrak{N} -vzdálenost	42

3 Coxův bodový proces řízený Ornstein-Uhlenbeckovým procesem	45
3.1 Závislosti v dvourozměrných procesech	47
3.2 Nelineární filtrování OUCP	53
3.2.1 Bayesovský přístup s diskretizací	54
3.2.2 Přístup k filtrování ve spojitém čase	59
4 Vícerozměrné dvouvýběrové testy založené na \mathcal{N}-vzdálenosti	64
4.1 Zavedení testů	65
4.2 Síla testu	67
4.3 Použití vícerozměrných dvouvýběrových testů pro modely „zárodek-zrno“	69
4.3.1 Individuální parametry zrn	69
4.3.2 Prostorové rozmištění zárodků	70
4.3.3 Simulační studie	72
5 Aplikace na reálných datech	76
5.1 Porovnání hliníkových fólií	76
5.1.1 Materiál a příprava vzorku	76
5.1.2 Numerické výsledky	77
5.2 Statistická analýza pórů v plazmovém nástřiku	82
5.2.1 Materiál a příprava vzorku	83
5.2.2 Obrazová analýza a 3D rekonstrukce	84
5.2.3 Numerické výsledky	87
5.3 Aplikace bodových procesů ve státní správě	92
5.3.1 Data a metody	92
5.3.2 Numerické výsledky	94

Název práce: Prostorová statistika bodových procesů s aplikacemi

Autorka: Mgr. Radka Lechnerová

Katedra: Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Školitel: Prof. RNDr. Viktor Beneš, DrSc.

Abstrakt: Disertační práce je zaměřena na vybrané modely bodových procesů a metody prostorové statistiky. Nejprve řešíme problém filtrování časových Coxových procesů řízených Ornstein-Uhlenbeckovým procesem v \mathbb{R}^d a rovněž se zabýváme závislostmi mezi složkami řídícího procesu. Dále jsme vyvinuli nový dvouvýběrový test porovnávající modely „zárodek-zrno“ a použití testu demonstrujeme na reálných datech, konkrétně při porovnávání mikrostruktur hliníkových fólií. V závěru práce jsou uvedeny další dvě aplikace na reálných datech, přičemž v první z nich zkoumáme mikrostrukturu plazmového nástřiku a ve druhé z nich analyzujeme rozmístění elektronických podatek úřadů územních samosprávných celků v rámci ČR.

Klíčová slova: bodový proces, sumární statistiky, Coxův proces řízený Ornstein-Uhlenbeckovým procesem, Metropolis-Hastingsův algoritmus, geometrická ergodicita, \mathfrak{N} -vzdálenost, model „zárodek-zrno“, Cavalieriho metoda odhadu objemu

Title: Spatial statistic of point processes with applications

Author: Mgr. Radka Lechnerová

Department: Department of probability and mathematical statistics

Supervisor: Prof. RNDr. Viktor Beneš, DrSc.

Abstract: The doctoral thesis deals with selected models of point processes and spatial statistics methods. We investigate a problem of filtering time Cox process driving by Ornstein-Uhlenbeck process in \mathbb{R}^d and we are interested in dependences between parts of driving process. Then we develop new two-sample tests for germ-grain models and we demonstrate it by means of using these tests to compare microstructures of aluminium alloys. In the end there are presented two applications to real data; the first one is analysis of microstructure of plasma coating and the other one is analysis of distribution of electronic registries of municipalities in the Czech Republic.

Keywords: point process, summary statistics, Cox process driving by Ornstein-Uhlenbeck process, Metropolis-Hastings algorithm, geometrics ergodicity, \mathfrak{N} -distance, germ-grain model, Cavalieri estimation of volume

Použité značení

$(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$	pravděpodobnostní prostor
$\mathcal{L}(X)$	rozdelení náhodné veličiny X
$R(I)$	rovnoměrné rozdelení na množině I
$\stackrel{d}{=}$	rovnost rozdelení
\propto	rovnost až na konstantu úměrnosti
\approx	asymptotická rovnost
\mathbb{R}^d	d -rozměrný Eukleidovský prostor
\mathbb{B}	systém všech podmnožin \mathbb{R}^d
\mathbb{F}	systém všech uzavřených podmnožin \mathbb{R}^d
\mathcal{K}	systém všech konvexních kompaktních podmnožin \mathbb{R}^d
\mathbb{K}	systém všech kompaktních podmnožin \mathbb{R}^d
\mathcal{N}_k	systém konečných podmnožin \mathbb{R}^d
\mathcal{N}_{lk}	systém lokálně konečných podmnožin \mathbb{R}^d
\mathcal{R}	konvexní okruh na \mathbb{R}^d
$\mathcal{B}(\cdot)$	rodina Borelovských podmnožin
$\mathcal{B}_0(\cdot)$	rodina omezených Borelovských podmnožin
E_d	eukleidovská pohybová grupa
o	počátek soustavy souřadnic
$b(x, r)$	koule se středem v x a poloměrem r
δ	Diracovo δ
$\mathbf{1}$	indikátor množiny
$\nu_d(\cdot)$	Lebesgueova míra v \mathbb{R}^d
ω_d	objem jednotkové koule v \mathbb{R}^d
∂A	hranice množiny A
$ \cdot $	eukleidovská norma na \mathbb{R}^d
$d(x, A)$	vzdálenost bodu x od množiny A
$d_H(A, B)$	Hausdorffova vzdálenost množin $A, B \subset \mathbb{R}^d$
V_V	objemový podíl v \mathbb{R}^3
\ominus	Minkovského rozdíl
\oplus	Minkovského součet

•	morfologická operace uzavření
◦	morfologická operace otevření
Φ_{OU}	časový Coxův proces řízený Ornstein-Uhlenbeckovým procesem
$\#(\cdot)$	počet bodů množiny
\sim	sousedství
$\alpha^{(n)}$	faktoriální momentová míra n -tého řádu
λ	intenzita homogenního bodového procesu
$\lambda^{(2)}$	součinová hustota 2. řádu
$\lambda^*(\cdot, \cdot)$	Papangelouova podmíněná intenzita
$F(\cdot)$	sférická kontaktní distribuční funkce
$g(\cdot)$	párová korelační funkce
$G(\cdot)$	distribuční funkce vzdáleností nejbližších sousedů
$J(\cdot)$	J -funkce
$K(\cdot)$	K -funkce
$L(\cdot)$	L -funkce
\mathfrak{N}	\mathfrak{N} -vzdálenost

Kapitola 1

Úvod

Prostorová statistika se zabývá hodnocením dat v Eukleidovském prostoru \mathbb{R}^d , $d \geq 2$. Klasické dělení prostorové statistiky na geostatistiku, data na mříži a bodové procesy pochází z monografií [13], [38]. Předložená disertační práce je zaměřena především na bodové procesy, viz [17], [29], [31], [37], a jejich rozšíření ve stochastické geometrii – modelování a statistiku náhodných množin, viz [33], [43], [44]. Aplikace bodových procesů a náhodných množin najdeme v mnoha vědních oborech, z nichž jmenujeme výzkum materiálů, biologii, astronomii, obrazovou analýzu, epidemiologii atd.

Po uvedení širokých teoretických základů, resp. nutného výběru z nich potřebného k formulaci a řešení stanovených cílů práce, jsou hlavní přínosy a výsledky rozdeleny do tří částí. Nejprve se zabýváme speciálním modelem vícerozměrných časových bodových procesů Coxova typu. V druhé části je vyvinuta statistická metoda pro stochastickou geometrii. Posléze následují tři aplikace prostorové statistiky na reálných datech. Dále o dosažených výsledcích podrobněji.

V kapitole 3 se zabýváme teorií časového Coxova procesu řízeného Ornstein-Uhlenbeckovým procesem v \mathbb{R}^d (OUCP). Negaussovské Ornstein-Uhlenbeckovy procesy byly vyvinuty pro aplikace ve financích, viz [5], [12]. Coxovy procesy založené na Lévyho procesech jsou popsány v [11] a [36]. V práci uvažujeme OUCP, obsahem jsou teoretické výsledky a počítačové simulace. Nejprve se zaměříme na závislost ve vícerozměrných bodových procesech výše zmíněného typu, k tomu je odvozena křížová párová korelační funkce pro dvourozměrný OUCP, viz věta 3.2.

Dále řešíme problém nelineárního filtrování OUCP. Problém filtrování spočívá v odhadnutí náhodné intenzity při daném pozorování výsledného bodového procesu do času T . Obecně lze výsledek filtrování procesu získat řešením stochastických diferenciálních rovnic, viz např. [17], [21], [41], což v praxi vede na obtížný numerický problém. V článku [11] je popsán jiný přístup aplikovaný na filtrování časoprostorových lognormálních Coxových procesů, který používá simulace a kombinuje Bayesovský přístup a MCMC (Markov Chain Monte Carlo). Obdobný postup jsme použili při filtrování OUCP. V této práci jsou popsány dva různé způsoby, při kterých využíváme jak Bayesovský přístup, tak Metropolis-Hastingsův algoritmus rození a zániku z třídy MCMC algoritmů. V prvním z nich provádíme diskretizaci bodového procesu v čase, a tak pracujeme pouze s počtem událostí Coxova bodového procesu v jednotlivých intervalech. Druhý způsob jsme založili na teorii konečných bodových procesů a dokázali geometrickou ergodicitu řetězce generovaného výše zmíněným algoritmem, viz věta 3.3. Parametry popsaného modelu odhadujeme pomocí Newton-Raphsonovy metody. Dosažené výsledky byly publikovány v [8] a [27].

V kapitole 4 se zabýváme statistickým testováním rozdílů mezi dvěma realizacemi náhodné množiny v \mathbb{R}^d . To je problematika, která v základní literatuře o stochastické geometrii není řešena. Pro velmi speciální modely náhodných množin lze najít parametrické testy [43]. Naším cílem je zkonstruovat neparametrický test pro obecnou situaci, kdy je k dispozici malý počet nezávislých pozorování v okně, z nichž se každé sestává z velkého počtu stochasticky nezávislých zrn v modelu „zárodek-zrno“. Test reaguje na rozdíly individuálních charakteristik zrn i prostorového rozmístění zárodků. Teoretickým základem statistické metody jsou \mathfrak{N} -vzdálenosti [24], které umožňují převést mnohorozměrnou úlohu na jednorozměrnou, případně aplikovat přibližné permutační testy. Popsanou metodu používáme k aplikaci porovnání mikrostruktur hliníkových fólií, podkapitola 5.1. Prezentované výsledky byly publikovány v [7], [9] a [25].

V kapitole 5 jsou ukázány tři různé aplikace stochastické geometrie a prostorové statistiky na reálných datech, přičemž první dvě patří do materiálového výzkumu, třetí z nich je součástí výzkumu rozvoje e-Governmentu v ČR. V podkapitole 5.1 porovnáváme mikrostruktury zachycené na řezech tenkých fólií hliníkových slitin pomocí testu vyvinutého v kapitole 4. K faktorům ovlivňujícím mikrostrukturu materiálu patří chemické složení a technologie výroby. Porovnávání mikrostruktur různých vzorků má velký praktický význam při snižování nákladů na výrobu, tj. na změnu technologie tak, aby došlo k úspoře nákladů, a to vše při zachování požado-

vaných vlastností materiálu. V druhé aplikaci v podkapitole 5.2 je náhodnou množinou sjednocení pórů v mikrostruktúre keramického plazmového nástřiku. Cílem je statisticky popsat dvě třídy těchto pórů, globulární resp. interlamelární plošné póry. Informace z neprůhledného trojrozměrného vzorku nástřiku je získána klasickou metalografickou metodou postupného odbrušování. Roviny řezu jsou snímány optickým mikroskopem a zpracovány obrazovou analýzou prostředky matematické morfologie [40]. Trojrozměrná rekonstrukce a odhady statistických charakteristik jsou podrobně popsány. Jedná se o komplexní analýzu složité mikrostruktury, kde opět strukturní geometrické parametry ovlivňují vlastnosti materiálu. Výsledky byly publikovány v [15], [19] a [20]. Ve třetí aplikaci v podkapitole 5.3 je ukázána aplikace bodových procesů ve výzkumu rozsahu elektronizace veřejné správy. Zavádění informačních a komunikačních technologií ve veřejné správě, obecně nazývané jako e-Government, má za cíl celkové zefektivnění výkonu veřejné správy a tím podpoření socioekonomického růstu ČR a zvýšení kvality života občanů. Náš výzkum je zaměřen na aktuální funkční elektronické podatelny úřadů územních samosprávných celků, a to zejména s ohledem na jejich prostorové rozmístění v rámci ČR. Získané výsledky jsou podstatné pro vytvoření celkového obrazu průběhu procesu e-Governmentu v České republice a plnění „Strategie realizace Smart Administration“, která má za cíl zajištění veřejné správy a veřejných služeb celkově přispívajících ke zvyšování konkurenčníschopnosti české ekonomiky. Výsledky byly publikovány v [28].

Součástí disertační práce je rovněž CD s vybranými programy, které byly vytvořeny v rámci prezentovaného výzkumu. Popis jednotlivých programů je součástí CD.

Práce vznikla za podpory Grantové agentury AVČR, projekt IAA101120604.

Kapitola 2

Použité teoretické základy

Mějme Eukleidovský prostor \mathbb{R}^d s borelovskou σ -algebrou $\mathcal{B}(\mathcal{R}^d)$.

2.1 Morfologické transformace

Morfologické transformace jsou jedním z nástrojů matematické morfolologie [40] a užívají se v obrazové analýze na třídě \mathbb{B} všech podmnožin \mathbb{R}^d . Jedná se o binární množinové transformace $\mathbb{B} \times \mathbb{B} \rightarrow \mathbb{B}$. Do této transformace vstupuje kromě transformované množiny A rovněž strukturní prvek (množina) B .

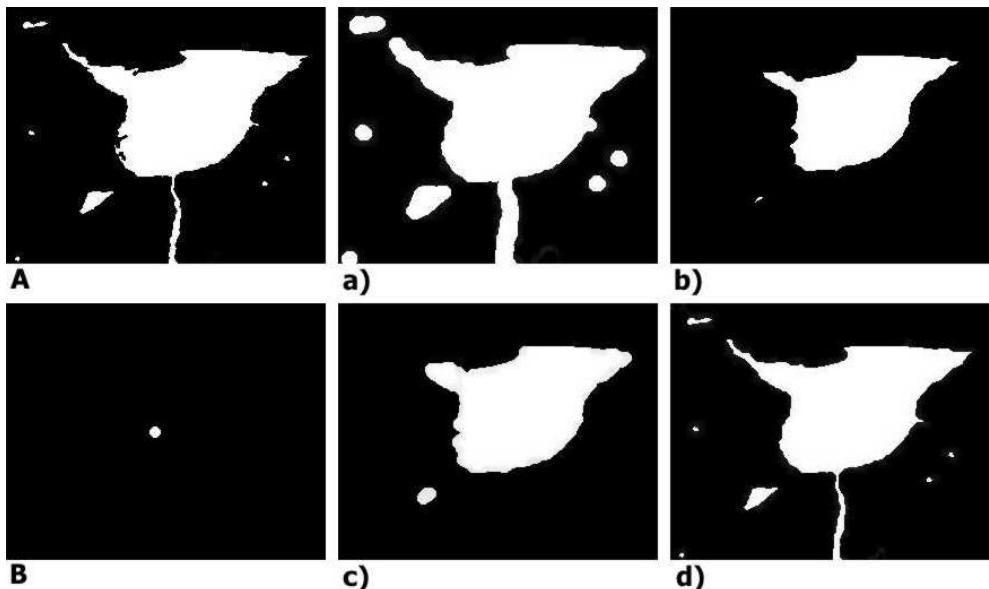
Definice 2.1 Minkovského součet množin $A \in \mathbb{B}$ a $B \in \mathbb{B}$ je množinová operace definována vztahem

$$A \oplus B = \{x + y : x \in A, y \in B\} = \bigcup_{y \in B} (A + y).$$

Označme doplněk množiny $A \in \mathbb{B}$ symbolem A^C .

Definice 2.2 Minkovského rozdíl množin $A \in \mathbb{B}$ a $B \in \mathbb{B}$ je množinová operace definována vztahem

$$A \ominus B = (A^C \oplus B)^C = \bigcap_{y \in B} (A + y).$$



Obr. 2.1: Na obrázku jsou zobrazeny aplikace následujících morfologických transformací na (bílou) množinu A : a) dilatace, b) eroze, c) otevření a d) uzavření. Za strukturní prvek B byl pro všechny transformace zvolen vždy stejný kruh se středem v počátku.

Označme \check{B} symetrickou množinu s množinou B podle počátku soustavy souřadnic (dále jen v „počátku“), tj.

$$\check{B} = -B = \{-x : x \in B\}, \quad B \in \mathbb{B}.$$

Definice 2.3 Morfologickou transformací dilatace množiny $A \in \mathbb{B}$ strukturním prvkem $B \in \mathbb{B}$ rozumíme množinovou operaci, která je definována vztahem

$$A \oplus \check{B} = \{x - y : x \in A, y \in B\}.$$

Definice 2.4 Morfologickou transformací eroze množiny $A \in \mathbb{B}$ strukturním prvkem $B \in \mathbb{B}$ rozumíme množinovou operaci, která je definována vztahem

$$A \ominus \check{B} = \{x \in \mathbb{R}^d : (B + x) \subset A\}.$$

Je-li množina $B \in \mathbb{B}$ symetrická podle počátku, potom dilatace je totožná s Minkovským součtem a eroze je totožná s Minkovským rozdílem.

Složením výše zmíněných transformací vzniknou morfologické transformace otevření a uzavření.

Definice 2.5 Otevření množiny $A \in \mathbb{B}$ strukturním prvkem $B \in \mathbb{B}$ je množinová operace, která je definovaná jako eroze složená s Minkovským součtem, tj.

$$A \circ B = (A \ominus \check{B}) \oplus B. \quad (2.1)$$

Definice 2.6 Uzavření množiny $A \in \mathbb{B}$ strukturním prvkem $B \in \mathbb{B}$ je množinová operace, která je definovaná jako dilatace složená s Minkovským rozdílem, tj.

$$A \bullet B = (A \oplus \check{B}) \ominus B.$$

Na obrázku 2.1 je znázorněna aplikace morfologických transformací dilatace (a), eroze (b), otevření (c) a uzavření (d) na množiny zobrazené bílou barvou (viz A), přičemž jako strukturní množina byl zvolen vždy stejný kruh se středem v počátku (viz B).

Poznámka 2.1 Morfologické transformace jsou také využívány při počítačovém zpracování obrazu. Prvním krokem tohoto zpracování je digitalizace, kdy je obraz např. pomocí digitální kamery nebo scanneru převeden na dvourozměrné pole hodnot, nazývaných pixely. Jednotlivé hodnoty vyjadřují barvu bodu odpovídající použitému barevnému systému. Častou operací při následné úpravě získaného pole hodnot je převod na černobílý obraz, tj. na dvourozměrné pole čísel, z nichž každé je z množiny $0,1$, kde 0 odpovídá černé barvě a 1 barvě bílé. Je-li digitální obraz ve „stupních šedi“, používá se k převodu na černobílý obraz postup zvaný segmentace neboli prahování. Stupně šedi bývají vyjádřené typicky čísla z intervalu $[0, 255]$. Vlastní segmentace pak probíhá tak, že stanovíme tzv. prah p , neboli hodnotu „šedi“, a poté hodnoty 0 až p jsou nahrazeny hodnotou 0 a hodnoty $(p+1)$ až 255 jsou nahrazeny hodnotou 1 .

V takto upraveném (černobílém) obrazu můžeme přímočarým způsobem pomocí vhodných nástrojů obrazového analyzátoru měřit důležité parametry objektů na obrázku zachycených. Např. hodnotu plochy zachyceného objektu odhadneme počtem pixelů bílé resp. černé barvy v příslušné části obrazu a jeho přenásobením vhodným koeficientem závisejícím na konkrétní měřítce zobrazení. Parametrem objektů je věnována kapitola 2.2.

Abychom mohli lépe identifikovat zkoumané objekty, lze obraz upravit pomocí výše zmíněných morfologických transformací. Transformace umožní odstranění nežádoucích obrazových defektů či artefaktů a naopak zachovají (byť určitým způsobem transformované) objekty, jejichž parametry chceme měřit (konkrétní postupy měření jsou uvedeny v [40]). Poznamenejme, že uvedené transformace

v tomto případě aplikujeme na podmnožinu diskrétní sítě dané použitým dvourozměrným polem pixelů. Stejně tak je-li strukturním prvkem např. kruh, potom to v praxi znamená, že pracujeme např. s šestiúhelníkem či osmiúhelníkem (viz obrázek 2.1, B).

Uvedená obrazová analýza byla použita v aplikacích popsaných v kapitolách 5.1 a 5.2.

2.2 Modely objektů

Označme \mathcal{K} systém všech konvexních kompaktních podmnožin \mathbb{R}^d a označme \mathcal{R} konvexní okruh na \mathbb{R}^d , tj. systém všech konečných sjednocení množin z \mathcal{K} .

Lze ukázat, že jestliže $K_1, K_2 \in \mathcal{K}$, potom také $\forall c \in \mathbb{R} : cK_1 \in \mathcal{K}, \check{K}_1 \in \mathcal{K}, K_1 \cap K_2 \in \mathcal{K}, K_1 \oplus K_2 \in \mathcal{K}$.

V případě konvexního okruhu platí, že jestliže $A_1, A_2 \in \mathcal{R}$, potom $A_1 \cup A_2 \in \mathcal{R}$ a $A_1 \cap A_2 \in \mathcal{R}$.

2.2.1 Parametry objektů

Nejprve zavedeme Hausdorffovu vzdálenost množin.

Definice 2.7 Hausdorffova vzdálenost množin $A, B \subset \mathbb{R}^d$ je dána jako

$$d_H(A, B) = \max(\sup_{a \in A} d(a, B), \sup_{b \in B} d(b, A)),$$

kde

$$d(x, A) = \inf_{a \in A} \|x - a\| \quad (2.2)$$

$a \|\cdot\|$ značí eukleidovskou normu na \mathbb{R}^d .

Parametr objektu $K \in \mathcal{K}$ lze zapsat pomocí reálného funkcionálu μ definovaného na \mathcal{K} , který má následující vlastnosti

1. Řekneme, že funkcionál μ je *pohybově invariantní*, jestliže pro množinu $K \in \mathcal{K}$ platí

$$\mu(m(K)) = \mu(K), \quad (2.3)$$

kde m je prvek eukleidovské pohybové grupy E_d (tj. m je posunutí, otočení nebo reflexe) a $m(K) = \{m(x) : x \in K\}$.

2. Řekneme, že funkcionál μ je *monotónní*, jestliže pro množiny $K_1, K_2 \in \mathcal{K}$ platí

$$K_1 \subset K_2 \Rightarrow \mu(K_1) \leq \mu(K_2).$$

3. Řekneme, že funkcionál μ je *spojitý*, jestliže pro množiny $K_n, K \in \mathcal{K}$, $n \in \mathbb{N}$, platí $\lim_{n \rightarrow \infty} \mu(K_n) = \mu(K)$, pokud $\lim_{n \rightarrow \infty} d_H(K_n, K) = 0$.
4. Řekneme, že funkcionál μ je *aditivní*, jestliže pro libovolné množiny $K_1, K_2 \in \mathcal{K}$ takové, že $K_1 \cup K_2 \in \mathcal{K}$, platí

$$\mu(K_1) + \mu(K_2) = \mu(K_1 \cup K_2) + \mu(K_1 \cap K_2).$$

Výše uvedené vlastnosti splňují *Minkowského funkcionály* $W_r^d(K)$ (viz např. [3], [43]), které jsou definovány pro $r = 0, \dots, d$ a $K \in \mathcal{K}$ jako

$$W_r^d(K) = \frac{\omega_d}{\omega_{d-r}} \int_{L_r} \nu_{d-r}(\mathbf{p}_{S^\perp} K) U_r(dS),$$

kde ν_l je l -rozměrná Lebesgueova míra, L_l je množina všech l -podprostorů, $\mathbf{p}_{S^\perp} K$ je ortogonální projekce K do $d-l$ -podprostoru kolmého na $S \in L_l$, U_l je rovnoměrné pravděpodobnostní rozdělení na L_l a ω_l je objem l -rozměrné jednotkové koule, tj. $\omega_l = \frac{\pi^{l/2}}{\Gamma(1+l/2)}$.

Minkowského funkcionály jsou normovány tak, že pro jednotkovou kouli jsou rovny jejímu objemu.

Věta 2.1 (*Hadwigerův charakterizační teorém, Hadwiger (1957)*): *Každý nezáporný, pohybově invariantní, monotónní, aditivní funkcionál μ definovaný na \mathcal{K} lze zapsat ve tvaru*

$$\mu(K) = \sum_{r=0}^d a_r W_r^d(K),$$

kde $K \in \mathcal{K}$ a a_k jsou nezáporné konstanty závisející na μ .

Jestliže a_k jsou libovolné reálné konstanty, pak lze ve větě 2.1 „nezáporný monotónní funkcionál“ μ nahradit „spojitým funkcionálem“ μ [43].

Příklad 2.1 Nechť $K \in \mathcal{K}$. Pro Minkovského funkcionály platí, že hodnota $W_0^d(K) = \nu_d(K)$, hodnota $dW_1^d(K) = \nu_{d-1}(\partial K)$, kde ∂K značí hranici množiny K , $W_d^d(K) = \omega_d a (2/b_d) W_{d-1}(K)$ je funkcionál střední šířky $\bar{b}(K)$.

Konkrétně pro $d = 1$ dostáváme

$$W_0^1(K) = l(K) = \nu_1(K), \quad W_1^1(K) = 2,$$

kde $l(K)$ je délka intervalu K .

Pro $d = 2$ platí

$$W_0^2(K) = A(K) = \nu_2(K), \quad W_1^2(K) = \frac{1}{2}L(K) = \frac{1}{2}\nu_1(\partial K), \quad W_2^2(K) = \pi,$$

kde $A(K)$ je obsah množiny K a $L(K)$ je délka jejího obvodu.

Pro $d = 3$ platí

$$\begin{aligned} W_0^3 &= V(K) = \nu_3(K), & W_1^3 &= \frac{1}{3}S(K) = \frac{1}{3}\nu_2(\partial K), \\ W_2^3 &= \frac{3}{2}\pi\bar{b}(K) = \frac{1}{3}M(K), & W_3^3 &= \frac{4}{3}\pi, \end{aligned}$$

kde $V(K)$ je objem množiny K , $S(K)$ je povrch K , $\bar{b}(K)$ je střední šířka množiny K , kterou lze zapsat jako

$$\bar{b}(K) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} l(\mathbf{p}_{\beta,\alpha} K) \sin \beta d\alpha d\beta,$$

kde $l(\mathbf{p}_{\beta,\alpha} K)$ je délka projekce množiny K do přímky, která prochází počátkem a bodem $[\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta]$. Integrál střední křivosti M můžeme zapsat pomocí střední šířky jako

$$M(K) = 2\pi\bar{b}(K).$$

Některé výsledky pro konvexní kompaktní množiny lze zobecnit pro množiny z konvexního okruhu \mathcal{R} .

Aditivní funkcionál μ na \mathcal{R} je zobrazení $\mu : \mathcal{R} \mapsto \mathbb{R}$ takové, že $\mu(\emptyset) = 0$ a pro $A_1, A_2 \in \mathcal{R} : \mu(A_1) + \mu(A_2) = \mu(A_1 \cup A_2) + \mu(A_1 \cap A_2)$.

Pohybová invariance funkcionálu na \mathcal{R} je definována stejně jako na \mathcal{K} .

Důležitým příkladem aditivního a pohybově invariantního funkcionálu na \mathcal{R} je *Euler-Poincarého charakteristika* χ . Pro každou neprázdnou množinu $K \in \mathcal{K}$ nabývá Euler-Poincarého charakteristika hodnoty

$$\chi(K) = 1,$$

což můžeme pomocí principu inkluze a exkluze rozšířit na libovolnou množinu $A \in \mathcal{R}$. Tedy jestliže pro A platí

$$A = \bigcup_{i=1}^n K_i, \quad \text{pro } K_i \in \mathcal{K},$$

potom

$$\chi(A) = \sum_{i=1}^n \chi(K_i) - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \chi(K_i \cap K_j) + \cdots + (-1)^{n-1} \chi(K_1 \cap \cdots \cap K_n).$$

Pomocí Euler-Poincarého charakteristiky můžeme definovat zobecněné Minkovského funkcionály W_r^d , $r = 0, \dots, d$, jako

$$W_r^d(A) = \frac{\omega_d}{\omega_{d-r}} \int_{L_r} \int_{S^\perp} \chi(A \cap S_s) \nu_{d-r}(ds) U_r(dS),$$

kde $A \in \mathcal{R}$, S^\perp je $(d-r)$ -podprostor procházející počátkem prostoru \mathbb{R}^d a zároveň je kolmý na $S \in L_r$, $S_s = S + s$. Zbylé značení je stejně jako ve vztahu 2.4.

Zobecněný Minkovský funkcionál je aditivní. Hodnota $W_0^d(A) = \nu_d(A)$ je objem množiny A , $dW_1^d(A) = \nu_{d-1}(\partial A)$ je povrch množiny A a $W_d^d(A) = \omega_d \chi(A)$.

Cavalieriho metoda odhadu objemu

Označme $V(Y)$ objem množiny $Y \subset \mathbb{R}^3$ a necht' $V(Y) < \infty$. Cavalieriho metoda se používá pro odhad objemu množiny Y na základě znalosti obsahů jejích řezů, které jsou zachyceny v systematickém náhodném výběru paralelních řezů s pevnou orientací

$$\tau = \{T_{U+mt,\delta} : m \in \mathbb{Z}\},$$

kde $t > 0$ je vzdálenost mezi rovinami, $T_{a,\delta}$ je rovina řezu ve vzdálenosti a od počátku ve směru normálového vektoru δ a U má rovnoměrné rozdělení na $[0, t)$, tj. $\mathcal{L}(U) = R([0, t))$.

Informace o množině Y získáme ze systematického náhodného výběru jako systém paralelních řezů

$$\tau_Y = \{Y \cap T_{U+mt,\delta} : m \in \mathbb{Z}\},$$

kde $t > 0$ a $\mathcal{L}(U) = R([0, t))$. Označme m -tou rovinu řezu symbolem $T_{(m)} = T_{U+mt,\delta}$. Objem $V(Y)$ můžeme odhadnout vztahem

$$\widehat{V}(Y) = t \sum_{m: Y \cap T_{(m)} \neq \emptyset} A(Y \cap T_{(m)}), \quad (2.4)$$

Lze ukázat, že odhad (2.4) je nestranný a jeho rozptyl závisí na geometrických vlastnostech množiny Y . V případě, že orientace řezů je $\mathcal{L}(\delta) = R(S_+^2)$, kde S_+^2 je kladná polokoule jednotkové koule se středem v počátku, $\mathcal{L}(U) = R([0, t))$ a U a δ jsou nezávislé. Dále jestliže je hranice ∂Y množiny Y kompaktní a její plochu označíme $S(\partial Y)$, potom pro rozptyl odhadu platí (viz [3], s. 309)

$$\text{var}[\widehat{V}(Y)] \approx \frac{\pi}{360} S(\partial Y) t^4, \quad \text{pro } t \text{ malé.}$$

2.2.2 Globální charakteristiky, objemový podíl

Nyní uvedeme globální charakteristiky struktury, kterou modelujeme náhodnou uzavřenou množinou. Necht' \mathbb{K} je systém všech kompaktních podmnožin \mathbb{R}^d .

Definice 2.8 Náhodná uzavřená množina Ξ je měřitelné zobrazení $\Xi : (\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) \mapsto (\mathbb{F}, \mathcal{F})$, kde \mathbb{F} je systém všech uzavřených podmnožin \mathbb{R}^d a \mathcal{F} je nejmenší σ -algebra podmnožin \mathbb{F} , která zahrnuje všechny tzv. zasažené množiny, tj. $\mathbb{F}_K = \{F \in \mathbb{F} : F \cap K \neq \emptyset\}$ pro $K \in \mathbb{K}$. Rozdělení množiny Ξ je $P(A) = \mathbb{P}(\Xi \in A)$, $A \in \mathcal{F}$.

Rozdělení náhodné množiny Ξ je dáno rovněž kapacitním funkcionálem T_Ξ , který je definován jako

$$T_\Xi(K) = \mathbb{P}(\Xi \cap K \neq \emptyset) = P(\mathbb{F}_K),$$

kde $K \in \mathbb{K}$.

Definice 2.9 Řekneme, že T_{Ξ} je alternující Choquetův kapacitní funkcionál nekonečného řádu, jestliže pro $K, K_1, \dots, K_n \in \mathbb{K}$ platí

1. jestliže $K_1 \subset K_2 \dots \subset K$, potom $\lim_{n \rightarrow \infty} T_{\Xi}(K_n) = T_{\Xi}(K)$,
2. $S_n(K; K_1, \dots, K_n) \geq 0$,

kde

$$S_n(K; K_1, \dots, K_n) = S_{n-1}(K; K_1, \dots, K_{n-1}) - S_{n-1}(K \cup K_n; K_1, \dots, K_{n-1})$$

$$\text{a } S_0(K) = 1 - T_{\Xi}(K).$$

Pro $S_n(K; K_1, \dots, K_n)$ platí [43]

$$S_n(K; K_1, \dots, K_n) = \mathbb{P}(\Xi \cap K = \emptyset, \Xi \cap K_1 \neq \emptyset, \dots, \Xi \cap K_n \neq \emptyset),$$

kde $T_{\Xi}(\emptyset) = 0$ a $0 \leq T_{\Xi}(K) \leq 1$.

Věta 2.2 (Choquetova věta): Nechť T je funkcionál na \mathbb{K} . Potom zde existuje právě jedno rozdělení P na \mathcal{F} takové, že $P(\mathbb{F}_K) = T(K)$ právě tehdy, když T je alternující Choquetův kapacitní funkcionál nekonečného řádu a platí

$$0 \leq T(K) \leq 1, \quad \text{pro } K \in \mathbb{K}$$

$$\text{a } T(\emptyset) = 0.$$

Z Choquetovy věty vyplývá, že pro charakterizaci rozdělení náhodné uzavřené množiny stačí znalost kapacitního funkcionálu.

Definice 2.10 Řekneme, že náhodná uzavřená množina Ξ je stacionární, jestliže Ξ a posunutá množina $\Xi_x = \Xi + x$ pro libovolné $x \in \mathbb{R}^d$ mají stejné rozdělení. Řekneme, že náhodná množina je stacionární a isotropní, jestliže pro každý pohyb $m \in E_d$ jsou rozdělení Ξ a $m\Xi$ totožná.

Z Choquetovy věty vyplývá, že náhodná uzavřená množina je stacionární právě tehdy, když pro každou kompaktní množinu K a každé $x \in \mathbb{R}^d$ platí

$$T_{\Xi}(K) = T_{\Xi}(K_x).$$

Podobně náhodná uzavřená množina je stacionární a isotropní právě tehdy, když platí pro všechna $m \in E_d$ a $K \in \mathbb{K}$

$$T_{\Xi}(K) = T_{\Xi}(gK).$$

V dalším textu budeme uvažovat stacionární a isotropní případ náhodné uzavřené množiny Ξ a budeme se věnovat nejdůležitější globální charakteristice, kterou je *objemový podíl*.

Objemový podíl $V_V^{(d)}$ (někdy též označován např. V_V v \mathbb{R}^3 či A_A v \mathbb{R}^2) je střední objem Ξ na jednotku objemu, tedy

$$V_V^{(d)} = \mathbb{E}(\nu_d(\Xi \cap [0, 1]^d)).$$

Ze stacionarity vyplývá pro $x \in \mathbb{R}^d$ (viz [43], s. 201)

$$V_V^{(d)} = \mathbb{P}(o \in \Xi) = \mathbb{P}(x \in \Xi) = T_{\Xi}(\{o\}).$$

Označíme objemový podíl v \mathbb{R}^3 jako $V_V := V_V^{(3)}$, plošný podíl v \mathbb{R}^2 jako $A_A := V_V^{(2)}$, lineární podíl v \mathbb{R} jako $L_L := V_V^{(1)}$ a v \mathbb{R}^0 bodový podíl $P_P := V_V^{(0)}$. Pro objemový podíl V_V stacionární náhodné uzavřené množiny Ξ_V v \mathbb{R}^3 platí

$$V_V = A_A = L_L = P_P. \quad (2.5)$$

Interpretace rovností je následující. Objemový podíl V_V je roven hodnotě získané průnikem Ξ_V libovolnou testovací rovinou resp. přímkou resp. bodovým systémem resp. změřením plošného podílu A_A resp. lineárního podílu L_L resp. bodového podílu P_P v Ξ_V .

Dále uvedeme nestranné odhadury charakteristik z (2.5), viz např. [33], kap. 3.2, přičemž podílové charakteristiky odhadujeme na základě pozorování průniku Ξ_V testovací množinou $W \subset \mathbb{R}^d$, kde $0 \leq d \leq 3$.

Nestranný odhad P_P je

$$\widehat{P}_P = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{[x_i \in \Xi]},$$

kde x_i jsou body testovací mřížky W , jejichž počet je n v testovací množině W . V aplikacích často volíme pravidelnou testovací mřížku.

Nestranný odhad L_L v \mathbb{R}^1 , kde množinu W tvoří systém čar, např. síť' paralelních úseček, je

$$\widehat{L}_L = \frac{L(\Xi \cap W)}{L(W)}.$$

Předpokládejme, že množina $W \subset \mathbb{R}^2$ je kompaktní, např. obdélník. Potom následující odhad je nestranný

$$\widehat{A}_A = \frac{A(\Xi \cap W)}{A(W)}.$$

Odhady rozptylu výše uvedených charakteristik závisí na autokorelací Ξ a volbě testovací množiny W , viz [33], kap. 5. Další podílové charakteristiky včetně jejich odhadů jsou uvedeny např. v [3], [33], [43].

2.3 Bodové procesy

Nechť (\mathcal{X}, d) je lokálně kompaktní úplný separabilní metrický prostor. Označme $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ rodinu borelovských podmnožin a $\mathcal{B}_0(\mathcal{X})$ rodinu omezených borelovských podmnožin množiny \mathcal{X} . Označme $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ pravděpodobnostní prostor.

Definice 2.11 Míra μ na $(\mathcal{X}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$ se nazývá lokálně konečná, jestliže $\mu(B) < \infty$ pro každé $B \in \mathcal{B}_0(\mathcal{X})$. Prostor lokálně konečných mér označíme $\mathcal{M} = \mathcal{M}(\mathcal{X})$. Nechť \mathfrak{M} je nejmenší σ -algebra na \mathcal{M} , která tvoří zobrazení $\mu \mapsto \mu(B)$ měřitelná pro všechna $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$.

Definice 2.12 Měřitelné zobrazení $\Psi : (\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P}) \mapsto (\mathcal{M}, \mathfrak{M})$ nazýváme náhodnou mírou. Její rozdělení $\mathbb{P}\Psi^{-1}$ budeme značit P_Ψ .

Definice 2.13 Označme \mathcal{N}_{lk} systém lokálně konečných podmnožin \mathcal{X} a $\mathfrak{N}_{lk} = \sigma(\{x \in \mathcal{N}_{lk} : x(B) = m\}, B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}), m \in \mathbb{N}_0)$, kde $x(B) = \#(x \cap B)$ je čítací míra. Náhodný bodový proces X definovaný na \mathcal{X} je měřitelné zobrazení $X : (\Omega, \mathcal{A}) \mapsto (\mathcal{N}_{lk}, \mathfrak{N}_{lk})$. Rozdělení P_X náhodného bodového procesu X je definováno jako $P_X(F) = \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in F\})$ pro $F \in \mathfrak{N}_{lk}$.

Definice 2.14 Řekneme, že bodový proces X je jednoduchý bodový proces, jestliže $\mathbb{P}(X \in \mathcal{N}_{lk}^*) = 1$, kde $\mathcal{N}_{lk}^* = \{x \in \mathcal{N}_{lk} : x(\{\xi\}) \leq 1 \text{ pro každý } \xi \in \mathcal{X}\}$.

Definice 2.15 Bodový proces X se nazývá konečný bodový proces, jestliže $X(\mathcal{X}) < \infty$.

Realizace bodového procesu X budeme značit malým písmenem x .

V aplikacích používáme Eukleidovský prostor \mathbb{R}^d , tj. $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$. V některých případech se lze omezit na vlastní podmnožiny \mathbb{R}^d či jiné množiny, viz např. [31], App. C.

Definice 2.16 Označme polský prostor \mathbb{M} jako prostor kót a její borelovskou σ -algebrou symbolem $\mathcal{B}(\mathbb{M})$. Kótovaný bodový proces X na \mathbb{R}^d je náhodná posloupnost $X = \{[\xi_n; m_n]\}$, kde body ξ_n tvoří bodový proces v \mathbb{R}^d a $m_n \in \mathbb{M}$ jsou kóty odpovídající příslušnému x_n .

Kóty mohou být různého typu, např. spojité veličiny (objem, průměr, …), indikátory typu, množiny.

2.3.1 Charakteristiky bodových procesů

Předpokládejme, že X je jednoduchý bodový proces definovaný na \mathcal{X} (dále jen bodový proces). Postupně uvedeme charakteristiky prvního a druhého řádu a jejich odhady. Při aplikování odhadů charakteristik bodových procesů je nutné se zabývat otázkou okrajových efektů. Okrajové efekty jsou způsobené tím, že pracujeme s bodovým procesem X pozorovaném pouze v omezeném pozorovacím okně $W \in \mathbb{R}^d$, $\nu_d(W) > 0$ a nevíme, jak vypadá tento proces mimo toto okno.

Charakteristikou prvního řádu je tzv. míra intenzity bodového procesu.

Definice 2.17 Řekneme, že Λ je míra intenzity bodového procesu X , jestliže platí

$$\Lambda(\cdot) = \mathbb{E}X(\cdot).$$

Pokud Λ lze vyjádřit jako $\Lambda(B) = \int_B \lambda(\xi) d\xi$, kde λ je nezáporná funkce, potom λ se nazývá funkcií intenzity. Jestliže funkce intenzity $\lambda(\xi)$ je konstantní, tj. $\lambda(\xi) = \lambda$, řekneme, že bodový proces je homogenní s intenzitou λ . V opačném případě bodový proces nazýváme nehomogenní.

Definice 2.18 Momentová míra n -tého řádu bodového procesu X je definována jako

$$M^{(n)}(B_1 \times \cdots \times B_n) = \mathbb{E}[X(B_1) \cdots X(B_n)],$$

kde $B_1, \dots, B_n \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$.

Definice 2.19 Faktoriální momentová míra $\alpha^{(n)}$ bodového procesu X na \mathcal{X}^n je definována jako

$$\alpha^{(n)}(B_1 \times \cdots \times B_n) = \mathbb{E} \sum_{\xi_1, \dots, \xi_n \in X}^{\neq} \mathbf{1}_{\xi_1 \in B_1} \cdots \mathbf{1}_{\xi_n \in B_n},$$

kde $B_1, \dots, B_n \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ a sčítá se přes všechny n -tice různých bodů X .

Poznámka 2.2 Pro X s mírou intenzity Λ platí

1. $\alpha^{(1)} = M^{(1)} = \Lambda$,
2. $\text{Var}X(B) = M^{(2)}(B \times B) - (\Lambda(B))^2 = \alpha^{(2)}(B \times B) + \Lambda(B) - (\Lambda(B))^2$,
3. $M^{(n)}(B^n) = \mathbb{E}[X(B)]^n$,
4. $\alpha^{(n)}(B^n) = \mathbb{E}X(B)(X(B) - 1) \cdots (X(B) - n + 1)$,

kde $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$.

V dalším textu položíme $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$.

Definice 2.20 Bodový proces X na \mathbb{R}^d se nazývá stacionární, jestliže jeho rozdělení je invariantní vůči posunutí, tj. pro všechna $\xi \in \mathbb{R}^d$ platí

$$P_X = P_{X+\xi},$$

kde $X + \xi = \{\xi + \zeta : \zeta \in X\}$.

Definice 2.21 Bodový proces X na \mathbb{R}^d se nazývá isotropní, jestliže jeho rozdělení je invariantní vůči rotaci.

Lemma 2.1 Jestliže stacionární bodový proces X na \mathbb{R}^d má míru intenzity Λ , která je lokálně konečná, potom existuje konstanta $0 \leq \lambda < \infty$ taková, že $\Lambda(\cdot) = \lambda \nu_d(\cdot)$.

Definice 2.22 Konstanta λ z předchozího lemmatu se nazývá intenzita stacionárního bodového procesu X .

Nestranný odhad funkce intenzity λ můžeme ve stacionárním případě bodového procesu zapsat jako

$$\hat{\lambda} = \frac{n}{\nu_d(W)}, \quad (2.6)$$

kde $W \subset \mathbb{R}^d$ je pozorovací okno a n je počet pozorovaných bodů. Jiná možnost odhadu funkce intenzity, která v některých případech může být vhodnější (viz [33]), je odhad pro λ^2 , konkrétně

$$\hat{\lambda}^2 = \frac{n(n-1)}{(\nu_d(W))^2}. \quad (2.7)$$

V případě nestacionárního bodového procesu můžeme pro odhad funkce intenzity $\lambda(\cdot)$ použít *jádrový odhad*

$$\hat{\lambda}_h(s) = \sum_{\xi \in W \cap X} k_h(s - \xi), \quad (2.8)$$

kde h je šířka pásma a k_h nezáporná funkce, pro kterou platí $\int_{\mathbb{R}^d} k_h(s)ds = 1$. Pro korekci okrajových efektů můžeme použít odhad

$$\tilde{\lambda}_h(s) = \sum_{\xi \in W \cap X} \frac{k_h(s - \xi)}{c_h(\xi)}, \text{ kde } c_h(\xi) = \int_W k_h(t - \xi)dt.$$

Za jádrovou funkci k_h lze například volit *gaussovsou jádrovou funkci*

$$k_h(x) = \frac{1}{h\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2h^2}\right\} \quad (2.9)$$

nebo *Epanečníkovou jádrovou funkci*

$$\begin{aligned} k_h(u) &= \frac{1}{4h} \left(1 - \left(\frac{u}{h}\right)^2\right) && \text{pro } |u| \leq h, \\ &= 0 && \text{jinak,} \end{aligned} \quad (2.10)$$

kde h je vhodně zvolená šířka pásma.

V dalším textu budeme pracovat s *faktoriální momentovou mírou druhého řádu*, kterou definujeme předpisem

$$\alpha^{(2)}(C) = \mathbb{E} \left[\sum_{\xi, \eta \in X}^{\neq} 1_{[(\xi, \eta) \in C]} \right], \quad C \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^d).$$

Definice 2.23 Jestliže faktoriální momentovou míru druhého řádu lze vyjádřit jako

$$\alpha^{(2)}(C) = \int \int 1_{[(\xi, \eta) \in C]} \lambda^{(2)}(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad C \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^d),$$

kde $\lambda^{(2)}$ je nezáporná funkce, potom $\lambda^{(2)}$ nazýváme součinovou hustotou druhého řádu.

2.3.2 Sumární statistiky

Prostorové rozmístění bodového procesu můžeme popsat charakteristikami druhého řádu a distribučními funkcemi vzdáleností, tedy tzv. sumárními statistikami. Sumární statistiky používáme pro testování, zda realizace bodového procesu (lze použít i pro kótované bodové procesy) se shodují s nějakým modelem bodového procesu. Shoda s modelem je často založena na neparametrickém odhadu příslušné sumární statistiky.

Mezi sumární statistiky patří charakteristiky druhého řádu a statistiky založené na charakterizaci vzdáleností mezi body. Nejprve zavedeme charakteristiky druhého řádu – párovou korelační funkci g , K -funkci a L -funkci.

Definice 2.24 Nechť bodový proces X má funkci intenzity λ a míra

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

nezávisí na volbě $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ s $0 < \nu_d(A) < \infty$, kde $a/0 := 0$ pro $a \geq 0$. Potom \mathcal{K} se nazývá redukovaná momentová míra druhého řádu.

V případě stacionárního bodového procesu X můžeme $\lambda\mathcal{K}(B)$ interpretovat jako podmíněnou střední hodnotu počtu bodů v B za podmínky, že bodový proces X má bod v počátku.

Definice 2.25 Nechť existuje funkce intenzity λ i součinová hustota druhého řádu $\lambda^{(2)}$. Párová korelační funkce je definována jako

$$g(\xi, \eta) = \frac{\lambda^{(2)}(\xi, \eta)}{\lambda(\xi)\lambda(\eta)},$$

kde položíme $\frac{a}{0} := 0$ pro $a \geq 0$.

Definice 2.26 *K-funkce je pro stacionární bodový proces definována jako*

$$K(r) = \mathcal{K}(b(o, r))$$

a L-funkce jako

$$L(r) = (K(r)/\omega_d)^{1/d}, \quad r > 0. \quad (2.11)$$

Z definice K -funkce a L -funkce je zřejmé, že mezi nimi existuje vzájemně jednoznačné zobrazení. V případě stacionárního bodového procesu s intenzitou λ je $\lambda K(r)$ podmíněná střední hodnota počtu bodů do vzdálenosti r od počátku za podmínky, že bodový proces X má bod v počátku.

Vztah mezi párovou korelační funkcí g a K -funkcí je pro stacionární isotropní bodový proces následující

$$g(r) = \frac{K'(r)}{d\omega_d r^{d-1}}. \quad (2.12)$$

Mezi sumární statistiky založené na vzdálenosti mezi body počítáme sférickou kontaktní distribuční funkci F , distribuční funkci vzdálenosti nejbližších sousedů G a J -funkci.

Definice 2.27 *Nechť X je stacionární bodový proces na \mathbb{R}^d . Sférická kontaktní distribuční funkce je definována jako distribuční funkce vzdáleností od počátku (či jiného fixního bodu) k nejbližšímu bodu v X , tj.*

$$F(r) = 1 - \mathbb{P}(X(b(x_0, r)) = 0), \quad r \geq 0.$$

Definice 2.28 *Nechť X je stacionární bodový proces na \mathbb{R}^d . Distribuční funkce vzdálenosti nejbližších sousedů je dána vztahem*

$$G(r) = 1 - \mathbb{P}((X \setminus \{\xi\})(b(\xi, r)) = 0), \quad r \geq 0, \xi \in X.$$

Definice 2.29 *J-funkce je definována jako*

$$J(r) = \frac{1 - G(r)}{1 - F(r)},$$

za předpokladu, že $F(r) < 1$.

Následující odhady sumárních statistik jsou s korekcí okrajových efektů, viz [2], [31] a [33], a jejich výběr byl proveden s ohledem na aplikace popsané v kapitole 5.

Nejprve uvedeme tři nestranné odhady $\lambda^2 K(\cdot)$. Poznamenejme, že pokud tyto odhady vydělíme $\widehat{\lambda^2}$ v (2.7), ztratíme nestrannost odhadu K , přičemž jeho vychýlenost a rozptyl roste s rostoucím r .

Nejjednodušším z nich je *mínusový výběr*, ve kterém předpokládáme, že X pozorujeme v menším okně $W_{\ominus r} = \{\eta \in W : b(\eta, r) \subseteq W\}$. Potom

$$\widehat{\lambda^2 K(r)} = \sum_{\xi \in X \cap W_{\ominus r}} \frac{X(b(\xi, r) \setminus \xi)}{\nu_d(W_{\ominus r})}$$

Dalším odhadem je *Ripleyho odhad*, který lze vyjádřit následovně

$$\widehat{\lambda^2 K(r)} = \sum_{\xi, \eta \in X \cap W}^{\neq} \frac{\mathbf{1}_{\{||\xi - \eta|| \leq r\}}}{\nu_d(W)} \frac{\nu_d(\partial b(\xi, ||\xi - \eta||))}{\nu_d(\partial b(\xi, ||\xi - \eta||) \cap W)}.$$

Lze ukázat [38], že se jedná o nestranný odhad pro $r < r_0$, kde $r_0 = \inf\{t > 0 : \nu_d(W^{(t)}) < \nu_d(W)\}$ a $W^{(t)} = \{\xi \in W : \partial b(\xi, t) \cap W \neq \emptyset\}$.

Poznámka 2.3 Výše uvedené odhady pro bodové procesy v \mathbb{R}^2 jsou také implementovány v balíčku SPATSTAT programovacího jazyka R (viz [47]).

V publikaci [33], která je věnována analýzám mikrostruktur, je uveden odhad funkce K v prostoru \mathbb{R}^3 s použitím okenní funkce.

Definice 2.30 Okenní funkce c_W je definována v \mathbb{R}^3 jako

$$c_W(x) = \nu_3(W \ominus \{o, x\}), \quad x \in \mathbb{R}^3.$$

Rotační průměr okenní funkce \bar{c}_W je definován jako

$$\bar{c}_W(r) = \int_{S^3} c_W(r, \tau) \mu(d\tau), \tag{2.13}$$

kde S^3 je jednotková sféra v \mathbb{R}^3 .

K odhadu K -funkce můžeme potom použít vztah (viz [33], kap. 9)

$$\widehat{\lambda^2 K}(r) = 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{\mathbf{1}_{(0,r]}(d_{ij})}{\bar{c}_W(d_{ij})}, \quad r \geq 0, \quad (2.14)$$

kde d_{ij} je vzdálenost mezi body x_i a x_j , $\bar{c}_W(\cdot)$ je dána vztahem (2.13). Tento odhad je nestranným odhadem $\lambda^2 K(r)$, pokud platí, že $\bar{c}_W(r) > 0$. Pro odhad druhé mocniny intenzity použijeme vztah (2.7).

Poznámka 2.4 Pokud je pozorovací okno W ve tvaru kvádru se stranami $a \leq b \leq c$, lze okenní funkci vyjádřit jako (viz [33])

$$\bar{c}_W(r) = abc - \frac{2(ab + bc + ac)}{4}r + \frac{2(a + b + c)}{3\pi}r^2 - \frac{r^3}{4\pi}, \quad 0 \leq r \leq a.$$

Odhad L -funkce založíme na některém z odhadů K -funkce a na definici L -funkce (2.11), tedy

$$\widehat{L}(r) = \left(\frac{\widehat{K}(r)}{\omega_d} \right)^{1/d}, \quad r > 0. \quad (2.15)$$

Máme-li stacionární isotropní bodový proces, potom vztah mezi párovou korelační funkcí g a K -funkcí je dán vztahem (2.12). Uvedeme Ripleyho odhad párové korelační funkce g , ve kterém je použit jádrový odhad s Ripleyho korekčním faktorem,

$$\widehat{\lambda^2 g}(r) = \sum_{\xi, \eta \in X \cap W}^{\neq} \frac{k(||\xi - \eta|| - r)}{d\omega_d r^{d-1} \nu_d(W)} \cdot \frac{\nu_d(\partial b(\xi, ||\xi - \eta||))}{\nu_d(\partial b(\xi, ||\xi - \eta||) \cap W)}, \quad (2.16)$$

kde k je vhodná jádrová funkce, lze např. použít Epanečníkovo jádro (2.10).

Příklad jiného odhadu je pro \mathbb{R}^3 uveden v [33].

$$\widehat{\lambda^2 g}(r) = \frac{2}{4\pi r^2 \bar{c}_W(r)} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n k(d_{ij} - r), \quad r > 0,$$

kde d_{ij} je vzdálenost mezi body x_i a x_j , $\bar{c}_W(\cdot)$ je okenní funkce a k je vhodná skoková, symetrická a nezáporná jádrová funkce, např. Epanečníkovo jádro (2.10). Tento odhad je nestranným odhadem $\lambda^2 g(r)$, pokud platí, že $\bar{c}_W(r) > 0$. Pro odhad druhé mocniny intenzity opět použijeme vztah (2.7).

Nyní se zaměříme na odhady distribučních funkcí vzdáleností, tj. sférickou kontaktní distribuční funkci F a distribuční funkci nejbližších sousedů G . Různé metody odstranění okrajových efektů u odhadů jsou popsány v [2], [31], [33] a [43]. Dále uvedeme Kaplan-Meierovy odhady funkcí F a G (viz [31]).

Mějme realizaci bodového procesu x . Kaplan-Meierův odhad sférické kontaktní distribuční funkce F je dán vztahem

$$\widehat{F}_{KM}(r) = 1 - \prod_{s \leq r} \left(1 - \frac{\#\{\xi \in I : d(\xi, x) = s, d(\xi, x) \leq d(\xi, \partial W)\}}{\#\{\xi \in I : d(\xi, x) \geq s, d(\xi, \partial W) \geq s\}} \right), \quad (2.17)$$

kde $r > 0$ a $0/0 := 0$, I je konečná pravidelná mřížka bodů nezávisející na X a d je vzdálenost (2.2).

Kaplan-Meierův odhad distribuční funkce nejbližších sousedů G je dán vztahem

$$\widehat{G}_{KM}(r) = 1 - \prod_{s \leq r} \left(1 - \frac{\#\{\xi \in x : d(\xi, x - \xi) = s, d(\xi, x - \xi) \leq d(\xi, \partial W)\}}{\#\{\xi \in x : d(\xi, x - \xi) \geq s, d(\xi, \partial W) \geq s\}} \right), \quad (2.18)$$

kde $r > 0$ a $0/0 := 0$.

Na základě odhadů sférické kontaktní distribuční funkce a distribuční funkce nejbližších sousedů můžeme odhad J -funkce napsat jako

$$\widehat{J}(r) = \frac{1 - \widehat{G}_{KM}(r)}{1 - \widehat{F}_{KM}(r)},$$

pro $\widehat{F}_{KM}(r) < 1$.

Poznamenejme, že Kaplan-Meierovy odhady nemusí být nutně distribuční funkce, protože jejich maximální hodnota může být menší než 1.

2.3.3 Příklady bodových procesů

V této kapitole uvedeme několik příkladů bodových procesů, soustředíme se především na interakce mezi jejich body.

Poissonův bodový proces

Poissonův bodový proces je náhodný bodový proces bez interakcí mezi body a patří mezi základní bodové procesy.

Definice 2.31 Nechť Λ je lokálně konečná difúzní míra na $(\mathcal{X}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$. Řekneme, že X je Poissonův bodový proces, jestliže platí

1. jsou-li pro všechna $k \in \mathbb{N}$ $A_1, \dots, A_k \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ po dvou disjunktní, potom $X(A_1), \dots, X(A_k)$ jsou nezávislé náhodné veličiny,
2. $\mathbb{P}(X(B) = k) = \frac{\Lambda^k(B)}{k!} \exp\{-\Lambda(B)\}$, kde $B \in \mathcal{B}_0(\mathcal{X})$, $k \in \mathbb{N}_0$.

Poznámka 2.5

1. Pro dané Λ existuje právě jeden Poissonův bodový proces X s mírou intenzity Λ .
2. Jestliže X je homogenní Poissonův bodový proces na \mathbb{R}^d , potom je také stacionární a isotropní.

Tvrzení 2.1 Pro Poissonův bodový proces s mírou intenzity Λ a $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, platí, že jeho faktoriální momentová míra n -tého řádu je rovna n -té mocnině intenzity, tj.

$$\alpha^{(n)} \equiv \Lambda^n.$$

Poznámka 2.6 Vzorce sumárních statistik pro homogenní Poissonův bodový proces v \mathbb{R}^d s intenzitou $\lambda < \infty$ jsou následující

$$\begin{array}{lll} \text{pro } r \geq 0 : & K(r) = \omega_d r^d, & L(r) = r, \\ \text{pro } r > 0 : & g(r) = 1, & F(r) = G(r) = 1 - \exp\{-\lambda \omega_d r^d\}, \\ & J(r) = 1. & \end{array}$$

Obecně, pro bodový proces X a alespoň pro malé hodnoty $r > 0$ můžeme usoudit na výskyt shluků (přitažlivé interakce mezi body) resp. regularit (odpudivé interakce mezi body) následovně (viz [31])

$L(r) - r > 0$ znamená shluky pro hodnoty menší než r ,

$L(r) - r < 0$ znamená regularity pro hodnoty menší než r ,

$g(r) > 1$ nebo $F(r) < G(r)$ nebo $J(r) < 1$ znamená shluky ve vzdálenostech r ,

$g(r) < 1$ nebo $G(r) > F(r)$ nebo $J(r) > 1$ znamená regularity ve vzdálenostech r .

Poznámka 2.7 Pro testování úplné prostorové náhodnosti s nulovou a alternativní hypotézou

H_0 : vzorek y je realizací homogenního Poissonova bodového procesu (2.19)

H_1 : vzorek y není realizací homogenního Poissonova bodového procesu

jsou standardním nástrojem testy Monte Carlo (viz např. [33]). Postup je následující

1. pomocí vztahu (2.6) odhadnout intenzitu λ z realizace y ,

2. pro $i = 1 \dots n$

(a) simulovat realizaci homogenního Poissonova bodového procesu x_i s odhadnutou intenzitou λ ,

(b) pro x_i odhadnout vybranou sumární statistiku $s(r)$,

3. v každém bodě r získáme n hodnot, které seřadíme tak, že

$s_{(1)}(r) < \dots < s_{(n)}(r)$, poté vykreslíme hodnoty $s_{(k)}(r)$ a $s_{(n-k)}(r)$,

4. získané hodnoty porovnat s hodnotami $s(r)$ odhadnutými pro y .

Obálky z bodu 3 odpovídají $\alpha\%$ intervalu spolehlivosti testu (2.19), kde

$$\alpha = 100 * [1 - (2k)/(n + 1)].$$

Coxův bodový proces

Coxovy bodové procesy (neboli dvojně stochastické bodové procesy) jsou odvozeny od Poissonova bodového procesu volbou náhodné míry intenzity Λ .

Definice 2.32 Nechť Λ je náhodná míra na \mathcal{X} s rozdělením \mathbb{Q} na $(\mathcal{M}, \mathfrak{M})$ a \mathbb{P}_Λ je rozdělení Poissonova bodového procesu s mírou intenzity Λ . Bodový proces Φ s rozdělením

$$\mathbb{Q}_\Phi(\cdot) = \int \mathbb{P}_\Lambda(\cdot) \mathbb{Q}(d\Lambda)$$

nazýváme Coxův bodový proces (či dvojně stochastický Poissonův bodový proces) s řídící mírou Λ .

Pro Coxův bodový proces platí, že je jednoduchý, jestliže \mathbb{Q} je definováno na množině difúzních, lokálně konečných měr, a je stacionární, jestliže řídící míra Λ je invariantní vůči posunutí.

Tvrzení 2.2 Pro Coxův bodový proces Φ a $n \in \mathbb{N}$ takové, že $n \geq 2$ platí, že jeho faktoriální momentová míra n -tého řádu je rovna momentové míře jeho řídící míry Λ , tj.

$$\alpha_{\Phi}^{(n)} = \mathbb{E}\Lambda^n.$$

V případě, že $\mathcal{X} = \mathbb{R}^+$, potom hovoříme o časovém Coxově bodovém procesu. Speciálním případem tohoto procesu se budeme zabývat v kapitole 3. Ve stejné kapitole budeme rovněž pracovat s vícerozměrným Coxovým bodovým procesem, který je definován následovně.

Definice 2.33 Nechť $\Lambda = (\Lambda_1, \dots, \Lambda_n)$, kde pro $i = 1, \dots, n$ jsou Λ_i náhodné míry na \mathcal{X} s rozděleními \mathbb{Q}_i na $(\mathcal{M}, \mathfrak{M})$ a \mathbb{P}_{Λ_i} jsou rozdělení nezávislých Poissonových bodových procesů s mírou intenzity Λ_i . Nechť Φ_i jsou bodové procesy s rozděleními

$$\mathbb{Q}_{\Phi_i}(\cdot) = \int \mathbb{P}_{\Lambda_i}(\cdot) \mathbb{Q}_i(d\Lambda_i).$$

Potom $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_n)$ nazýváme vícerozměrný Coxův bodový proces s řídící mírou Λ .

Křížová párová korelační funkce pro Φ_i a Φ_j , $i = 1 \dots n$, $j = 1 \dots n$ je definovaná jako

$$g_{ij}(\xi, \eta) = \frac{\mathbb{E}[\Lambda_i(\xi)\Lambda_j(\eta)]}{\rho_i(\xi)\rho_j(\eta)}, \quad (2.20)$$

kde $\rho_k(\xi)$ je funkce intenzity Φ_k .

Shlukové procesy

Předpokládejme, že $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$.

Definice 2.34 Nechť Y je bodový proces v \mathbb{R}^d a každému jeho bodu ζ přiřadíme konečný bodový proces Z_ζ . Říkáme, že

$$X = \bigcup_{\zeta \in Y} Z_\zeta$$

je shlukový bodový proces v \mathbb{R}^d .

Proces Y nazýváme rodičovský bodový proces a procesy Z_ζ nazýváme dceřiné bodové procesy (shluky). V dalším textu se budeme držet tohoto značení.

Definice 2.35 Řekneme, že bodový proces X je Poissonův shlukový bodový proces, jestliže se jedná o shlukový proces, kde Y je Poissonův bodový proces a při daném Y jsou Z_ζ podmíněně nezávislé.

Označme $Z_\zeta - \zeta$ jako posunutí procesu Z_ζ do počátku soustavy souřadnic \mathbb{R}^d .

Definice 2.36 Řekneme, že X je Neymann-Scottův bodový proces, jestliže X je Poissonův shlukový bodový proces takový, že při daném Y jsou počty bodů procesu $Z_\zeta(\mathbb{R}^d)$ nezávislé stejně rozdelené celočíselné náhodné veličiny a body $\eta \in \cup_{\zeta \in Y} (Z_\zeta - \zeta)$ jsou nezávislé stejně rozdelené s hustotou pravděpodobnosti p v \mathbb{R}^d .

Věta 2.3 ([31], kap. 5.3) Nechť X je Neymann-Scottův bodový proces takový, že při daném Y je Z_ζ homogenní Poissonův bodový proces s intenzitou c , a nechť Y je stacionární bodový proces s intenzitou λ_Y . Potom X je stacionární bodový proces s intenzitou $\lambda = c\lambda_Y$ a párovou korelační funkcí

$$g(\zeta) = 1 + \frac{1}{\lambda_Y} h(\zeta),$$

kde $h(\zeta) = \int_{\mathbb{R}^d} p(\eta - \zeta)p(\eta)d\eta$.

Bodové procesy s pevným jádrem

Definice 2.37 Bodový proces s pevným jádrem je bodový proces, ve kterém nejsou dvojice bodů blíž než ve vzdálenosti $h > 0$ (tzv. hard-core vzdálenost).

Typickými představiteli těchto procesů jsou Matérnovy procesy s pevným jádrem typu I a II.

Definice 2.38 Nechť Y je stacionární Poissonův bodový proces v \mathbb{R}^d s intenzitou λ_Y a $h > 0$ je dáno. Řekneme, že X_I je Matérnův bodový proces s pevným jádrem typu I, jestliže

$$X_I = \{y_i \in Y; \forall i \neq j : \|y_i - y_j\| > h\}.$$

Intenzita Matérnova procesu s pevným jádrem typu I je

$$\lambda_I = \lambda_Y \exp\{-\lambda_Y \omega_d h^d\}.$$

Definice 2.39 Nechť $h > 0$, Y je stacionární Poissonův bodový proces v \mathbb{R}^d a $\{U(x), x \in \mathbb{R}^d\}$ jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné veličiny z $R(0, 1)$. Řekneme, že X_{II} je Matérnův bodový proces s pevným jádrem typu II, jestliže

$$X_{II} = \{y_i \in Y; \forall y_j \in b(y_i, h) \setminus y_i : U(y_i) > U(y_j)\}.$$

Intenzita Matérnova procesu s pevným jádrem typu II je

$$\lambda_{II} = \frac{1 - \exp\{-\lambda_Y \omega_d h^d\}}{\lambda_Y \omega_d h^d}.$$

2.3.4 Konečné bodové procesy dané hustotou

V této kapitole se zaměříme na konečné bodové procesy dané hustotou vzhledem k Poissonovu bodovému procesu na \mathcal{X} s intenzitou $\lambda = 1$ a $\nu_d(\mathcal{X}) < \infty$. Označme \mathcal{N}_k systém všech konečných množin na \mathcal{X} a $\mathfrak{N}_k = \sigma(\{x \in \mathcal{N}_k : x(B) = m\}, B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}), m \in \mathbb{N}_0)$. Platí $\mathcal{N}_k \subset \mathcal{N}_{lk}$.

Definice 2.40 Nechť Y je Poissonův bodový proces s intenzitou 1. Pro $F \in \mathfrak{N}_k$ označíme $\Pi(F) = \mathbb{P}(Y \in F)$. Bodový proces X je daný hustotou $f : \mathcal{N}_k \mapsto \mathbb{R}$ vzhledem k Poissonovu bodovému procesu Y , jestliže

$$\mathbb{P}(X \in F) = \int_F f(x) d\Pi(x).$$

Platí, že

$$\mathbb{P}(X \in F) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\Lambda(\mathcal{X})}}{n!} \int_{\mathcal{X}} \dots \int_{\mathcal{X}} \mathbf{1}_{[(\xi_1, \dots, \xi_n) \in F]} f(\{\xi_1, \dots, \xi_n\}) d\xi_1 \dots d\xi_n.$$

Definice 2.41 Řekneme, že hustota $f : \mathcal{N}_k \mapsto \mathbb{R}_+$ je lokálně stabilní, jestliže

$$\exists(c > 0) \forall(x \in \mathcal{N}_k) \forall(\xi \in \mathcal{X} \setminus x) : f(x \cup \{\xi\}) \leq c f(x).$$

Definice 2.42 Řekneme, že hustota $f : \mathcal{N}_k \mapsto \mathbb{R}_+$ je Ruelle stabilní, jestliže

$$\exists(c > 0) \exists(k > 0) \forall(x \in \mathcal{N}_k) : f(x) \leq kc^{x(\mathcal{X})}.$$

Poznámka 2.8 Jestliže je f lokálně stabilní, potom je též Ruelle stabilní, navíc obě stability zajišťují integrovatelnost f vzhledem k Π , viz [31].

Poznámka 2.9 Často bývá problém s normováním hustoty, a proto se zavádí symbol \propto , který znamená „až na konstantu úměrnosti“. Například lze místo $f(x) = \alpha\beta^{x(\mathcal{X})}$ zapsat $f(x) \propto \beta^{x(\mathcal{X})}$.

Příklad 2.2 Hustota Poissonova bodového procesu s intenzitou $\beta\lambda$ vzhledem k Poissonovu bodovému procesu s intenzitou λ má tvar

$$f(x) = e^{(1-\beta)\lambda(\mathcal{X})} \beta^{x(\mathcal{X})} = \alpha\beta^{x(\mathcal{X})},$$

kde $\beta > 0$.

Lze ukázat, že f je lokálně stabilní a tedy integrovatelná.

Příklad 2.3 Proces s pevným jádrem má hustotu vzhledem k Π

$$f(x) = \alpha\beta^{x(\mathcal{X})} \mathbf{1}_{[d(\xi_i, \xi_j) > R] \text{ pro } \forall i \neq j},$$

kde $\alpha > 0, \beta > 0$.

Lze ukázat, že f je integrovatelná.

Pomocí hustoty vzhledem k Poissonovu bodovému procesu můžeme definovat Straussův bodový proces.

Definice 2.43 Řekneme, že bodový proces X je Straussův bodový proces, jestliže jeho hustota vzhledem k Poissonovu bodovému procesu je rovna

$$f(x) = \alpha\beta^{x(\mathcal{X})} \gamma^{S(x)},$$

kde $\alpha > 0, \beta > 0, \gamma \in [0, 1], 0^0 := 1$ a pro $R > 0$

$$S(x) = \sum_{x_i \neq x_j} \mathbf{1}_{[d(x_i, x_j) \leq R]}.$$

Parametr α je normující konstanta, parametr β ovlivňuje intenzitu procesu a γ udává, nakolik vzdálenost dvou různých bodů může být menší než R , a tedy

- $\gamma = 1 \Rightarrow X$ je Poissonův bodový proces,
- $\gamma = 0 \Rightarrow X$ je bodový proces s pevným jádrem.

2.3.5 Markovské bodové procesy

Definice 2.44 Symetrická a reflexivní relace \sim definovaná na \mathcal{X} se nazývá sousedství. Říkáme, že ξ a ζ jsou sousedi, jestliže pro $\xi, \zeta \in \mathcal{X}$ platí $\xi \sim \zeta$. Sousedství bodu ξ je $\partial\xi = \{\zeta \in \mathcal{X} : \zeta \sim \xi\}$.

Definice 2.45 Řekneme, že $g : \mathcal{N}_k \mapsto \mathbb{R}_+$ je markovská funkce, jestliže

$$a) x, y \in \mathcal{N}_k, y \subset x, g(x) > 0 \Rightarrow g(y) > 0 \text{ (dědičnost)},$$

$$b) \text{funkce } \lambda^*(x, \xi) \text{ na } \mathcal{N}_{lk} \times \mathcal{X} \text{ definovaná vztahem}$$

$$\begin{aligned} \lambda^*(x, \xi) &= \frac{f(x \cup \{\xi\})}{f(x)} && \text{pro } f(x) > 0 \text{ a } \xi \in \mathcal{X} \setminus x, \\ &= 0 && \text{jinak,} \end{aligned} \quad (2.21)$$

závisí na ξ pouze prostřednictvím $x \cap \partial\xi$ (lokální markovská vlastnost).

Poznamenejme, že $\lambda^*(x, \xi)$ definovaná (2.21) se nazývá Papangelouova podmíněná intenzita.

Definice 2.46 Konečný bodový proces X je markovský, jestliže má hustotu f vzhledem k Poissonovu procesu a f je markovská funkce.

Příklad 2.4

1. Poissonův bodový proces je markovský, neboť
 $f(x) \propto \beta^{x(\mathcal{X})}$ a $\lambda^*(x, \xi) = \beta$.

2. Straussův bodový proces je markovský, neboť
 $f(x) \propto \beta^{x(\mathcal{X})} \gamma^{S(x)}$ a $\lambda^*(x, \xi) = \beta \gamma^{x(\partial(\xi))}$.

Definice 2.47 Měřitelnou funkci $\phi : \mathcal{N}_k \mapsto \mathbb{R}_+$ nazýváme interakční funkce, jestliže $\phi(x) = 1$, když existuje $\xi, \zeta \in x$ takové, že $\xi \nsim \zeta$.

Věta 2.4 (Hammersley-Clifford-Ripley-Kellyho věta) Funkce $f : \mathcal{N}_k \mapsto \mathbb{R}_+$ je markovská funkce právě tehdy, když existuje interakční funkce ϕ taková, že

$$f(x) = \prod_{y \subseteq x} \phi(y), \quad x \in \mathcal{N}_k.$$

Dále pro $f(x) > 0$, $x \in \mathcal{N}_k$ a $\xi \in \mathcal{X} \setminus x$ platí, že

$$\lambda^*(x, \xi) = \prod_{y \subseteq x} \phi(y \cup \xi).$$

Důkaz: Viz [31], Věta 6.1. □

2.4 Základy markovských řetězců se spojitou množinou stavů

Nechť Π je dané pravděpodobnostní rozdělení na obecném prostoru stavů S opatřeném separabilní σ -algebrou \mathcal{S} . Sestrojíme časově homogenní markovský řetězec Y_0, Y_1, \dots s množinou stavů S tak, že

$$P^m(x, A) \rightarrow \Pi(A),$$

kde $A \in \mathcal{S}, x \in S$ a

$$P^m(x, A) = P(Y_m \in A | Y_0 = x)$$

je m -tá pravděpodobnost přechodu. Časová homogenita znamená, že přechodové jádro

$$P(x, A) = P(Y_{m+1} \in A | Y_m = x)$$

nezávisí na $m \in \mathbb{N}_0$. Rozdělení Y_0 se nazývá počáteční rozdělení.

Definice 2.48 Řekneme, že Π je invariantní rozdělení, jestliže pro každé m platí

$$\mathfrak{L}(Y_m) = \Pi \Rightarrow \mathfrak{L}(Y_{m+1}) = \Pi.$$

Řekneme, že řetězec je reversibilní vzhledem k Π , jestliže z $\mathfrak{L}(Y_m) = \Pi$ vyplývá, že (Y_m, Y_{m+1}) a (Y_{m+1}, Y_m) mají stejně rozdělení, tj. $A, B \in \mathcal{S} : \mathfrak{L}(Y_m) = \Pi \Rightarrow$

$$\mathbb{P}(Y_m \in A, Y_{m+1} \in B, Y_m \neq Y_{m+1}) = \mathbb{P}(Y_m \in B, Y_{m+1} \in A, Y_m \neq Y_{m+1}).$$

Definice 2.49 Řekneme, že řetězec je nerozložitelný, jestliže existuje nezáporná míra Ψ na (S, \mathcal{S}) taková, že pro libovolné $x \in S$ a $A \in \mathcal{S}$ je $\Psi(A) > 0$, $P^m(x, A) > 0$ pro nějaké $m \in \mathbb{N}$. Pro zdůraznění závislosti na Ψ říkáme, že řetězec je Ψ -nerozložitelný.

Definice 2.50 Harrisova rekurence znamená, že řetězec je Ψ -nerozložitelný pro nějakou Ψ a

$$\forall x \in S \forall A \in \mathcal{S}, \Psi(A) > 0 : \mathbb{P}(Y_m \in A \text{ pro nějaké } m | Y_0 = x) = 1.$$

Definice 2.51 Pro Ψ -nerozložitelný řetězec může být S rozdělena na disjunktní množiny D_0, \dots, D_{k-1} , A tak, že $P(x, D_j) = 1$ pro $x \in D_i$ a $j = (i+1) \bmod k$, a $\Psi(A) = 0$. Řekneme, že řetězec je periodický, jestliže zde existuje $k > 1$, jinak říkáme, že řetězec je aperiodický.

Definice 2.52 Řekneme, že řetězec je ergodický, jestliže je Harrisovsky rekurentní a aperiodický.

Nechť Π je invariantní rozdělení nerozložitelného markovského řetězce s množinou stavů S .

Definice 2.53 Pro $x \in S$ a funkci $V : S \rightarrow [1, \infty)$ s $\Pi(V) < \infty$ definujme V -normu $\mathbb{P}^m(x, \cdot) - \Pi$ takto

$$\|\mathbb{P}^m(x, \cdot) - \Pi\|_V = \frac{1}{2} \sup_{|k| \leq V} |\mathbb{E}[k(Y_m) | Y_0 = x] - \Pi(k)|,$$

kde supremum je přes všechny funkce $k : S \rightarrow \mathbb{R}$ takové, že $|k(\cdot)| \leq V(\cdot)$.

Definice 2.54 Řekneme, že řetězec je V -geometricky ergodický, jestliže je Harrisovsky rekurentní s invariantním rozdělením Π a existuje konstanta $c > 1$ taková, že pro všechna $x \in S$ platí, že

$$\sum_{m=1}^{\infty} c^m \|P^m(x, \cdot) - \Pi\|_V < \infty. \quad (2.22)$$

Definice 2.55 Řekneme, že řetězec je geometricky ergodický, jestliže je V -geometricky ergodický pro nějaké V .

Poznámka 2.10 (Viz [31], kap. 7)

1. Nechť \tilde{c} je konstanta. Nerovnost (2.22) je ekvivalentní s nerovností

$$\|P^m(x, \cdot) - \Pi\|_V \leq A(x) \tilde{c}^m, \quad (2.23)$$

kde $A(x) < \infty$ a $\tilde{c} < 1$.

2. Jestliže je řetězec geometricky ergodický s $A(\cdot) \approx V(\cdot)$ v (2.23), řekneme, že řetězec je V -stejnoměrně ergodický.
3. Jestliže je řetězec geometricky ergodický pro konstantní funkci A v (2.23), říkáme, že řetězec je stejnoměrně ergodický.

2.5 MCMC, Metropolis-Hastingsův algoritmus

Markov Chain Monte Carlo (MCMC) je třída algoritmů, která nám umožňuje simulovat složité stochastické systémy. Můžeme jimi simulovat výběr z nějakého komplikovaného pravděpodobnostního rozdělení, které známe až na multiplikativní konstantu.

Označme Π jako cílové rozdělení bodového procesu s nenormovanou hustotou $p(x)$, viz kapitola 2.4. MCMC algoritmus je předpis, kterým postupně generujeme markovský řetězec Y_0, Y_1, \dots , jehož stacionární rozdělení je Π .

Příkladem MCMC algoritmu je Metropolis-Hastingsův algoritmus rození a zániku, různé varianty tohoto algoritmu jsou popsány v [31], kap. 7.

Algoritmus 2.1 (Metropolis-Hastingsův algoritmus rození a zániku)

Simulujeme realizaci z rozdělení s nenormovanou hustotou h vzhledem k Poissonovému bodovému procesu na borelovské množině B s mírou intenzity 1.

Pro $m = 0, 1, \dots$ je dána konfigurace $Y_m = x$ a následnou konfiguraci Y_{m+1} generujeme takto

1. vybereme $\mathcal{L}(R_m^1) = R([0, 1])$ a $\mathcal{L}(R_m^2) = R([0, 1])$,
2. jestliže $R_m^1 \leq p(x)$, potom generujeme $\mathcal{L}(\xi_m) = q_b(x, \cdot)$ a položíme

$$Y_{m+1} = \begin{cases} x \cup \xi_m & \text{pokud } R_m^2 \leq r_b(x, \xi_m), \\ x & \text{jinak} \end{cases},$$

3. jestliže $R_m^1 > p(x)$, potom

- (a) pokud $x = \emptyset$, potom $Y_{m+1} = x$,
- (b) jinak generujeme $\mathcal{L}(\eta_m) = q_d(x, \cdot)$ a položíme

$$Y_{m+1} = \begin{cases} x \setminus \eta_m, & \text{pokud } R_m^2 \leq r_d(x, \eta_m), \\ x & \text{jinak} \end{cases}.$$

V algoritmu použité náhodné veličiny R_m^1, R_m^2, ξ_m a η_m (použité pro generování Y_{m+1}) jsou podmíněně nezávislé při daných náhodných veličinách užitých pro generování stavů řetězce (Y_0, \dots, Y_m) . Dále je pro každé $x \in \mathcal{N}_k$

dána pravděpodobnost $p(x)$, se kterou je v každé iteraci přidán bod ξ k aktuální konfiguraci x , tj. $x \rightarrow x \cup \xi$. $q_b(x, \cdot)$ je návrhová hustota pro přidání (rození) bodu k x a $r_b(x, \xi)$ je Hastingsův poměr pro přidání bodu, který má obecně tvar

$$r_b(x, \xi) = \frac{h(x \cup \xi)(1 - p(x \cup \xi))q_b(x \cup \xi, \xi)}{h(x)p(x)q_b(x, \xi)},$$

přičemž položíme $\frac{a}{0} := 1$ pro $a \geq 0$. Obdobně to platí pro odebírání (zánik) bodu η z aktuální konfigurace x , tj. $x \rightarrow x \setminus \eta$. $q_d(x, \cdot)$ je návrhová hustota pro odebrání bodu z x a $r_d(x, \eta)$ je příslušný Hastingsův poměr, jehož tvar je

$$r_d(x, \eta) = \frac{h(x \setminus \eta)p(x \setminus \eta)q_d(x \setminus \eta, \eta)}{h(x)(1 - p(x))q_d(x, \eta)},$$

přičemž opět položíme $\frac{a}{0} := 1$ pro $a \geq 0$.

Následující definice zobecňuje pojem lokální stability z definice 2.41.

Definice 2.56 Nechť $\phi^* : B \rightarrow \mathbb{R}_+$. Řekneme, že měřitelná funkce h je ϕ^* -lokálně stabilní, jestliže $\lambda^*(x, \xi) \leq \phi^*(\xi)$ a $0 < c^* < \infty$, kde λ^* je defnována v (2.21) a konstanta $c^* = \int_B \phi^*(\xi) d\xi$.

Poznámka 2.11 Pokud h je ϕ^* -lokálně stabilní, $p(\cdot) = p$ je konstanta s $0 < p < 1$, $q_b(x, \xi) = \phi^*(\xi)/c^*$ a $q_d(x, \eta) = \mathbf{1}_{[\eta \in x]}/n(x)$, potom získáme tzv. lokálně stabilní verzi Metropolis-Hastingsova algoritmu rození a zániku (viz [31], poznámka 7.6).

Tvrzení 2.3 Uvažujme markovský řetězec generovaný lokálně stabilní verzí Metropolis-Hastingsova algoritmu rození a zániku. Nechť $V(x) = \beta^{n(x)}$ pro libovolnou konstantu $\beta > 1$. Potom řetězec je V -stejnomořně ergodický.

Důkaz: Viz [31], Tvrzení 7.14 □

2.6 Lévyho proces

Definice 2.57 Nechť $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ je pravděpodobnostní prostor. Řekneme, že stochastický proces $\{Z_t : t \geq 0\}$ na \mathbb{R}^d je Lévyho proces, jestliže jsou splněny následující podmínky

1. pro každý výběr $n \geq 1$ a $0 \leq t_0 < t_1 < \dots < t_n$ jsou náhodné veličiny $Z_{t_0}, Z_{t_1} - Z_{t_0}, Z_{t_2} - Z_{t_1}, \dots, Z_{t_n} - Z_{t_{n-1}}$ nezávislé (nezávislost příruštků),
2. $Z_0 = 0$ s.j.,
3. $\forall s, t \geq 0 : \text{rozdelení } Z_{s+t} - Z_s \text{ nezávisí na } s$ (časová stacionarita příruštků),
4. $\forall t \geq 0 \forall \epsilon > 0 : \lim_{s \rightarrow t} \mathbb{P}[|Z_s - Z_t| > \epsilon] = 0$ (stochastická spojitost),
5. $\exists \Omega_0 \in \mathcal{A}$ s $\mathbb{P}[\Omega_0] = 1$ takové, že pro každé $\omega \in \Omega_0$, $Z_t(\omega)$ je zprava spojité v $t \geq 0$ a má limity zleva v $t > 0$.

Definice 2.58 Řekneme, že míra μ na \mathbb{R}^d je Lévyho míra, jestliže platí

$$\mu(\{0\}) = 0 \quad \text{a} \quad \int_{\mathbb{R}^d} \min(||x||^2, 1) \mu(dx) < \infty.$$

Definice 2.59 Řekneme, že stochastický proces $\{X_t : t \geq 0\}$ na \mathbb{R}^d definovaný na pravděpodobnostním prostoru $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ je Brownův pohyb (nebo též Wienerův proces), jestliže je to Lévyho proces a jestliže platí

1. pro $t > 0$, X_t má normální rozdělení s nulovým vektorem středních hodnot a varianční maticí tI , kde I je jednotková matice
2. a existuje $\Omega_0 \in \mathcal{A}$ s $\mathbb{P}(\Omega_0) = 1$ taková, že $\forall \omega \in \Omega_0$: $X_t(\omega)$ je spojité v t .

Brownův pohyb na \mathbb{R}^d je někdy též nazýván d -rozměrný Brownův pohyb.

Definice 2.60 Necht' $E \subset \mathbb{R}^d$. Radonova míra μ na $(E, \mathcal{B}(E))$ je taková míra, že pro každou kompaktní měřitelnou borelovskou množinu $B \in \mathcal{B}(E)$ platí $\mu(B) < \infty$.

Definice 2.61 Necht' $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ je pravděpodobnostní prostor, $E \subset \mathbb{R}^d$ a μ je daná (kladná) Radonova míra μ na (E, \mathcal{E}) . Poissonova náhodná míra na E s mírou intenzity μ je celočíselná hodnota náhodné míry

$$\begin{aligned} M : \quad \Omega \times \mathcal{E} &\rightarrow \mathbb{N} \\ (\omega, A) &\mapsto M(\omega, A) \end{aligned}$$

taková, že

1. pro skoro všechna $\omega \in \Omega$, $M(\omega, \cdot)$ je celočíselná míra na E ,
2. pro každou měřitelnou množinu $A \subset E$, $M(\cdot, A) = M(A)$ je Poissonova náhodná veličina s parametrem $\mu(A)$, tj.

$$\forall k \in \mathbb{N} : \mathbb{P}(M(A) = k) = e^{-\mu(A)} \frac{(\mu(A))^k}{k!},$$

3. pro disjunktní měřitelné množiny $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{E}$ jsou veličiny $M(A_1), \dots, M(A_n)$ nezávislé.

Definice 2.62 Složený Poissonův proces s intenzitou $\lambda > 0$ a rozdelením velikosti skoků f je stochastický proces X_t definovaný jako

$$X_t = \sum_{i=1}^{N_t} Y_i,$$

kde velikosti skoků Y_i jsou nezávislé stejně rozdelené s rozdelením f , (N_t) je Poissonův proces s intenzitou λ a je nezávislý na $\{Y_i, i \geq 1\}$.

Tvrzení 2.4 (Lévy-Itô dekompozice) Nechť $\{Z_t, t \geq 0\}$ je Lévyho proces na \mathbb{R}^d , pak existuje Lévyho míra μ taková, že

1. μ je náhodná míra na $\mathbb{R}^d \setminus \{\mathbf{0}\}$ a platí

$$\int_{|x| \leq 1} |x|^2 \mu(dx) < \infty \quad \text{a} \quad \int_{|x| \geq 1} \mu(dx) < \infty$$

2. Míra skoků Z , označme ji J_Z , je Poissonova náhodná míra na $[0, \infty] \times \mathbb{R}^d$ s mírou intenzity $\mu(dx)dt$.
3. Existuje vektor a (tzv. drift) a d -rozměrný Brownův pohyb $\{B_t, t \geq 0\}$ s kovarianční maticí A takový, že

$$\begin{aligned} Z_t &= at + B_t + Z_t^l + \lim_{\epsilon \downarrow 0} \tilde{Z}_t^\epsilon, \quad \text{kde} \\ Z_t^l &= \int_{|z| \geq 1, s \in [0, t]} z J_Z(ds \times dz) \quad a \\ \tilde{Z}_t^\epsilon &= \int_{\epsilon \leq |z| < 1, s \in [0, t]} z \{J_Z(ds \times dz) - \mu(dx)ds\} \\ &\equiv \int_{\epsilon \leq |z| < 1, s \in [0, t]} z \tilde{J}_Z(ds \times dz). \end{aligned}$$

Výrazy v bodě 3 jsou nezávislé a konvergence posledního výrazu je skoro jistě a je stejnoměrná v t na $[0, T]$.

Důkaz: Viz [12], str. 81. \square

Tento proces je charakterizován trojicí (a, A, μ) , která je zavedena v Lévy-Itô dekompozici (tvrzení 2.4). Uvažujme trojici ve tvaru $(a, 0, \mu)$, tj. bez gaussovské složky, dále $a = (a_1, \dots, a_d) \in \mathbb{R}^d$ a Lévyho míru μ na \mathbb{R}^d . Pro výše zmíněnou trojici uvedeme Lévy-Khinchinovu reprezentaci.

Věta 2.5 (Lévy-Khinchinova reprezentace) Necht' $\{Z_t, t \geq 0\}$ je Lévyho proces na \mathbb{R}^d s charakteristickou trojicí $(a, 0, \mu)$. Potom

$$\mathbb{E}[e^{i\langle \zeta, Z_t \rangle}] = e^{t\psi(\zeta)}, \quad \zeta \in \mathbb{R}^d, \quad (2.24)$$

kde

$$\psi(\zeta) = i\langle a, \zeta \rangle + \int_{\mathbb{R}^d} (e^{i\langle \zeta, x \rangle} - 1 - i\langle \zeta, x \rangle \mathbf{1}_{\{|x| \leq 1\}}) \mu(dx). \quad (2.25)$$

Důkaz: Viz [12], str. 83. \square

Použijeme následující symboliku pro transformaci

$$C\{\zeta \notin Z(t)\} = tC\{\zeta \notin Z(1)\} = t \log \mathbb{E}(e^{i\langle \zeta, Z(1) \rangle}) = t\psi(\zeta),$$

kde ψ je definována v (2.25) a poslední rovnost plyne z (2.24).

2.7 \mathfrak{N} -vzdálenost

Níže uvedené základy teorie \mathfrak{N} -vzdáleností jsou založeny na [23].

Necht' \mathcal{X} je neprázdná množina a $(\mathcal{X}, \mathfrak{U})$ je měřitelný prostor. $\mathcal{B}_{\mathcal{L}}$ je množina všech pravděpodobnostních měr μ na $(\mathcal{X}, \mathfrak{U})$, pro kterou platí

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} \mathcal{L}(x, y) d\mu(x) d\mu(y) < \infty,$$

kde \mathcal{L} je reálná spojitá funkce na $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$.

Definice 2.63 Řekneme, že \mathcal{L} je negativně definitní jádro na \mathcal{X}^2 , jestliže pro $n \in \mathbb{N}$, libovolné body $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ a libovolné $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{C}$ takové, že $\sum_{j=1}^n c_j = 0$, platí

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathcal{L}(x_i, x_j) c_i \bar{c}_j \leq 0. \quad (2.26)$$

Pokud rovnost v (2.26) nastává pouze pro $c_1 = \dots = c_n = 0$, řekneme, že \mathcal{L} je striktně negativně definitní jádro.

Definice 2.64 Necht' Q je míra na $(\mathcal{X}, \mathfrak{U})$ a $h(x)$ je libovolná funkce integrovatelná podle Q , pro kterou platí $\int_{\mathcal{X}} h(x)dQ(x) = 0$. Řekneme, že \mathcal{L} je silně negativně definitní jádro na \mathcal{X}^2 , jestliže \mathcal{L} je striktně negativně definitní jádro a rovnost

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} \mathcal{L}(x, y)h(x)h(y)dQ(x)dQ(y) = 0$$

nastává, pokud $h(x) = 0$ s.v. vzhledem k míře Q .

Zavedeme funkci \mathcal{N} následovně

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\mu, \nu) &= 2 \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} \mathcal{L}(x, y)d\mu(x)d\nu(y) + \\ &\quad - \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} \mathcal{L}(x, y)d\mu(x)d\mu(y) - \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} \mathcal{L}(x, y)d\nu(x)d\nu(y), \end{aligned} \tag{2.27}$$

kde \mathcal{L} je silně negativně definitní jádro, μ, ν jsou pravděpodobnostní míry z $\mathcal{B}_{\mathcal{L}}$.

Následující věta zavádí \mathfrak{N} -vzdálenost, nebo-li vzdálenost dvou pravděpodobnostních měr na množině $\mathcal{B}_{\mathcal{L}}$.

Věta 2.6 Necht' \mathcal{L} je silně negativně definitní jádro na $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$, pro které platí

$$\mathcal{L}(x, y) = \mathcal{L}(y, x) \text{ a } \mathcal{L}(x, x) = 0 \text{ pro } \forall x, y \in \mathcal{X}, \tag{2.28}$$

a necht' \mathcal{N} je definována v (2.27). Potom $\mathfrak{N}(\mu, \nu) = \mathcal{N}(\mu, \nu)^{\frac{1}{2}}$ je vzdálenost na $\mathcal{B}_{\mathcal{L}}$.

Zaměřme se nyní na případ, kdy $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$. Uvažujme náhodné nezávislé vektory X, X' s rozdelením μ a náhodné nezávislé vektory Y, Y' s rozdělením ν , potom budeme používat pro funkce \mathcal{N} a \mathfrak{N} následující značení

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(X, Y) &:= \mathcal{N}(\mu, \nu) = \\ &= 2\mathbb{E}\mathcal{L}(X, Y) - \mathbb{E}\mathcal{L}(X, X') - \mathbb{E}\mathcal{L}(Y, Y') \end{aligned}$$

a

$$\mathfrak{N}(X, Y) := \mathfrak{N}(\mu, \nu).$$

Nyní uvedeme příklad silně negativně definitního jádra [23].

Příklad 2.5 Nechť máme vektory $x, y \in \mathbb{R}^d$.

$$\mathcal{L}(x, y) = \|x - y\|^r \quad (2.29)$$

je silně negativně definitní jádro, pokud $0 < r < 2$ a $\|\cdot\|$ je eukleidovská norma na \mathbb{R}^d .

Poznámka 2.12 V případě $r = 0$ nebo $r = 2$ je \mathcal{L} z příkladu 2.5 striktně negativně definitní jádro.

Kapitola 3

Coxův bodový proces řízený Ornstein-Uhlenbeckovým procesem

V této kapitole se budeme zabývat speciálním případem dvojně stochastického procesu, konkrétně časovým Coxovým bodovým procesem na \mathbb{R}^d řízeným Ornstein-Uhlenbeckovým procesem (OUCP). Hlavními výsledky této kapitoly jsou věta 3.2 a věta 3.3 spolu se studiem nelineárního filtrování OUCP. Budeme zde používat teorii z kapitol 2.3, 2.4, 2.5 a 2.6.

Definice 3.1 Řekneme, že $X = \{X(t), t \geq 0\}$ na \mathbb{R}^d je Ornstein-Uhlenbeckův proces (OU), jestliže je řešením stochastické diferenciální rovnice

$$dX(t) = -\gamma X(t)dt + dZ(\gamma t), \quad (3.1)$$

kde Z je Lévyho proces (viz definice 2.57).

Máme

$$X(t) = e^{-\gamma t} \left(x_0 + \int_0^{\gamma t} e^s dZ(s) \right) \quad (3.2)$$

a předpokládejme, že $x_0 \geq 0$ ve všech složkách. Typ měřítka ve vztahu (3.1) zaručuje pro pevné t rovnost rozdělení procesu $X(t)$ pro všechny hodnoty $\gamma > 0$ ve stacionárním případě uvedeném níže.

Lévyho proces $Z = \{Z(t)\}_{t \geq 0}$ na \mathbb{R}^d v (3.2) nazýváme základní řídící Lévyho proces (BDLP z angl. Background Driving Lévy Process) procesu X .

Dále nechť $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_d)$ je časový Coxův bodový proces na \mathbb{R}^d , jehož řídící mírou je nezáporný, lokálně integrovatelný proces X , tj. za podmínky $X = (X_1, \dots, X_d)$ předpokládáme, že Φ_i jsou nezávislé Poissonovy procesy s funkcemi intenzity X_i pro $i = 1, \dots, d$. Za řídící proces X s těmito vlastnostmi zvolíme Ornstein-Uhlenbeckův proces. Označme časový Coxův bodový proces řízený Ornstein-Uhlenbeckovým procesem jako Φ_{OU} .

Pro nezápornost procesu X z (3.2) je nutné, aby Lévyho proces Z měl skoro jistě nezáporné složky a navíc míra μ měla nosič na $\mathbb{R}_+^d = [0, \infty) \times \dots \times [0, \infty)$ a drift $a_{0j} = a_j - \int_{|x| \leq 1} x_j \mu(dx)$ byl nezáporný ve všech složkách X_j , $j = 1, \dots, d$.

V případě, že platí $\mu(\mathbb{R}^d) = \bar{\mu} < \infty$, potom z Lévy-Itó formule (tvrzení 2.4) a (3.2) vyplývá, že X může být vyjádřen jako

$$X(t) = x_0 e^{-\gamma t} + a_0(1 - e^{-\gamma t}) + \sum_{0 < t_j \leq \gamma t} z_j e^{t_j - \gamma t}, \quad (3.3)$$

kde t_j jsou náhodné časy skoků (Poissonův proces s intenzitou $\bar{\mu}$) a $z_j = Z(t_j) - Z(t_{j-})$ jsou velikosti skoků. V případě Poissonova složeného procesu platí, že drift $a_0 = (a_{01}, \dots, a_{0k}) = (0, \dots, 0)$.

Poznamenejme, že proces X definovaný v (3.3) je markovský proces a jestliže pro něj platí, že

$$\int_{|x| > 2} \log |x| \mu(dx) < \infty,$$

potom má stacionární rozdělení. Použijeme-li tohoto rozdělení pro náhodné $X(0)$ místo pevného x_0 můžeme definovat stacionární OU proces $\{X(t), t \geq 0\}$ na \mathbb{R}^d . V tomto případě Φ_{OU} je také stacionární. Funkce intenzity procesu Φ_{OU} je $\lambda(t) = \mathbb{E}X(t)$. Ze vztahu (3.2) dostaneme

$$\lambda(t) = x_0 e^{-\gamma t} + \mathbb{E}Z(1)(1 - e^{-\gamma t}),$$

kde pro j -tou složku Z platí

$$\mathbb{E}Z_j(1) = I_j = a_j + \int_{|\phi| > 1} \phi_j \mu(dy), \quad j = 1, \dots, d. \quad (3.4)$$

Nyní uvedeme algoritmus na simulaci složek realizace Φ_{OU} v uzavřeném intervalu $[0, T]$.

Algoritmus 3.2 (Simulace OUCP)

1. Simulujeme BDLP Z pomocí některé z metod popsaných v [12], kap. 6,
2. získáme proces X z procesu Z ze vztahu (3.3),
3. spočteme $M = \max_{[0,T]} X(t)$,
4. vybereme náhodné číslo N z Poissonova rozdělení se střední hodnotou $M \cdot T$,
5. simulujeme body $\tau_i, i = 1, \dots, N$ rovnoměrně náhodně rozdělené na intervalu $[0, T]$,
6. každý z bodů $\tau_i, i = 1, \dots, N$ ponecháme s pravděpodobností $\frac{X(\tau_i)}{M}$, jinak jej odstraníme,
7. množina zbývajících bodů $\tilde{\tau}_j, j = 1, \dots, m, m \leq N$ prezentuje požadované složky realizace OUCP.

3.1 Závislosti v dvourozměrných procesech

V této části se omezíme na případ $d = 2$ a budeme charakterizovat závislosti složek Φ_{OU} . Závislosti složek OU procesu vyplývají ze základního řídícího Lévyho procesu. Tato problematika je pro případ skokových procesů popsána v monografii [12], kde je využívána Lévyho kopule.

Definice 3.2 *Řekneme, že funkce C je 2-rostoucí funkce, jestliže platí*

$$C(x_2, y_2) - C(x_2, y_1) - C(x_1, y_2) + C(x_1, y_1) \geq 0, \text{ pokud } x_2 \geq x_1 \text{ a } y_2 \geq y_1.$$

Definice 3.3 Dvourozměrná kopule je funkce C definovaná na $[0, 1]^2$ taková, že je 2-rostoucí funkce a pro její marginály $C_k, k = 1, 2$, platí, že $C_k(u) = u$ pro každé $u \in [0, 1]$.

Definice 3.4 Integrál chvostu pro Lévyho míru μ na $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+$ je funkce V , pro kterou platí

$$\begin{aligned} V(0, 0) &= \infty, \\ V(x, y) &= 0, \text{ jestliže } x = \infty \text{ nebo } y = \infty, \\ V(x, y) &= \mu([x, \infty) \times [y, \infty)), \quad (x, y) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \setminus \{0\}. \end{aligned}$$

Definice 3.5 Dvourozměrná Lévyho kopule pro Lévyho procesy s kladnými skoky (neboli kladná Lévyho kopule) je 2-rostoucí funkce C na $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+$, pro kterou platí

$$C(x, 0) = C(0, x) = 0, \quad C(x, \infty) = C(\infty, x) = x$$

pro každé $x \in \mathbb{R}_+$.

Z věty 5.3 v [12] vyplývá, že pro dvourozměrný integrál chvostu V s marginálními funkcemi V_1 a V_2 existuje kladná Lévyho kopule C taková, že

$$V(x, y) = C(V_1(x), V_2(y)).$$

Pokud V_1 a V_2 jsou spojité, potom je Lévyho kopule dána jednoznačně.

K simulaci Lévyho procesů lze použít algoritmy uvedené v [12], kap. 6. My se zaměříme na případ simulace dvourozměrného Lévyho procesu s kladnými skoky a závislými složkami procesu. Uvažovaná závislost složek je uvedena v následující větě.

Věta 3.1 Nechť (Z_s) je dvourozměrný Lévyho proces s pozitivními skoky s marginálními integrály chvostu V_1 a V_2 a Lévyho kopulí $C(x, y)$. Jestliže je C spojitá na $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+$, potom proces Z lze reprezentovat na intervalu $[0, 1]$ vztahem

$$\{Z_s, 0 \leq s \leq 1\} \stackrel{d}{=} \{\tilde{Z}_s, 0 \leq s \leq 1\}$$

kde

$$\tilde{Z}_s^1 = \sum_{i=1}^{\infty} V_1^{(-1)}(\Gamma_i^{(1)}) \mathbf{1}_{[0, s]}(A_i), \quad (3.5)$$

$$\tilde{Z}_s^2 = \sum_{i=1}^{\infty} V_2^{(-1)}(\Gamma_i^{(2)}) \mathbf{1}_{[0, s]}(A_i), \quad (3.6)$$

kde (A_i) jsou nezávislé náhodné veličiny rovnoměrně rozdělené na $[0, 1]$, $(\Gamma_i^{(1)})$ je posloupnost nezávislých časových okamžiků skoků mající rozdělení standardního

Poissonova procesu a pro každé i , při daném $\Gamma_i^{(1)}$ je $\Gamma_i^{(2)}$ nezávislé na všech ostatních veličinách a má distribuční funkci (funkce y) $\frac{\partial}{\partial x} C(x, y)|_{x=\Gamma_i^{(1)}}$.

Řady v (3.5) resp. (3.6) konvergují skoro jistě a stejnoměrně pro $s \in [0, 1]$.

Důkaz: Viz [12], str. 201. \square

Nyní uvedeme algoritmus, který užívá větu 3.1 (viz [12], kap. 6).

Algoritmus 3.3 (Simulace dvouozměrného BDLP)

Zvolme číslo τ , které reprezentuje průměrný počet členů v řadě a určuje rovněž, že ty skoky v první složce, které jsou menší než $V^{(-1)}(\tau)$, nejsou dále zpracovávány.

1. Položíme $k = 0, \Gamma_0^{(1)} = 0$,
2. posuneme k o jedna, tj. $k \longrightarrow k + 1$,
3. simulujeme $\mathcal{L}(T_k) = Exp(1)$, kde Exp značí exponenciální rozdělení,
4. položíme $\Gamma_k^{(1)} = \Gamma_{k-1}^{(1)} + T_k$, tj. transformovaný skok v první složce,
5. simulujeme $\Gamma_k^{(2)}$ z rozdělení s distribuční funkcí

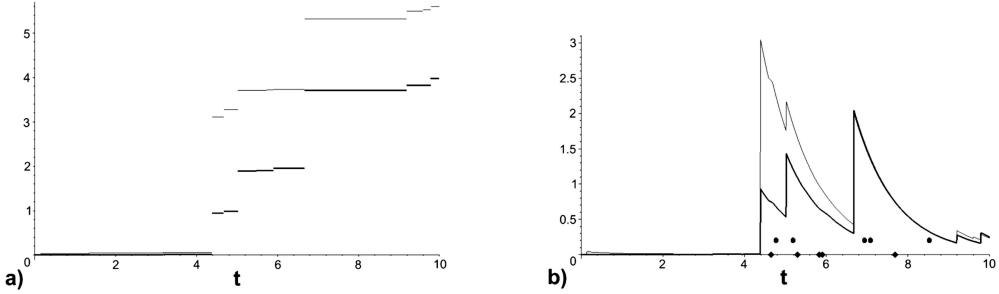
$$F_1(y) = \left. \frac{\partial}{\partial x} C(x, y) \right|_{x=\Gamma_k^{(1)}},$$

tj. transformovaný skok ve druhé složce,

6. simulujeme $\mathcal{L}(A_k) = R([0, 1])$, tj. čas skoku,
7. je-li $\Gamma_k^{(1)} < \tau$, potom se vracíme k bodu 2, jinak pokračujeme,
8. spočteme výsledné trajektorie pomocí následujících vztahů

$$\begin{aligned} Z^1(t) &= \sum_{i=1}^k \mathbf{1}_{[A_i \leq t]} V_1^{(-1)}(\Gamma_i^{(1)}), \\ Z^2(t) &= \sum_{i=1}^k \mathbf{1}_{[A_i \leq t]} V_2^{(-1)}(\Gamma_i^{(2)}). \end{aligned}$$

Nyní uvedeme příklad, ve kterém je použita Claytonova Lévyho kopule.



Obr. 3.1: a) Simulované trajektorie BDLP $Z = (Z_1, Z_2)$ (tenká čára pro Z_1 a silná čára pro Z_2) na intervalu $[0, \gamma T]$ s Claytonovou Lévyho kopulí a marginály (3.8). Parametry jsou $\theta = 2$, $T = 10$, $\gamma = 1$ and $x_0 = 0$. b) Transformace procesu Z do dvourozměrného OU procesu $X = (X_1, X_2)$ (tenká čára pro X_1 a silná čára pro X_2) na intervalu $[0, T]$ a odpovídajících realizací Coxova procesu $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2)$ (na ose x resp. nad osou x).

Příklad 3.1 Jednoparametrická Claytonova Lévyho kopule je definována vztahem

$$C_\theta(x, y) = (x^{-\theta} + y^{-\theta} - 1)^{-1/\theta}, \quad \theta > 0. \quad (3.7)$$

Se zvyšující se hodnotou parametru θ rychle roste závislost složek x a y a naopak pokud $\theta \rightarrow 0$, získáváme jejich nezávislost.

Pro simulaci realizací BDPL $Z = (Z_1, Z_2)$ s Claytonovou Lévyho kopulí (3.7) a marginály s Lévyho mírou

$$\begin{aligned} \mu_j(dx) &= x^{-\frac{3}{2}} dx, && \text{pro } x > 0, \\ &= 0 && \text{jinak} \end{aligned} \quad (3.8)$$

lze použít algoritmu 3.3. Ve skutečnosti se jedná o případ, ve kterém je v simulaci approximován zmíněný BDLP složeným Poissonovým procesem (viz definice 2.62) tak, že transformace na OU proces $X = (X_1, X_2)$ vyplývá z (3.3). Při daném X jsou složky Φ_{OU} simulovány nezávisle na základě definice pro jednodimensionální případ, viz obrázek 3.1.

Křížová párová korelační funkce je pro Coxův bodový proces dána vztahem (2.20), tedy pro Coxův bodový proces s řídící intenzitou $X = (X_1, X_2)$ je

$$g_{12}(t_1, t_2) = \frac{\mathbb{E}X_1(t_1)X_2(t_2)}{\mathbb{E}X_1(t_1)\mathbb{E}X_2(t_2)}. \quad (3.9)$$

Při vyčíslení této funkce pro Φ_{OU} potřebujeme složené rozdělení X v bozech t_1 a t_2 , což je možné získat díky markovské vlastnosti. Pro charakte-

ristickou funkci přechodu

$$M_t(x, z) = \int_{\mathbb{R}^d} P_t(x, y) e^{i\langle z, y \rangle} dy,$$

kde P_t je hustota přechodu, můžeme spočítat křížovou párovou korelační funkci.

Lemma 3.1 *OU proces X v (3.2) je časově homogenní markovský proces s charakteristickou funkcí přechodu*

$$M_t(x, z) = \exp \left[ie^{-\gamma t} \langle z, x \rangle + \gamma \int_0^t \psi(e^{-\gamma s} z) ds \right], \quad x, z \in \mathbb{R}^d, \quad (3.10)$$

kde ψ je definována v (2.25).

Důkaz: Vzorec (3.10) je odvozen v [39], str. 106, s jinou volbou měřítka v (3.3). \square

Předpokládejme, že BDLP Z na \mathbb{R}^2 má charakteristickou trojici $(a, 0, \mu)$, $a = (a_1, a_2)$. Pro vektor $y = (y_1, y_2)$ zavedeme následující značení

$$I_{12} = \int_{\mathbb{R}^2} y_1 y_2 \mu(dy). \quad (3.11)$$

Věta 3.2 *Nechť $0 < t_1 < t_2$ a pevné $x_0 = (s_1, s_2) \in \mathbb{R}^2$. Potom $\Phi_{OU} = (\Phi_1, \Phi_2)$ s řídící intenzitou $X = (X_1, X_2)$ má křížovou párovou korelační funkci*

$$g_{12}(t_1, t_2) = 1 + \frac{I_{12}(e^{-\gamma(t_2-t_1)} - e^{-\gamma(t_1+t_2)})}{2(I_1(1 - e^{-\gamma t_1}) + s_1 e^{-\gamma t_1})(I_2(1 - e^{-\gamma t_2}) + s_2 e^{-\gamma t_2})}, \quad (3.12)$$

kde I_j je dáno (3.4) a I_{12} je dáno (3.11).

Důkaz: Pro $z \in \mathbb{R}^4$ máme charakteristickou funkci $X(t_1), X(t_2)$ při daném $X(0) = s$

$$\begin{aligned} p(z) &= \int_{\mathbb{R}^4} e^{i\langle z, y \rangle} P_{t_1} \otimes P_{t_2-t_1}(s, dy) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\langle z_1, y_1 \rangle} \left(\int_{\mathbb{R}^2} e^{i\langle z_2, y_2 \rangle} P_{t_2-t_1}(y_1, dy_2) \right) P_{t_1}(s, dy_1) = (*) \end{aligned}$$

Dále použijeme dvakrát vztah (3.10), tedy

$$\begin{aligned}
(*) &\stackrel{(3.10)}{=} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\langle z_1, y_1 \rangle} \exp \left\{ ie^{-\gamma(t_2-t_1)} \langle z_2, y_1 \rangle + \right. \\
&\quad \left. + \gamma \int_0^{t_2-t_1} \psi(e^{-\gamma r} z_2) dr \right\} P_{t_1}(s, dy_1) = \\
&= \exp \left\{ \gamma \int_0^{t_2-t_1} \psi(e^{-\gamma r} z_2) dr \right\} \int_{\mathbb{R}^2} \exp \{ i \langle z_1 + \right. \\
&\quad \left. + e^{-\gamma(t_2-t_1)} z_2, y_1 \rangle \} P_{t_1}(s, dy_1) = \\
&\stackrel{(3.10)}{=} \exp \left\{ \gamma \int_0^{t_2-t_1} \psi(e^{-\gamma r} z_2) dr \right\} \exp \{ i e^{-\gamma t_1} \langle z_1 + e^{-\gamma(t_2-t_1)} z_2, s \rangle + \right. \\
&\quad \left. + \gamma \int_0^{t_1} \psi(e^{-\gamma r} (z_1 + e^{-\gamma(t_2-t_1)} z_2)) dr \right\} = \\
&= \exp \left\{ \gamma \int_0^{t_2-t_1} \psi(e^{-\gamma r} z_2) dr + \gamma \int_0^{t_1} \psi(e^{-\gamma r} (z_1 + e^{-\gamma(t_2-t_1)} z_2)) dr + \right. \\
&\quad \left. + i e^{-\gamma t_1} \langle z_1 + e^{-\gamma(t_2-t_1)} z_2, s \rangle \right\},
\end{aligned}$$

kde ψ je dána vztahem (2.25), přičemž $d = 2$.

Poté položíme $z_1 = (u, 0)$, $z_2 = (0, v)$, $s = (s_1, s_2)$ a tedy

$$\begin{aligned}
p(u, v) &= \exp \left\{ \gamma \int_0^{t_2-t_1} \psi(e^{-\gamma r} (0, v)) dr + \right. \\
&\quad \left. + \gamma \int_0^{t_1} \psi(e^{-\gamma r} (u, e^{-\gamma(t_2-t_1)} v)) dr + i e^{-\gamma t_1} (us_1 + e^{-\gamma(t_2-t_1)} vs_2) \right\}.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Pro výpočet momentů použijeme vztahy

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}X_1(t_1) &= \frac{\partial p(u, 0)}{\partial u} \Big|_{u=0} \quad \text{a} \quad \mathbb{E}X_2(t_2) = \frac{\partial p(0, v)}{\partial v} \Big|_{v=0} \\
\mathbb{E}X_1(t_1)X_2(t_2) &= - \frac{\partial^2 p(u, v)}{\partial u \partial v} \Big|_{u=v=0}
\end{aligned}$$

Dosazením do (3.13) zjistíme, že $p(0, 0) = 1$. Vypočteme-li momenty pomocí parciálních derivací, dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p(u, v)}{\partial u \partial v} \Big|_{u=v=0} &= - \left\{ \left[a_1 + \int_{\mathbb{R}^2} x_1 (1 - \mathbf{1}_{\|x\| \leq 1}) \mu(dx) \right] (1 - e^{-\gamma t_1}) + e^{-\gamma t_1} s_1 \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ \left[a_2 + \int_{\mathbb{R}^2} x_2 (1 - \mathbf{1}_{\|x\| \leq 1}) \mu(dx) \right] (1 - e^{-\gamma t_2}) + e^{-\gamma t_2} s_2 \right\} + \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} x_1 x_2 \mu(dx) \left[e^{-\gamma(t_1+t_2)} - e^{-\gamma(t_2-t_1)} \right] \\ \frac{\partial p(u, 0)}{\partial u} \Big|_{u=0} &= i \left\{ \left(a_1 + \int_{\mathbb{R}^2} x_1 (1 - \mathbf{1}_{\|x\| \leq 1}) \mu(dx) \right) (1 - e^{-\gamma t_1}) + e^{-\gamma t_1} s_1 \right\} \\ \frac{\partial p(0, v)}{\partial v} \Big|_{v=0} &= i \left\{ \left(a_2 + \int_{\mathbb{R}^2} x_2 (1 - \mathbf{1}_{\|x\| \leq 1}) \mu(dx) \right) (1 - e^{-\gamma t_2}) + e^{-\gamma t_2} s_2 \right\} \end{aligned}$$

Dosazením do (3.9) získáme požadovanou křížovou párovou korelační funkci ve tvaru (3.12). \square

Příklad 3.2 Uvažme dvourozměrný složený Poissonův proces (viz definice 2.62), ve kterém složky skoků jsou rovny 0,1 s pravděpodobností 0,5 a rovny 1 s pravděpodobností 0,5. Obě složky skočí ve stejný časový okamžik s intenzitou $\lambda > 0$. Lévyho kopule je zde rovna právě λ -násobku kopule dvourozměrného rozdělení velikosti skoků. Pro $\lambda = 1$ a kopule $C(u, v) = uv$ (nezávislost) resp. $C(u, v) = \min(u, v)$ (horní Frechetova hranice) resp. $C(u, v) = (u+v-1)_+$ (dolní Frechetova hranice) jsou hodnoty I_{12} v (3.12) rovny 0,3025 resp. 0,5005 resp. 0,1.

3.2 Nelineární filtrování OUCP

Problém filtrování spočívá v odhadnutí náhodné intenzity při daném pozorování výsledného bodového procesu do času T . Problém nelineálního filtrování v dvojně stochastických bodových procesech studovala řada autorů, např. [41], [17], [21]. Výsledky získali řešením stochastických diferenciálních rovnic, které v praxi vedou na obtížný numerický problém. V [11] je uveden pro řešení problému filtrování Bayesovský přístup kombinovaný s MCMC (pro časoprostorové log-normální Coxovy procesy), ve kterém se využije markovská vlastnost procesu X a znalost přechodového rozdělení. Navíc filtrování a přechody společně umožňují řešit problém predikce. V případě časového OUCP na \mathbb{R}^d , kde základní řídící proces tvoří složený Poissonův proces, diskutujeme dva přístupy – tento a alternativní MCMC přístup založený na teorii konečných bodových procesů.

Necht' $X(t), t \geq 0$ je libovolný d -rozměrný řídící proces, přičemž pro všechna t platí

$$\mathbb{E}(|X(t)|^2) < \infty.$$

Necht' $N(t) = (N_1(t), \dots, N_d(t))$ jsou počty Coxova procesu $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_d)$ řízeného procesem X , kde

$$N_j(t) = \Phi_j([0, t]), \quad t \geq 0, \quad 1 \leq j \leq d,$$

tj. $N_j(t)$ je počet bodů Coxova procesu Φ_j v intervalu $[0, t]$.

Podmíněnou střední hodnotu procesu $X(t)$ při daných $N(s), 0 \leq s \leq t$ označíme

$$\hat{X}(t) = \mathbb{E}[X(t)|N(s), 0 \leq s \leq t]. \quad (3.14)$$

Úloha nelineárního filtrování spočívá v nalezení odhadu funkce $X(t)$, který minimalizuje střední kvadratickou chybu $\mathbb{E}[|X(t) - X^*(t)|^2]$ při daném $\{N(s), 0 \leq s \leq t\}$. Řešením je právě $\hat{X}(t)$.

V dalším textu budeme uvažovat problém filtrování pro Φ_{OU} s (neznámým) řídícím procesem X , je-li dané pozorování do času T .

3.2.1 Bayesovský přístup s diskretizací

Pro řešení úlohy nelineárního filtrování a následně predikce lze užít přímý Bayesův přístup (viz [11]). Při implementaci tohoto přístupu nejprve provedeme diskretizaci procesu následovně. Nechť $\Delta > 0$, $T = l\Delta$, kde $l \in \mathbb{N}$, a $t_j = j\Delta$, $j = 0, 1, \dots, l$, jsou časy v intervalu $[0, T]$. Dále označme hodnoty procesu $X^{(j)} = X(t_j)$ odpovídající vektorům řídících intenzit a $N^{(j)} = N(t_j) - N(t_{j-1})$ d -rozměrné vektory počtu bodů procesu Φ v intervalu $(t_{j-1}, t_j]$, $j = 1, \dots, l$.

Tvrzení 3.1 Necht' X je markovský proces a necht' sdružené podmíněné rozdělení $(X^{(1)}, \dots, X^{(l)})$ při daných $(N^{(1)}, \dots, N^{(l)})$ má hustotu $f(x_1, \dots, x_l | n_1, \dots, n_l)$. Potom pro $x_j \in \mathbb{R}_+^d$ a pro vektory přirozených čísel n_j platí

$$\begin{aligned} f(x_1, \dots, x_l | n_1, \dots, n_l) &\propto f(n_1, \dots, n_l | x_1, \dots, x_l) f(x_1, \dots, x_l) \approx \\ &\approx \prod_{j=1}^l f(n_j | x_j) \prod_{j=1}^l f(x_j | x_{j-1}), \end{aligned} \quad (3.15)$$

kde \approx znamená asymptotickou rovnost pro $\Delta \rightarrow 0$ ($l \rightarrow \infty$) na intervalu $[0, T]$ a kde $f(x_j | x_{j-1})$ je hustota přechodu procesu $X(t)$ a pro $x_j = (x_{j1}, \dots, x_{jd})$, $n_j = (n_{j1}, \dots, n_{jd})$, $j = 1, \dots, l$ máme

$$f(n_j | x_j) = \prod_{m=1}^d \frac{(x_{jm}\Delta)^{n_{jm}}}{n_{jm}!} e^{-x_{jm}\Delta}. \quad (3.16)$$

Důkaz: Vztah (3.15) plyne z Bayesovy věty, dále ze skutečnosti, že $N^{(j)}$ jsou pozorovány v disjuktních intervalech, a z markovské vlastnosti procesu X . Potom užitím definice 2.33 (vícerozměrného Coxova procesu) získáme vztah (3.16). \square

Nyní vyčíslíme hustotu přechodu procesu X definovaného v (3.2). V bayesovském přístupu pracujeme s $f(x_j | x_{j-1})$, které získáme z $M_\Delta(x_{j-1}, x_j)$. Předpokládejme pro zbytek této podkapitoly, že $d = 1$ a BDLP Z je složený Poissonův proces s intenzitou α . Označme $c = e^{-\alpha\Delta}$, $b = e^{-\gamma\Delta}$. Následující lemma vyjadřuje hustotu přechodu $f(x_j | x_{j-1})$ jako směs hustot, které odpovídají situacím, kdy v intervalu $(t_{j-1}, t_j]$ je zaznamenán 0, 1 nebo více než 1 skok procesu Z .

Lemma 3.2 Pro $j = 1, \dots, l$ platí

$$\begin{aligned} f(x_j | x_{j-1}) &= c\delta_{(bx_{j-1})}(x_j) + c\alpha\Delta f_G(x_j - bx_{j-1}) + \\ &\quad + (1 - c(1 + \alpha\Delta))f_1(x_j - bx_{j-1}), \end{aligned} \quad (3.17)$$

kde δ je degenerované rozdělení, f_G je pravděpodobnostní hustota a f_1 je spojitá pravděpodobnostní hustota.

Důkaz: Váhy ve vztahu (3.17) plynou z Poissonova rozdělení s parametrem $(\alpha\Delta)$. Hustota f_1 je spojitá konvoluce hustot dvou a více nezávislých skoků. \square

Formule (3.17) má následující interpretaci: je-li počet skoků procesu X v daném intervalu 0, potom je tam chování X deterministické, čemuž odpovídá degenerovaná složka $\delta_{bx_{j-1}}$. Pro právě jeden skok má přechodové rozdělení hustotu (f_G), která sice není spojitá, ale lze ji analyticky vyjádřit. Případ dvou či více skoků shrnujeme do třetího členu (f_1), kde je hustota spojitá a omezená.

Příklad 3.3 Gamma OU proces $X(t)$ vznikne, když $Z(t)$ je složený Poissonův proces s intenzitou $\alpha > 0$ a rozdělení skoků je exponenciální s pravděpodobnostní hustotou

$$h(y) = \tau e^{-\tau y}, \quad y > 0$$

a parametrem $\tau > 0$.

Ve vztahu (3.10) máme $\psi(u) = \frac{iu\alpha}{\tau - iu}$ a jestliže je x parametr polohy, můžeme položit $x = 0$, abychom poté získali následující výsledek

$$M_{\Delta}(0, z) = \left(b + (1-b) \frac{\tau}{\tau - iz} \right)^{\alpha} = b^{\alpha} + \alpha b^{\alpha-1} (1-b) \frac{\tau}{\tau - iz} + R(z).$$

Zde můžeme vidět, že f_G odpovídá exponenciálnímu rozdělení a $R(z)$ může být invertováno pomocí rychlé Fourierovy transformace (FFT z angl. Fast Fourier Transformation).

Příklad 3.4 Necht' BDLP $Z(t)$ je Poissonův proces s intenzitou $\alpha > 0$, pro který máme charakteristickou funkci přechodu

$$M_{\Delta}(x, z) = \exp \left[ibxz + \frac{\alpha}{\gamma} \int_b^1 \frac{e^{iyz} - 1}{y} dy \right]. \quad (3.18)$$

Necht' jsou dány jednoduché skoky rovnoměrně rozdělené v čase $t \in (0, \Delta)$ a necht' máme distribuční funkci jejich příspěvku x v čase Δ rovnu pravděpodobnosti $\mathbb{P} \left(t \leq \frac{1}{\gamma} \log \frac{x}{b} \right)$. Tedy v (3.17) dostáváme

$$\begin{aligned} f_G(y) &= \frac{1}{\Delta y \gamma}, & b < y < 1, \\ &= 0 & \text{jinak} \end{aligned}$$

a z (3.18)

$$f_1(x) = \frac{1}{\pi} \left\{ \int_0^\infty \operatorname{Re} F_1(u) \cos(ux) du + \int_0^\infty \operatorname{Im} F_1(u) \sin(ux) du \right\},$$

kde

$$\begin{aligned} F_1(u) &= \frac{a}{1-2a} \left[\exp \left(\frac{\alpha}{\gamma} y_u \right) \cos \left(\frac{\alpha}{\gamma} z_u \right) - 1 - \frac{y_u}{\gamma \Delta} + \right. \\ &\quad \left. + i \left\{ \exp \left(\frac{\alpha}{\gamma} y_u \right) \sin \left(\frac{\alpha}{\gamma} z_u \right) - \frac{z_u}{\gamma \Delta} \right\} \right] \end{aligned}$$

je Hermitovský symetrická funkce a

$$\begin{aligned} y_u &= \int_b^1 \frac{\cos(ux)}{x} dx = \int_{ub}^u \frac{\cos(x)}{x} dx, \\ z_u &= \int_b^1 \frac{\sin(ux)}{x} dx = \int_{ub}^u \frac{\sin(x)}{x} dx. \end{aligned}$$

Tedy hledaná hustota f_1 tvoří reálnou část výstupu z FFT.

Aplikace MCMC

Na základě simulované realizace Coxova procesu Φ_{OU} s řídící intenzitou $X(t)$ chceme provést filtrování, tj. vypočítat podmíněnou střední hodnotu (3.14). Aproximujeme ji střední hodnotou z podmíněného rozdělení (3.15), které simulujeme Metropolis-Hastingsovým algoritmem rození a zániku (algoritmus 2.1). V našem případě postupně generujeme markovský řetězec $\{x_j^{(l)}\}_{l=0}^{\infty}$, který má hledané rozdělení (3.15) jako stacionární. Tedy řetězec pro x_m má limitní rozdělení s marginální hustotou $f(x_1, \dots, x_m | n_1, \dots, n_m)$. V každém kroku se generuje návrh ϕ z daného návrhového rozdělení. Návrh je potom přijat s pravděpodobností

$$\alpha(x_j, \phi) = \min(1, h(x_j, \phi)),$$

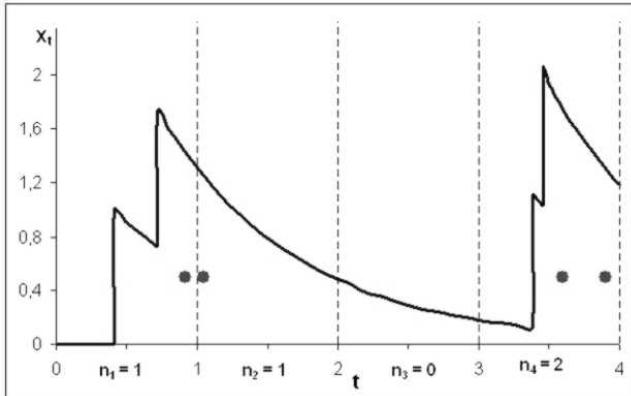
kde $h(x_j, \phi)$ je Hastingsův poměr (rození resp. zániku). Protože za návrhové rozdělení byla zvolena gaussovská náhodná procházka, tedy symetrické rozdělení, tak lze návrhovou hustotu z Hastingsova poměru zkrátit. Dále uvažme, že x_j se projeví v součinech ve vztahu (3.15) jen ve členech $f(n_j | x_j)$, $f(x_j | x_{j-1})$ a $f(x_{j+1} | x_j)$. Po úpravě lze tedy Hastingsův poměr zjednodušit pro $j = 1, \dots, k-1$ na

$$h(x_j, \phi) = \frac{f(n_j | \phi) f(\phi | x_{j-1}) f(x_{j+1} | \phi)}{f(n_j | x_j) f(x_j | x_{j-1}) f(x_{j+1} | x_j)},$$

resp. pro $j = k$ na

$$h(x_k, \phi) = \frac{f(n_k | \phi) f(\phi | x_{k-1})}{f(n_k | x_k) f(x_k | x_{k-1})}.$$

Jak již bylo zmíněno výše, hustota $f(x_j | x_{j-1})$ je váženým součtem tří funkcí, z nichž funkci f_G lze vyjádřit analyticky, degenerovanou hustotu δ jsme approximovali strmou trojúhelníkovou hustotou a funkci f_1 jsme počítali numericky za pomoci FFT.

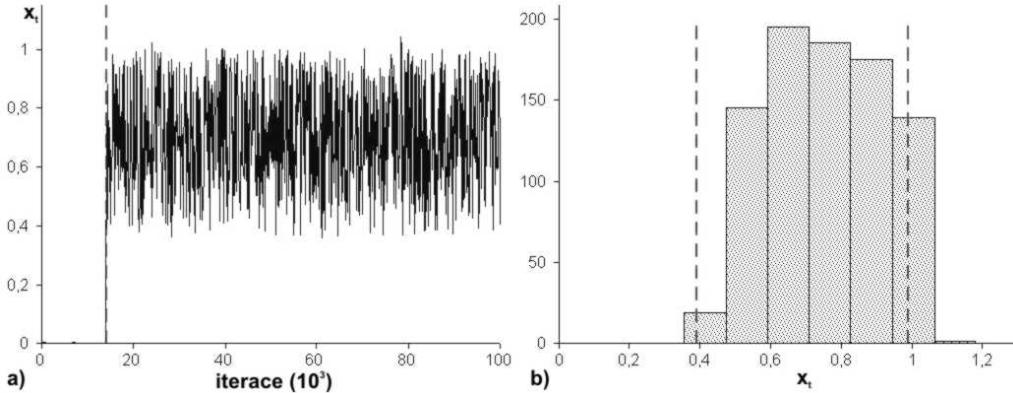


Obr. 3.2: Realizace Coxova procesu (body) s realizací x_t řídícího OU procesu (čára). Parametry procesu jsou $\alpha = 1$, $\gamma = 1$ a $x_0 = 0$, dále $\Delta = 1$.

Příklad 3.5 Vyjdeme z příkladu 3.4, kde demonstraci výpočtu provádíme na základě simulace realizace řídícího procesu $X(t)$ s parametry $\alpha = 1$, $\gamma = 1$ a $x_0 = 0$ a následné realizace Coxova procesu, viz obrázek 3.2. Pro $k = 4$ vstupujeme do výpočtu s četnostmi $n_1 = 1$, $n_2 = 1$, $n_3 = 0$, $n_4 = 2$ na intervalech délky $\Delta = 1$. Pomocí Metropolis-Hastingsova algoritmu jsme potom simulovali hodnoty $\{x_j^{(l)}\}$, $j = 1, \dots, 4$, kde za návrhové rozdělení jsme zvolili gaussovskou náhodnou procházku s nulovou střední hodnotou a jednotkovým rozptylem a počáteční hodnoty $x_0^{(l)}$ i $x_0^{(0)}$ jsme volili nulové.

Abychom odstranili vliv výchozí hodnoty simulace na výpočet aposteriorní střední hodnoty, bylo nutné na základě průběhu simulace určit tzv. čas zapálení řetězce. Pro další výpočty jsme uvažovali jen hodnoty realizací získané ze simulace po tomto bodě. Na obrázku 3.3a) je zobrazen průběh simulace hodnoty x_4 a svislou čarou je zde naznačen čas zapálení řetězce. Histogram těchto hodnot je zachycen na obrázku 3.3b) a je zde rovněž naznačen 95% interval kredibility (interval, který s 95% pravděpodobností obsahuje odhadovaný parametr). Aposteriorní střední hodnoty a 95% intervaly kredibility realizací řetězce pro x_1, x_2, x_3 a x_4 jsou zaznamenány v následující tabulce, ve které můžeme sledovat závislost spočtených hodnot na vstupní situaci (viz obrázek 3.2).

i	apost. stř. hodnota	95% interval
1	0,65854	(0,38;0,98)
2	0,86116	(0,56;1,26)
3	0,00019	(-0,002;0,003)
4	0,70275	(0,39;0,99)



Obr. 3.3: a) Průběh simulace hodnoty x_4 procesu z obrázku 3.2, přičemž svislou čarou je naznačen čas zapálení řetězce. b) Histogram simulovaných hodnot z a) po čase zapálení řetězce, přičemž je zde vyznačen 95% interval kredibility.

3.2.2 Přístup k filtrování ve spojitém čase

Druhý způsob filtrování v Coxových procesech je založen na teorii konečných bodových procesů, viz kapitola 2.3.4. Oproti předchozímu přístupu popsaném v kapitole 3.2.1 se zde neprovádí diskretizace procesu, nýbrž se uvažuje celý proces (v našem případě OUCP) zaznamenaný v intervalu $[0, T]$. Opět se vychází z tvrzení 3.1, které lze využít především, pokud se intenzita procesu mění pomalu vzhledem k velikosti intervalu. Při tomto přístupu je opět použita lokálně stabilní verze Metropolis-Hastingsova algoritmu rození a zániku (algoritmus 2.1).

Uvažme $d = 1$ a označme Π rozdělení Poissonova bodového procesu na Borelovské množině $W \subset \mathbb{R}_+$ s mírou intenzity ν , $0 < \nu(W) < \infty$. Nechť $W = [0, T]$ je interval a Z je složený Poissonův proces s intenzitou α a hustotou rozdělení skoků h . Symbolem x budeme značit realizaci procesu $X(t)$ na $[0, T]$, která je ve smyslu vztahu (3.3) popsána pomocí x_0 a $\{\mathbf{t}, \mathbf{z}\} = \{t_j, z_j\}$, $j = 1, \dots, n$, $t_n \leq T$, $t_{n+1} > T$. Označme realizaci Φ_{OU} na W symbolem $\phi = \{\tau_j\}$, $j = 1, \dots, m$. Filtrování opět založíme na Bayesovské formuli pro hustoty bodového procesu, tj.

$$f(x | \phi) \propto f(\phi | x) f(x), \quad (3.19)$$

kde na pravé straně máme součin hustoty nehomogenního Poissonova procesu (nebo také Coxova procesu s danou intenzitou) a nepodmíněnou hustotou složeného Poissonova procesu $Z = \{\mathbf{t}, \mathbf{z}\}$.

Věta 3.3 Nechť x_0 je pevně dáno. Potom pro složený Poissonův proces s intenzitou α a hustotou rozdělení velikosti skoků h s konečnými m -tými momenty platí, že $f(x|\phi) \propto$

$$\propto \alpha^n \prod_{i=1}^n h(z_i) \prod_{j=1}^m x(\tau_j) \exp \left[\frac{x_0}{\gamma} (e^{-\gamma T} - 1) - \sum_{j: \frac{t_j}{\gamma} \leq T} \frac{z_j (1 - e^{t_j - \gamma T})}{\gamma} \right]. \quad (3.20)$$

Lokálně stabilní verze Metropolis-Hastingsova algoritmu rození a zániku (algoritmus 2.1) pro (3.20) má geometricky ergodický řetězec.

Důkaz: Na složený Poissonův proces v intervalu $W = [0, T]$ můžeme nahlížet jako na konečný bodový proces na prostoru $W \times \mathbb{R}_+$ s hustotou

$$f(t, \mathbf{z}) = e^{(1-\alpha)T} \alpha^n \prod_{i=1}^n h(z_i). \quad (3.21)$$

Nehomogenní Poissonův bodový proces ve W s funkcí intenzity $x(t)$ má následující hustotu vzhledem k Π

$$f(\phi|x) = e^T \exp \left(- \int_W x(s) ds \right) \prod_{\tau_i \in \phi} x(\tau_i). \quad (3.22)$$

Protože $a_0 = 0$, tak z (3.3) dostáváme

$$\int_0^T x(s) ds = -\frac{x_0}{\gamma} (e^{-\gamma T} - 1) + \sum_{j: \frac{t_j}{\gamma} \leq T} \frac{z_j (1 - e^{t_j - \gamma T})}{\gamma}$$

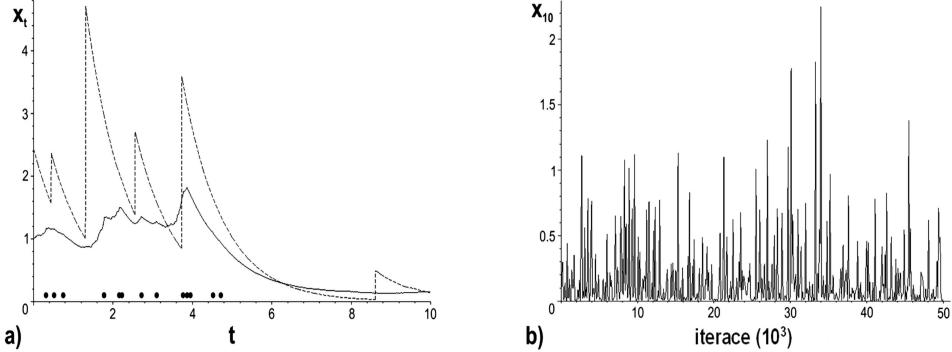
a dohromady s (3.22) a (3.21) získáme (3.20).

Protože $X(t) \geq x_0 e^{-\gamma t}$, můžeme ověřit lokální stabilitu hustoty $f(x|\phi)$. Platí

$$\begin{aligned} & \frac{f((\{\mathbf{t}, \mathbf{z}\} \cup \{t_{n+1}, z_{n+1}\})|\phi)}{f(\{\mathbf{t}, \mathbf{z}\}|\phi)} \leq \\ & \leq \alpha \nu \exp \left[-z_{n+1} \left(\nu + \frac{1 - e^{t_{n+1} - \gamma T}}{\gamma} \right) \right] \left(1 + \frac{z_{n+1}}{x_0} e^{\gamma T} \right)^m = \Phi^*(t_{n+1}, z_{n+1}). \end{aligned}$$

Protože platí

$$c^* = \int_0^T \int_{\mathbb{R}} \Phi^*(t, z) p(z) dz dt < \infty,$$



Obr. 3.4: a) Realizace Coxova procesu (kroužky) řízeného OU procesem (tečkováná čára realizace) z příkladu 3.6 s parametry $\alpha = \nu = \gamma = 1, T = 10$. Filtrování Coxova procesu užitím přístupu z kapitoly 3.2.2. V každém bodě je vyznačena průměrná hodnota ze všech iterací $X(t)$ při daných $N(s), 0 \leq s \leq T$ (plná čára). b) V grafu je vyznačeno 50 000 iterací Metropolis-Hastingsova algoritmu rození a zániku použitého při filtrování procesu z a) v čase T .

tak můžeme použít lokálně stabilní verzi Metropolis-Hastingsova algoritmu rození a zániku s Metropolis-Hastingsovým poměrem pro rození

$$r_b(\{\mathbf{t}, \mathbf{z}\}, \{t_{n+1}, z_{n+1}\}) = \frac{f((\{\mathbf{t}, \mathbf{z}\} \cup \{t_{n+1}, z_{n+1}\} | \phi)(1 - q)c^*)}{f(\{\mathbf{t}, \mathbf{z}\} | \phi)\Phi^*q(n + 1)},$$

kde $0 < q < 1$ a z tvrzení 2.3 vyplývá, že řetězec je geometricky ergodický. \square

Poznamenejme, že geometrická ergodicita zajišťuje platnost centrální limitní věty pro řetězec MCMC [31].

Příklad 3.6 Pro Gamma OU proces z příkladu 3.3 dostáváme vyjádření vztahu (3.20) ve tvaru

$$\begin{aligned} f(x | \phi) &\propto (\alpha\nu)^n \exp\left(-\nu \sum_{j=1}^n z_j\right) \prod_{j=1}^m x(\tau_j) \times \\ &\times \exp\left(\frac{x_0}{\gamma} (e^{-\gamma T} - 1) - \sum_{j: \frac{t_j}{\gamma} \leq T} \frac{z_j (1 - e^{t_j - \gamma T})}{\gamma}\right). \end{aligned}$$

Jednotlivé iterace MCMC dávají řetězec $\{\mathbf{t}, \mathbf{z}\}$, jehož rozdělení se blíží k podmíněnému rozdělení (3.20). Můžeme tedy odhadnout hodnotu

$\mathbb{E}[X(t) \mid N(s), 0 \leq s \leq T]$ pro všechna $t \in [0; T]$ zprůměrováním hodnot $X(t)$ v (3.3) získaných z řetězce. Plná čára v grafu na obrázku 3.4a) zobrazuje průměrnou hodnotu X_t . Požadovaná filtrovaná hodnota $\hat{X}(T)$, viz (3.14), je hodnota této křivky v pravém koncovém bodě. Křivka na obrázku 3.4b) zachycuje průběh iterací v úloze filtrování v čase T .

Odhad parametrů OUCP

V této části budeme odhadovat vektor parametrů θ OUCP užitím MCMC řetězce z této kapitoly. K odhadu použijeme metodu maximální věrohodnosti, která zahrnuje techniku důležitosti vzorkování a chybějících pozorování z [31], kap. 8. Konkrétně použijeme approximace Newton-Raphsonovy metody

$$\theta^{(r+1)} = \theta^{(r)} + u_{\theta_0, l, \phi}(\theta^{(r)}) j_{\theta_0, l, \phi}(\theta^{(r)})^{-1}, \quad r = 0, 1, \dots \quad (3.23)$$

kde $\phi = \{\tau_j\}$ jsou vstupní data (realizace OUCP v pozorovacím okně W), $\theta_0 = \theta^{(0)}$ je pevná výchozí hodnota parametru a $u_{\theta_0, l, \phi}, j_{\theta_0, l, \phi}$ jsou approximace následujících funkcí

$$\begin{aligned} u(\theta) &= \mathbb{E}_\theta[V_{\theta, \phi}(X)|\Phi = \phi], \\ j(\theta) &= -\mathbb{E}_\theta[dV_{\theta, \phi}(X)/d\theta^T|\Phi = \phi] - \text{Var}_\theta[V_{\theta, \phi}(X)|\Phi = \phi], \end{aligned}$$

kde θ^T značí transpozici vektoru, $V_{\theta, \phi}(x) = d \log f_\theta(\phi, x) / d\theta$, kde $f_\theta(\phi, x)$ je pravá strana v (3.19). Symbolem $X^{(j)}$ označíme MCMC řetězec délky l z věty 3.3, který používá parametr θ_0 , potom approximace mají následující tvar

$$\begin{aligned} u_{\theta_0, l, \phi} &= \sum_{j=0}^{l-1} V_{\theta, \phi}(X^{(j)}) w_{\theta_0, l, \phi}(X^{(j)}), \\ j_{\theta_0, l, \phi} &= -\sum_{j=0}^{l-1} [(dV_{\theta, \phi}(X^{(j)})/d\theta') + V_{\theta, \phi}(X^{(j)})' V_{\theta, \phi}(X^{(j)})] w_{\theta_0, l, \phi}(X^{(j)}), \end{aligned}$$

kde váhy jsou

$$w_{\theta_0, l, \phi}(X^{(j)}) = \frac{f_\theta(\phi, X^{(j)})/f_{\theta_0}(\phi, X^{(j)})}{\sum_{i=0}^{l-1} f_\theta(\phi, X^{(i)})/f_{\theta_0}(\phi, X^{(i)})}.$$

Poznamenejme, že popsaná metoda funguje dobře, pokud θ_0 není příliš vzdálena od skutečné hodnoty θ .

Příklad 3.7 Uvažujme Gamma OU proces z příkladu 3.3, kde x_0 má gamma rozdělení a parametry α, τ, γ jsou neznámé. Označme Γ gamma funkci. Sdružená hustota

$$\begin{aligned} f_\theta(\phi, x) &= e^{(2-\alpha)T} (\alpha\tau)^n \exp\left(-\tau \sum_{j=1}^n z_j\right) \frac{\tau^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x_0^{\alpha-1} e^{-\tau x_0} \times \\ &\quad \times \exp\left(\frac{x_0}{\gamma} (e^{-\gamma T} - 1) - \sum_{j: \frac{t_j}{\gamma} \leq T} \frac{z_j (1 - e^{t_j - \gamma T})}{\gamma}\right) \prod_{j=1}^m x(\tau_j) \end{aligned}$$

je nespojitá v γ , zejména díky výrazům $x(\tau_j)$. Proto jsme zvolili postup ve dvou krocích, nejprve použijeme approximaci maximálně věrohodného odhadu pro $\theta = (\alpha, \tau)$ a log-věrohodnost $L(\theta) = \log f_\theta(\psi, x)$. A následně spočteme

$$V_{\theta, \psi} = \left(-T + \frac{n}{\alpha} + \log(\tau x_0) - \frac{d\Gamma(\alpha)}{d\alpha}, \frac{n}{\tau} - \sum_j z_j + \frac{\alpha}{\tau} - x_0 \right)$$

nezávisle na ϕ . K optimalizaci vzhledem ke všem třem parametrům opakovaně použijeme vztah (3.23) pro vybrané hodnoty γ_i , přičemž každá odpovídá jednotlivému oddělenému MCMC řetězci $X_i^{(j)}$, a potom mezi nimi vybereme optimální množinu parametrů, která bude přibližně maximálně věrohodnou hodnotou

$$\sum_{j=0}^{l-1} f_\theta(\psi, X_i^{(j)}) w_{\theta_0, l, \psi}(X_i^{(j)}).$$

Kapitola 4

Vícerozměrné dvouvýběrové testy založené na \mathfrak{N} -vzdálenosti

V této kapitole předpokládáme, že \mathcal{L} je silně negativně definitní jádro na $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ a že \mathcal{L} splňuje vlastnosti uvedené v (2.28).

Nechť x_1, \dots, x_n je náhodný výběr ze spojitého rozdělení odpovídajícího náhodnému vektoru X v \mathbb{R}^d se sdruženou distribuční funkcí F_X a nechť y_1, \dots, y_n je na něm nezávislý náhodný výběr ze spojitého rozdělení odpovídajícího náhodnému vektoru Y v \mathbb{R}^d se sdruženou distribuční funkcí F_Y . Vícerozměrným dvouvýběrovým testem testujeme nulovou hypotézu

$$H_0 : F_X = F_Y \quad (4.1)$$

proti alternativě

$$H_1 : F_X \neq F_Y. \quad (4.2)$$

Nulovou hypotézu (4.1) můžeme rovněž zapsat jako $H_0 : X \stackrel{d}{=} Y$ a alternativní hypotézu (4.2) jako $H_1 : X \neq Y$.

V praktických aplikacích je zajímavá zejména situace, kdy rozměr dat d je velký a počet pozorování n malý. Ve studiu genových mikrořad (viz [24]) je hodnota d v řádu desetitisíc a přitom složky vektorů X, Y mohou být závislé. V tom případě některé známé dvouvýběrové testy postrádají sílu. V [4] jsou prezentovány výsledky srovnání známých testů v simulační studii.

4.1 Zavedení testů

V následujícím textu uvedeme dva dvouvýběrové testy (viz [23]), které jsou založeny na \mathfrak{N} -vzdálenosti definované v kapitole 2.7. V prvním testu převádíme vícerozměrný dvouvýběrový test na jednorozměrný dvouvýběrový test. V druhém testu využíváme permutací dostupných pozorování z obou vzorků, a proto je tento test vhodný pro testování hypotézy (4.1) i v případě malého počtu pozorování (např. $n = 20$).

Předpokládejme, že X, Y jsou dva nezávislé náhodné vektory v \mathbb{R}^d . Uvažme navzájem nezávislé vektory X, X', X'', Y, Y', Y'' takové, že $X \stackrel{d}{=} X' \stackrel{d}{=} X''$ a $Y \stackrel{d}{=} Y' \stackrel{d}{=} Y''$.

Definujme dvě nezávislé náhodné veličiny

$$U = \mathcal{L}(X, Y) - \mathcal{L}(X, X') \quad (4.3)$$

$$V = \mathcal{L}(Y', Y'') - \mathcal{L}(X'', Y''). \quad (4.4)$$

Jestliže je navíc splněno, že

$$\mathbb{E}\mathcal{L}(X, X') < \infty, \mathbb{E}\mathcal{L}(Y, Y') < \infty,$$

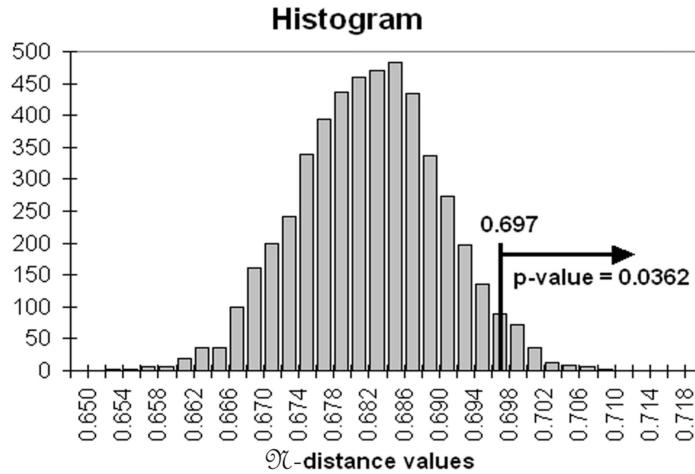
potom platí (viz [23])

$$X \stackrel{d}{=} Y \iff U \stackrel{d}{=} V.$$

Tedy vícerozměrný dvouvýběrový test s nulovou hypotézu $H_0 : X \stackrel{d}{=} Y$ můžeme takto převést na jednorozměrný dvouvýběrový test s nulovou hypotézu $H'_0 : U \stackrel{d}{=} V$. Pro testování této hypotézy zvolíme jednorozměrný dvouvýběrový test např. známý Kolmogorov-Smirnovův test (viz např. [1]).

Vlastní test provádíme následovně. Předpokládejme, že máme n nezávislých d -rozměrných pozorování x_1, \dots, x_n z X resp. y_1, \dots, y_n z Y . Dále předpokládejme, že $l = n/3$ je přirozené číslo. Potom můžeme rozdělit pozorování z jedné populace na 3 části, všechny o velikosti l . Takto získáme nezávislé soubory pozorování, které odpovídají výše zmíněným nezávislým náhodným vektorům X, X', X'' resp. Y, Y', Y'' , a můžeme spočítat hodnoty u_1, \dots, u_l resp. v_1, \dots, v_l odpovídající náhodné veličině U resp. V . Nakonec provedeme test nulové hypotézy H'_0 .

Minimální počet vstupních pozorování je závislý na požadavcích použitého jednorozměrného testu. Například doporučený minimální počet pozorování pro jednorozměrný dvouvýběrový Kolmogorov-Smirnovův test



Obr. 4.1: Histogram \mathfrak{N} -vzdáleností z 5000 náhodných permutací (parametry $m = 1, k = 500, n = 20$). Hodnota 0,697 odpovídá nepermutovanému případu a p -hodnota je pravděpodobnost, že \mathfrak{N} -vzdálenost je větší než tato hodnota.

je 36 (viz [1]) a tedy pro aplikaci výše zmíněného testu bychom potřebovali $n \geq 3 \cdot 36$.

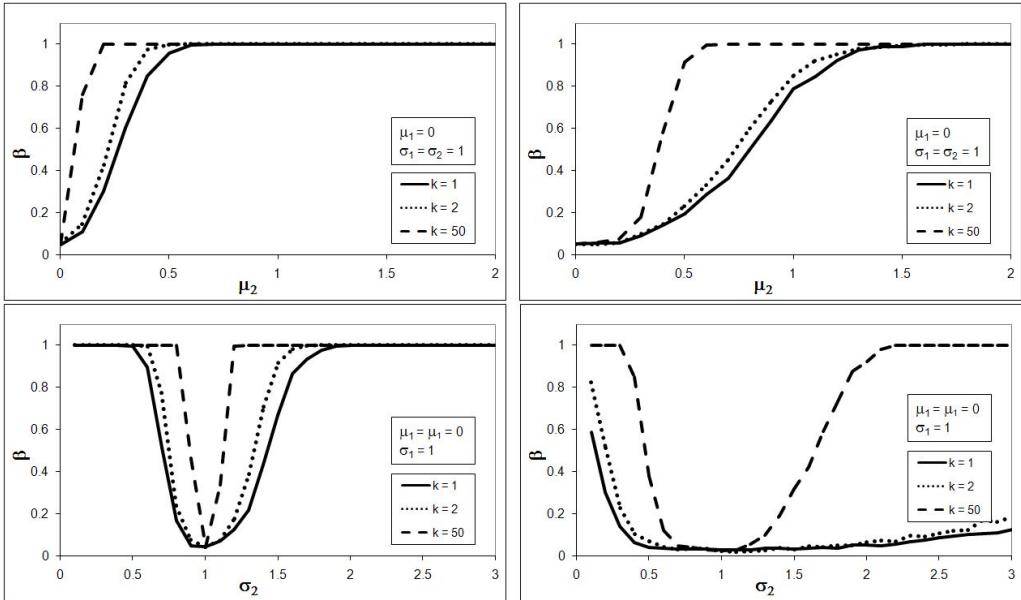
Nyní se budeme věnovat permutačnímu testu, který lze použít v případě malého počtu pozorování pro testování nulové hypotézy o shodnosti rozdělení náhodných vektorů X a Y , tj. (4.1), proti alternativě (4.2). Uvažme K náhodných permutací vektorů $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n, \tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_n$. Každou permutovanou množinu rozdělíme na prvních n a druhých n vektorů a vypočteme empirickou \mathfrak{N} -vzdálenost

$$\widehat{\mathfrak{N}} = \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (2\mathcal{L}(x_i, y_j) - \mathcal{L}(x_i, x_j) - \mathcal{L}(y_i, y_j)) \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Tím získáme $K + 1$ empirických \mathfrak{N} -vzdáleností, přičemž jedna je spočtená z vektorů původních dat (označme ji $\widehat{\mathfrak{N}}_0$) a K z permutovaných vektorů. Za platnosti nulové hypotézy permutace nemění rozdělení náhodné veličiny $\widehat{\mathfrak{N}}$. Z histogramu těchto vzdáleností získáme p -hodnotu testu, jejíž hodnota je rovna pravděpodobnosti (za platnosti nulové hypotézy), že \mathfrak{N} je větší než hodnota $\widehat{\mathfrak{N}}_0$. Tedy p -hodnotu odhadneme jako

$$\hat{p}\text{-hodnota} = \frac{\sum_{i=1}^K \mathbf{1}_{[\widehat{\mathfrak{N}}_i > \widehat{\mathfrak{N}}_0]}}{K}$$

Příklad testu je zobrazen na obrázku 4.1, kde v případě 5% hladiny testu



Obr. 4.2: Silofunkce β permutačního testu (levý sloupec) resp. testu založeného na U, V statistikách (pravý sloupec) na hladině testu 0,05 s alternativou polohy (horní řádek) resp. měřítka (dolní řádek). V testu porovnáváme dva výběry ($a = 1, 2$) o velikosti 120 z k -rozměrných normálních rozdělení $N(\tilde{\mu}_a, \Sigma_a)$ s $\tilde{\mu}_a = (\mu_a, \dots, \mu_a)$ a $\Sigma_a = (\Sigma_{ij}^a)$, kde $\Sigma_{ii}^a = \sigma_a$ a $\Sigma_{ij}^a = 0$ pro $i \neq j$. Hodnoty parametrů k , μ_a a σ_a jsou uvedeny u grafů.

zamítáme H_0 proti alternativě H_1 , protože odhadnutá p -hodnota je menší než 0,05.

4.2 Síla testu

Nyní se budeme zabývat silou obou dvouvýběrových testů, která kvantifikuje pravděpodobnost správného zamítnutí H_0 (4.1). Analytický výpočet silofunkce není možný. Některé výsledky simulací jsou uvedeny v [23], kap. 8.1, pro test založený na U, V veličinách, resp. kap. 9.4, pro permutační test. Z prezentovaných výsledků vyplývá, že oba testy jsou vhodné při alternativě polohy a permutační test má obecně větší sílu, než test založený na U, V veličinách.

Obsáhlější studie [4] se zabývá srovnáním testů Kolmogorov-Smirnovův (K-S), Cramer-von-Mises (C-v-M), Anderson-Darling a (jiných) testů založených na empirických rozděleních.

žených na \mathfrak{N} -vzdálenosti. Výsledky pro alternativu polohy jsou opět lepší při použití testů založených na \mathfrak{N} -vzdálenosti. Zajímavé je rovněž použití různých silně negativně definitních jader \mathcal{L} a jejich srovnání, čímž lze ovlivnit sílu testu v různých alternativách.

Uvedené studie nepokrývají zcela námi studované varianty testu, protože jsou omezeny na nejvíce dvourozměrné rozdělení, a proto jsme provedli vlastní simulační studii věnovanou srovnání permutačního testu a testu založeného na U, V statistikách.

Při testování nulové hypotézy (4.1) se zaměříme na alternativy (i) polohy, tj. $\mu_1 \neq \mu_2$, a (ii) měřítka, tj. $\sigma_1 \neq \sigma_2$, kde veličiny s indexem 1 resp. 2 odpovídají prvnímu resp. druhému výběru z porovnávaných rozdělení.

Numerické výsledky vycházejí z normálního rozdělení $N(\mu, \sigma^2)$ a k -rozměrného normálního rozdělení ($k = 2$ a $k = 50$) s vektorem středních hodnot (μ, \dots, μ) a varianční maticí $\Sigma = (\Sigma_{ij})$, kde $\Sigma_{ii} = \sigma^2$, $\Sigma_{ij} = 0$ pro $i \neq j$ a $\sigma^2 > 0$. Mějme dva nezávislé výběry o velikosti 120 s parametry (μ_1, σ_1) a (μ_2, σ_2) , každý test byl opakován 1000krát a v případě permutačního testu bylo provedeno vždy 100 permutací. Odhad silofunkce β je dán vztahem

$$\beta = \frac{\sum_{l=1}^{1000} \mathbf{1}_{[p_l \leq 0.05]}}{1000},$$

kde p_l je p -hodnota získaná z l -tého opakování testu. V horním řádku na obrázku 4.2 je uvedena síla testu s alternativou polohy, tedy $\mu_1 = 0$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ a hodnoty μ_2 jsou na ose x . A v dolním řádku na témaže obrázku je síla testu s alternativou měřítka, tedy $\mu_1 = \mu_2 = 0$, $\sigma_1 = 1$ a hodnoty σ_2 jsou na ose x . Výsledky pro permutační test jsou uvedeny v levém sloupci a výsledky pro test založený na U, V veličinách jsou v pravém sloupci.

Síla testu založeného na U, V veličinách je mnohem větší v případě alternativy (i) než (ii). Totéž platí v případě permutačního testu, který je navíc silnější ve všech testovaných alternativách oproti testu založeného na U, V veličinách.

4.3 Použití vícerozměrných dvouvýběrových testů pro modely „zárodek-zrno“

Naším hlavním přínosem k problematice kapitoly 4 je originální aplikace ve stochastické geometrii speciálně použitelná v materiálovém výzkumu či biomedicíně při porovnání mikrostruktur. Použití testů nejprve předvedeme na simulacích modelu „zárodek-zrno“ a poté v kapitole 5.1 je aplikujeme na reálná data mikrostruktur hliníkových fólií.

Definice 4.1 Řekneme, že A je model „zárodek-zrno“, jestliže A je náhodná uzavřená množina ve smyslu definice 2.8, pro kterou platí

$$A = \bigcup_{i=1}^{\infty} (a_i + \Theta_i),$$

kde $\{[a_i; \Theta_i]\}$ je kótovaný bodový proces, přičemž a_i jsou body v \mathbb{R}^d (tzv. zárodky) a Θ_i kompaktní podmnožiny \mathbb{R}^d (tzv. zrna).

Předpokládejme, že máme dva nezávislé modely „zárodek-zrno“ A a B v \mathbb{R}^d a v každém z nich n pozorovacích oken. Zrna v jednom pozorovacím okně mohou být obecně závislá. Při analýze modelu „zárodek-zrno“ se nejprve zaměříme na geometrické parametry zrn a poté na prostorové rozmístění zárodků.

4.3.1 Individuální parametry zrn

Zrna charakterizujeme vektorem geometrických parametrů. Tyto parametry můžeme získat v případě reálných struktur v \mathbb{R}^2 pomocí obrazového analyzátoru. Nechť máme změřeno m geometrických parametrů pro k zrn z každého pozorovacího okna. Mezi tyto geometrické parametry patří např. Minkovského funkcionály (kapitola 2.2.1), tvarové faktory nebo orientace zrn, nejčastěji v \mathbb{R}^2 či \mathbb{R}^3 . Získáme tak dva soubory matic velikosti $k \times m$, které označíme $x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n$, přičemž x_i jsou z A a y_i z B . Dále uspořádáme prvky matice x_i resp. y_i tak, abychom vytvořili vektory \tilde{x}_i resp. \tilde{y}_i o velikosti $k \cdot m$ následujícím způsobem

$$\begin{aligned}\tilde{x} &= (x_{1,1}, \dots, x_{k,1}, x_{1,2}, \dots, x_{k,2}, \dots, x_{1,m}, \dots, x_{k,m}), \\ \tilde{y} &= (y_{1,1}, \dots, y_{k,1}, y_{1,2}, \dots, y_{k,2}, \dots, y_{1,m}, \dots, y_{k,m}).\end{aligned}$$

Pro testování nulové hypotézy o shodnosti rozdělení vektorů parametrů zrn oproti alternativě, že vektory parametrů zrn nepocházejí ze stejného rozdělení, tj.

$$H_0 : P_x = P_y,$$

$$H_1 : P_x \neq P_y,$$

můžeme použít jeden z výše popsaných testů.

V případě $m > 1$ je nutné, aby použité parametry nabývaly srovnatelných hodnot, čehož lze rovněž dosáhnout vhodnou volbou měřítka u jednotlivých geometrických parametrů.

4.3.2 Prostorové rozmístění zárodků

Při analýze prostorového rozmístění zárodků budeme postupovat obdobně jako ve výše popsané analýze. K testování rozdílů v prostorovém rozmístění zárodků použijeme m z následujících sumárních statistik bodo-vých procesů

1. distribuční funkci nejbližších sousedů (G),
2. sférickou kontaktní distribuční funkci (F),
3. párovou korelační fuknci (g),

jejichž definice a příslušné odhady jsou uvedeny v kapitole 2.3.

Spočteme odhady výše uvedených statistik pro všech n pozorovacích oken obou modelů A a B . Z odhadnutých křivek sestavíme vektory

$$G_j = G(j\Delta), F_j = F(j\Delta), g_j = g(j\Delta),$$

kde $j = 1, \dots, k$ a $\Delta > 0$ je zvolený krok. Výběrem m z těchto tří charakteristik sestavíme $2n$ vektorů velikosti $k \cdot m$ (stejným postupem jako v kapitole 4.3.1). Poté zvolíme jeden z vícerozměrných dvouvýběrových testů založených na \mathfrak{N} -vzdálenostech, kterým budeme testovat nulovou hypotézu o shodnosti rozdělení prostorových charakteristik oproti alternativě rozdílnosti jejich prostorových charakteristik.

Poznamenejme, že teoreticky lze pracovat s \mathfrak{N} -vzdálenostmi rozdělení funkcí z prostoru L_2 a vyhnout se diskretizaci, ale při praktickém použití testu k ní nakonec vždy dojde. Proto zde prostory L_2 neuvažujeme.

Charakteristiky prostorového rozdělení jsou závislé na intenzitě λ_A resp. λ_B zrn modelu A resp. B , kterou odhadujeme vztahem

$$\widehat{\lambda}_A = \frac{n_A}{\nu_d(W)} \quad \text{resp.} \quad \widehat{\lambda}_B = \frac{n_B}{\nu_d(W)},$$

kde $\nu_d(W)$ je velikost pozorovacího okna a n_A a n_B odpovídají průměrným počtem zrn pozorovaných v jednotlivých pozorovacích oknech W .

Modely s různými intenzitami zrn mají různé tvary funkcí G, F, g . Zaměříme se nyní na tento problém, tj. na vyšetřování rozdílů prostorového rozmístění mezi modely A a B , který nebude ovlivněn jejich různými intenzitami zárodků. V případě, že se n_A a n_B výrazně liší, potom změníme měřítko okna B vynásobením konstantou

$$k_{AB} = \sqrt{\frac{n_B}{n_A}}. \quad (4.5)$$

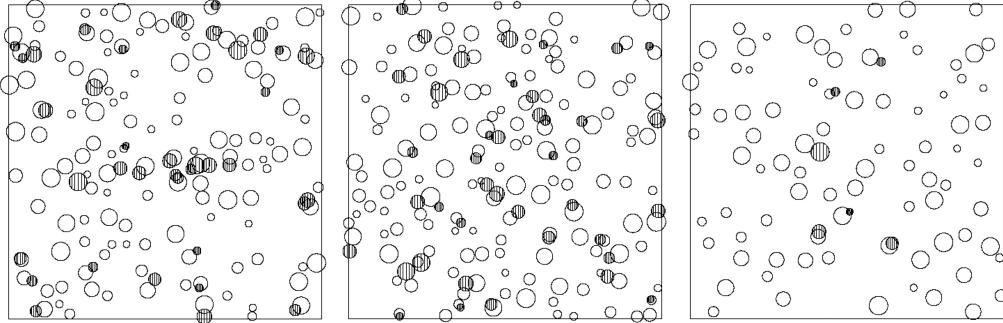
Tato transformace vede k tomu, že model A a změněný model B (označíme jej \tilde{B}) mají stejný odhad intenzity zrn, tj. $\widehat{\lambda}_A = \widehat{\lambda}_{\tilde{B}}$. Potom spočteme odhady funkcí F, G, g pro zárodky v pozorovacích oknech (různých velikostí) modelů A a \tilde{B} a následně testujeme shodnost rozdělení jejich prostorových charakteristik (viz výše).

Posouzení významnosti rozdílu n_A a n_B je možné pouze pro konkrétní modely „zárodek-zrno“, zejména je-li proces zárodků stacionární Poissonův bodový proces. Potom pro hypotézu $\tilde{H}_0 : n_A = n_B$ proti $\tilde{H}_1 : n_A \neq n_B$ máme kritický obor pro klasický test

$$T = \frac{|n_A - n_B|}{\sqrt{n_A + n_B}} > u_{1-\frac{\alpha}{2}},$$

kde α je hladina testu a u_a je a -tý kvantil standardního normálního rozdělení.

V praxi se vyskytuje často proces zárodků s pevným jádrem (viz definice 2.37) daným poloměrem zrn. Zamítáme-li \tilde{H}_0 pro Poissonův proces, zamítá se též pro bodový proces s pevným jádrem, protože v tomto procesu je variabilita počtu bodů v okně nižší než pro Poissonův proces.



Obr. 4.3: Středy kruhů tvoří realizaci Straussova bodového procesu s parametry $\beta = 200$, $r = 0,04$, $\gamma = 0,9$ (vlevo), $\beta = 200$, $r = 0,04$, $\gamma = 0,7$ (uprostřed), $\beta = 200$, $r = 0,06$ a $\gamma = 0,2$ (vpravo), v jednotkovém okně. Plné kruhy jsou odebírány a systém zbylých kruhů (zrn) je analyzován.

4.3.3 Simulační studie

V této simulační studii demonstруjeme použití výše uvedeného dvouvýběrového testu porovnávajícího simulované modely „zárodek-zrno“ s kruhovými neprotínajícími se zrny v \mathbb{R}^2 . V testu jsme použili odhady sumárních statistik (2.17) pro F , (2.18) pro G a (2.16) pro g . Vstupní modely „zárodek-zrno“ jsme založili na Straussově bodovém procesu (definice 2.43) a simulovali jsme je v následujících krocích

1. Simulace Straussových bodových procesů Φ , Ψ , Ξ v jednotkovém okně s parametry $\beta = 200$, $r = 0,04$ a $\gamma = 0,9$ pro Φ , $\beta = 200$, $r = 0,04$ a $\gamma = 0,7$ pro Ψ a $\beta = 200$, $r = 0,06$ a $\gamma = 0,2$ pro Ξ .
2. Přidání kruhů s náhodnými nezávislými rovnoměrně rozdělenými poloměry, tj. $\mathcal{L}(R) = R([0, 01; 0, 03])$, a se středy v bodech procesů Φ , Ψ , Ξ .
3. Postupné odebírání kruhů, které protínají nejvíce dalších kruhů. Kruhy odebíráme, dokud nezískáme neprotínající se systém kruhů.

Poznamenejme, že příslušný proces lze generovat i jiným způsobem např. postupným generováním kruhů, které se přidají k procesu, jen pokud neprotínají již existující kruhy.

Získané výsledky jsou na obrázku 4.3.

Proces	Střední plocha zrn	Celkový počet
Φ	21,89	15 794
Ψ	20,23	14 652
Ξ	12,76	9 267

Tab. 4.1: Střední plocha simulovaných zrn a jejich celkový počet spočtený ze všech 120 oken. Průměr byl vyčíslen ze 100 opakování.

	Velikost	G	F	g	G^*	F^*	g^*
$\Phi - \Psi$	0,55	0,38	0,27	0,59	0,52	0,56	0,58
$\Phi - \Xi$	0,48	0	0	0	0,33	0,51	0,18
$\Psi - \Xi$	0,52	0	0	0	0,14	0,52	0,09

Tab. 4.2: Průměrné p -hodnoty pro dvouvýběrový test založené na jednotlivých sumárních statistikách pro dvojice procesů založených na Φ, Ψ, Ξ (viz obrázek 4.3), kde počet opakování simulací je 100. Hodnoty s hvězdičkou znamenají rozdíl v prostorovém rozmístění s vyloučením vlivu intenzity dle postupu daném v kapitole 4.3.2.

Generujeme $n = 120$ realizací bodového procesu Φ resp. Ψ resp. Ξ a k němu odpovídající model „zárodek-zrno“ (viz výše uvedený postup). V kroku (3) jsme v průměru odebrali 28 % resp. 22 % resp. 6 % kruhů ze simulací založených na Φ resp. Ψ resp. Ξ . Střední obsahy zrn a jejich celkové počty jsou uvedeny v tabulce 4.1.

Pro každou dvojici ze tří struktur provedeme neparametrický dvouvýběrový test, přičemž struktury považujeme za neznámé.

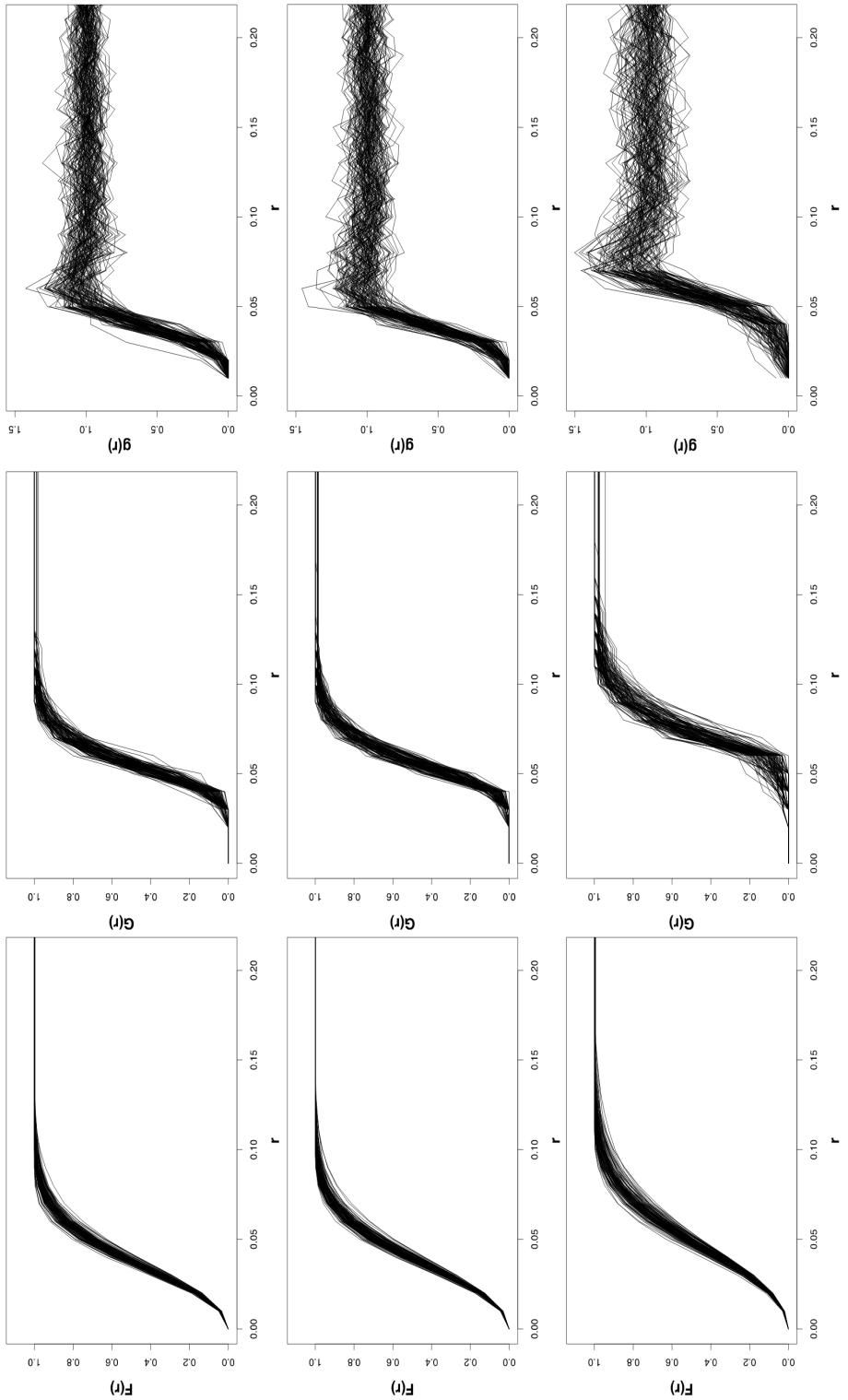
Začneme analýzou individuálních parametrů zrn (kapitola 4.3.1). V našem případě se omezíme pouze na velikosti zrn, tedy $m = 1$. Označíme-li počty zrn z jednotlivých realizací testovaných modelů jako $k_1, \dots, k_{120}, k_{121}, \dots, k_{240}$, potom parametr testu k je dán vztahem

$$k = \min(k_j; j \in \{1, \dots, 240\}).$$

Pokračujeme porovnáním prostorového rozmístění (kapitola 4.3.2). Pro každou realizaci jsme odhadli sumární statistiky G (odhad (2.18)), F (odhad (2.17)) a g (odhad (2.16)), jejichž získané grafy jsou na obrázku 4.4. Každá tato funkce je reprezentovaná $k = 25$ hodnotami v daném intervalu.

Pro testování použijeme první metodu testu, která je založena na U, V veličinách (viz kapitola 4.1). Rozdělíme tedy vzorek na tři nezávislé výběry X, X', X'' a Y, Y', Y'' , každý o velikosti $n/3$. Z nich pomocí vztahu (4.3) resp. (4.4) vypočteme veličinu U resp. V . K testování hypotézy (4.1) o shodnosti rozdělení U a V poté použijeme známý dvouvýběrový Kolmogorov-Smirnovův test (užitím balíčku STAT v programovacím jazyku R).

Celou proceduru jsme opakovali 100krát. Výsledné průměrné p -hodnoty jsou uvedené v tabulce 4.2. Z výsledků vyplývá, že nemůžeme zamítнуть nulovou hypotézu v případě porovnání velikosti zrn (první analýza) pro žádnou z uvažovaných dvojic struktur. V druhé analýze (prostorové rozmístění) nemůžeme zamítнуть nulovou pouze pro dvojici založenou na procesech Φ a Ψ , ale v ostatních případech nulovou hypotézu zamítáme. Nicméně je zde otázka různé hustoty zrn. Hodnoty s hvězdičkou odpovídají čistému rozdílu v prostorovém rozdělení, tj. po transformaci (4.5), a zde zamítáme na 10% hladině významnosti testu pouze v případě dvojice $\Psi - \Xi$ pro funkci g . Získané výsledky testů jsou v souladu se způsobem, jakým byly porovnávané struktury simulovány.



Obr. 4.4: Grafy sumárních statistik $F(\cdot)$ (levý sloupec) resp. $G(\cdot)$ (pravý sloupec) odhadnuté pro simulované systémy částic založené na Straussově bodovém procesu Φ (horní řádek), Ψ (prostřední řádek) a Ξ (dolní řádek). Grafy získané ze všech 120 realizací jsou zobrazeny ve stejném obrázku.

Kapitola 5

Aplikace na reálných datech

5.1 Porovnání hliníkových fólií

Tenké fólie tvořené z hliníkovo-manganových slitin jsou materiály nejpožívanější na lopatky automobilových tepelných výměníků. Toto použití klade velmi přísné požadavky na vlastnosti a vztahy mikrostruktur fólií. Vývoj odpovídající výrobní technologii je založen na dokonalé znalosti dopadů procesních parametrů na přeměny materiálu zahrnující změny v mikrostruktuře. Jedním z cílů je snižování nákladů na výrobu fólií, ale přitom zachování stejných vlastností, a proto je potřeba porovnávat struktury různých materiálů.

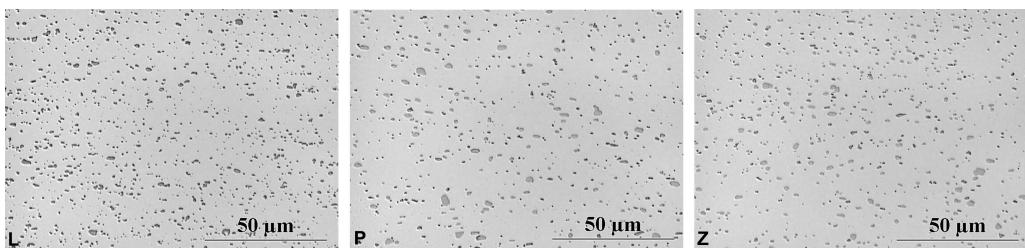
V této aplikaci využijeme metody popsané v kapitolách 2.3, 2.7 a 4.

5.1.1 Materiál a příprava vzorku

Byly studovány tři Al-Mn slitiny, označené L , P a Z , jejichž chemické složení bylo různé. Nejdůležitější faktor plynoucí z objemového podílu a rozdělení velikostí částic v množině uvažovaných slitin je obsah silikonu. Všechny slitiny byly válcovány do pásu tloušťky 8,5 mm. Dále byly vzorky homogenizovány za vysoké teploty a poté válcovány za studena do tloušťky 0,4 mm. Vzorky tloušťky 0,4 mm byly zahřány opět na teplotu 350 °C kvůli zvýšení tažnosti materiálu a pro zjednodušení následného válcování za studena do konečné fólie o tloušťce 0,1 mm.



Obr. 5.1: Schéma výběru pozorovacích oken podél fólie tloušťky 0,1 mm. Vzdálenost mezi dvěma sousedními okny je 1 mm.



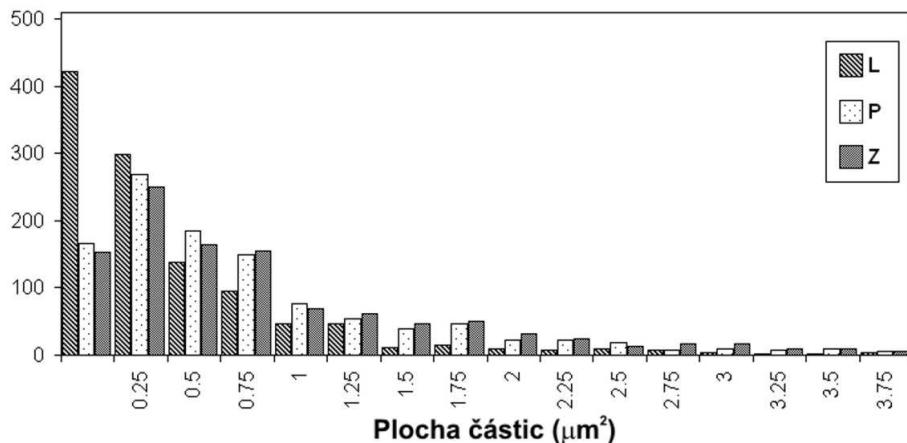
Obr. 5.2: Řezy fólií metalografických vzorků materiálů L (vlevo), P (uprostřed) a Z (vpravo).

Metalografické vzorky byly vytvořeny z příčných řezů fólie (kolmo na rovinu válcování). Po broušení a leštění byly vzorky pozorovány optickým mikroskopem, viz obrázek 5.2, kde vertikální velikost pozorovacího okna odpovídá celkové tloušťce fólie. Dvacet pozorovacích oken bylo změřeno obrazovým analyzátorem podél fólie, vzdálenost mezi nimi byla 1 mm. Způsob výběru oken je schematicky znázorněn na obrázku 5.1. Úprava a obrazová analýza, při které byly změřeny základní parametry částic (viz níže), byly provedeny ve Výzkumném ústavu kovů, s.r.o. v Panenských Břežanech.

5.1.2 Numerické výsledky

Prvotní analýza se zabývá střední velikostí částic a jejich hustotou, viz tabulka 5.1, kde jsou patrné rozdíly mezi strukturou materiálu L a materiály P a Z . V histogramu na obrázku 5.3 je rovněž možné sledovat rozdíly ploch řezů částic v jednotlivých materiálech. Data pro analýzu parametrů částic byla získána měřením parametrů *plocha*, *eqdiam* (průměr kruhu s obsahem rovným hodnotě parametru *plocha*), *minFeret* (minimální Feretův průměr), *maxFeret* (maximální Feretův průměr) v obrazovém analyzátoru, následně byl spočten

$$\text{tvarový faktor} = \frac{\text{minFeret}}{\text{maxFeret}}.$$



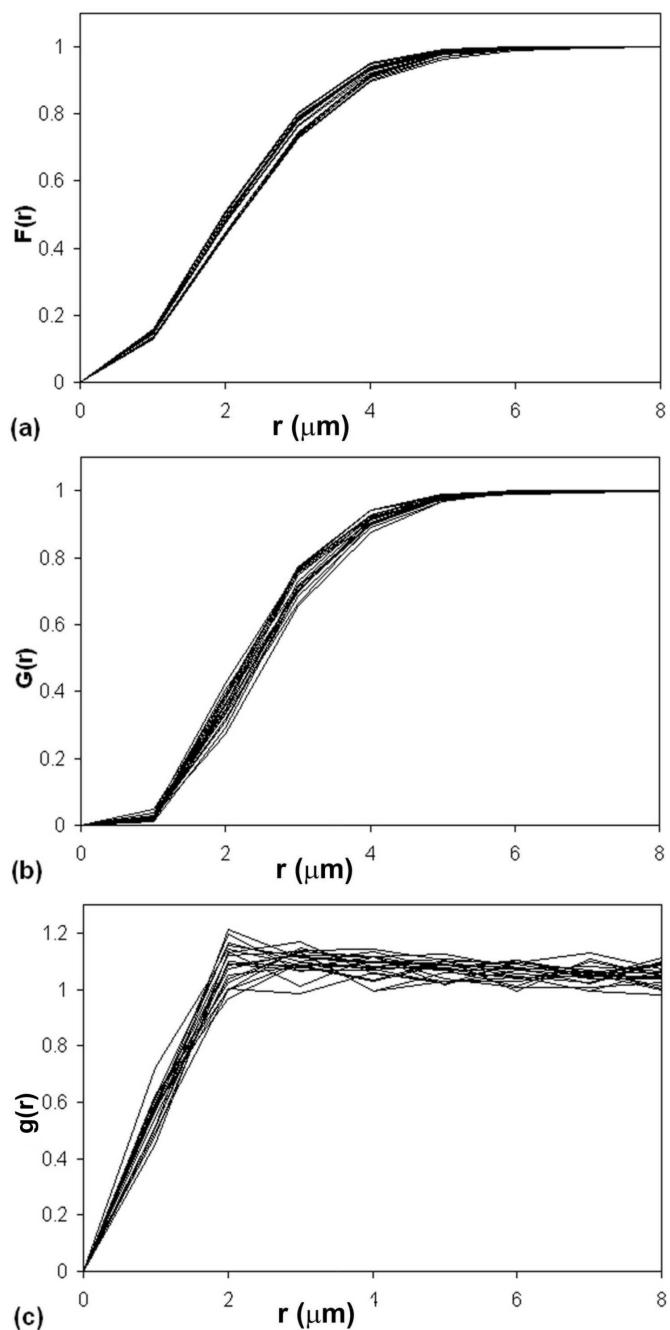
Obr. 5.3: Histogram ploch řezů částic v prvních pozorovacích oknech z každého materiálu.

Proces	Průměrná plocha	Hustota
L	0,592	0,084
P	1,007	0,051
Z	1,034	0,044

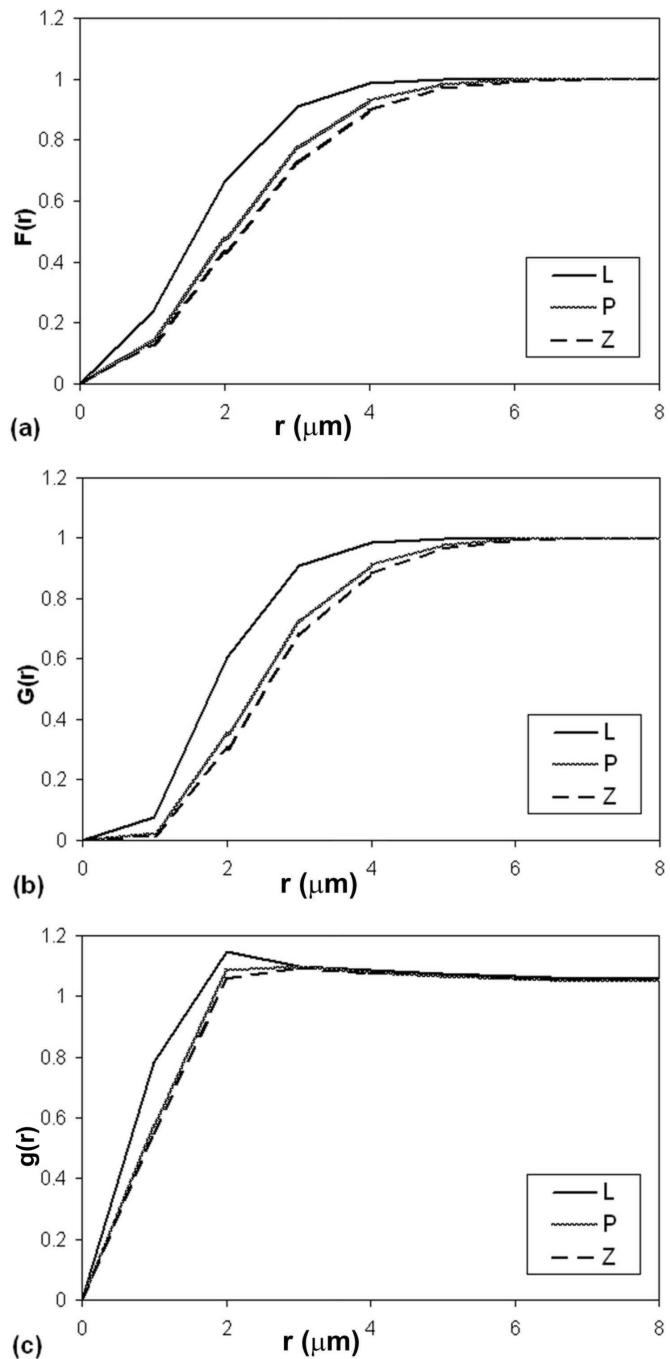
Tab. 5.1: Průměrná plocha pozorovaných řezů částic ($\text{v } \mu\text{m}^2$) a jejich hustoty ($\text{v } \mu\text{m}^{-2}$) pro materiály L, P, Z spočtené ze všech 20 oken.

Protože počet oken je malý, $n = 20$, užili jsme permutační test popsáný v kapitole 4.1. Výsledky z tabulky 5.2 vedou k následující interpretaci: Materiály P a Z se významně neliší, zatímco L se liší od obou P a Z , a to v obou parametrech (velikostí i tvarem částic).

Dále jsme se zaměřili na testování shodnosti rozdělení prostorového uspořádání částic sledovaných materiálů, které jsme approximovali jejich těžišti. Těžiště řezů částic byla změřena obrazovým analyzátem. Máme tedy 20 realizací bodových procesů tvořených těžišti řezů částic. Díky způsobu volby pozorovacích oken můžeme předpokládat, že tyto bodové procesy jsou stacionární. Test provedeme podle postupu uvedenému v kapitole 4.3.2. Nejprve tedy odhadneme kontaktní sférickou distribuční funkci F , distribuční funkci nejbližších sousedů G a párovou korelační funkci g . Odhad funkcí F , G a g jsou uvedeny na obrázku 5.4 pro všech 20 pozorovacích oken materiálu P , tj. na každém obrázku a), b), c) je zobrazeno 20 průběhů příslušných sumárních statistik. Pozorujeme malou variabilitu odhadů. Podobně malá je variabilita těchto odhadů i v případě materiálů



Obr. 5.4: Odhadý (a) kontaktní distribuční funkce F , (b) distribuční funkce nejbližších sousedů G a (c) párové korelační funkce g pro materiál P . Grafy získané ze všech 20 pozorovacích oken jsou vykresleny ve stejném grafu, abychom mohli sledovat malou variabilitu odhadů mezi okny.



Obr. 5.5: Odhadý (a) kontaktní distribuční funkce F , (b) distribuční funkce nejbližších sousedů G a (c) párové korelační funkce g pro všechny tři materiály získané průměrováním odhadů ze všech 20 pozorovacích oken. Je zde patrné, že výsledky pro materiál L se liší od výsledků pro materiály P a Z .

	vše	Plocha	Eqdiam	Tvarový faktor
$L - P$	0	0	0	0,006
$L - Z$	0	0	0	0,006
$P - Z$	0,297	0,295	0,263	0,158

Tab. 5.2: P -hodnoty dvouvýběrových testů parametrů individuálních částic spočtené pro všechny tři parametry dohromady ($m = 3$, sloupec „vše“) a potom pro jednotlivé parametry ($m=1$) s $n = 1$, $k = 500$ a s počtem permutací 5000.

	vše	G	F	g
$L - P$	0	0	0	0
$L - Z$	0	0	0	0
$P - Z$	0	0	0	0,545

Tab. 5.3: P -hodnoty dvouvýběrových testů prostorového rozmístění spočtené pro všechny tři parametry dohromady ($m = 3$, sloupec „vše“) a potom pro jednotlivé parametry ($m=1$) s $n = 1$, $k = 11$, $\Delta = 1\mu\text{m}$ a s počtem permutací 5000.

L a Z . Na obrázku 5.5 porovnáváme průměrné odhadry (z 20 oken) funkcí F , G a g spočtených pro všechny materiály. Získané výsledky jsou pro materiál L výrazně odlišné od výsledků pro materiály P a Z . Odhad funkce g materiálů P a Z jsou prakticky stejné a rozdílné odhady funkcií F a G jsou malé, nicméně odpovídající funkce materiálu L je posunuta doleva.

Výsledky dvouvýběrových testů pro prostorové rozdělení v tabulce 5.3 vedou k interpretaci, že existují významné rozdíly v prostorových rozděleních, mimo párové korelační funkce materiálů P a Z . Můžeme porovnat tyto závěry s výsledky porovnání průměrů na obrázku 5.5. Nuly v prvních dvou řádcích v tabulce 5.3 jsou očekávány, protože hustota částic v L se liší velmi od P a Z , viz tabulka 5.1. Výsledky testu porovnávající charakteristiky dat materiálů P a Z rovněž odpovídají grafům na obrázku 5.5, kde grafy průměrů spočtených pro funkce G a F se liší více než v případě funkce g .

Pro zanedbání vlivu hustoty částic na prostorové rozmístění ve smyslu změny měřítka použijeme postup uvedený v kapitole 4.3.2. V tabulce 5.4 jsou uvedeny numerické výsledky testu hypotézy o stejném prostorovém rozmístění těžišť částic materiálů, kde vždy jedna série dat byla upravena tak, aby vstupní bodové procesy testu měli stejnou intenzitu. Ze zmíněné tabulky vyplývá, že mezi materiály P a Z nejsou patrné rozdíly

	vše	G	F	g
$L - P$	0	0,001	0,058	0,001
$L - Z$	0	0,004	0,345	0
$P - Z$	0,471	0,551	0,419	0,341

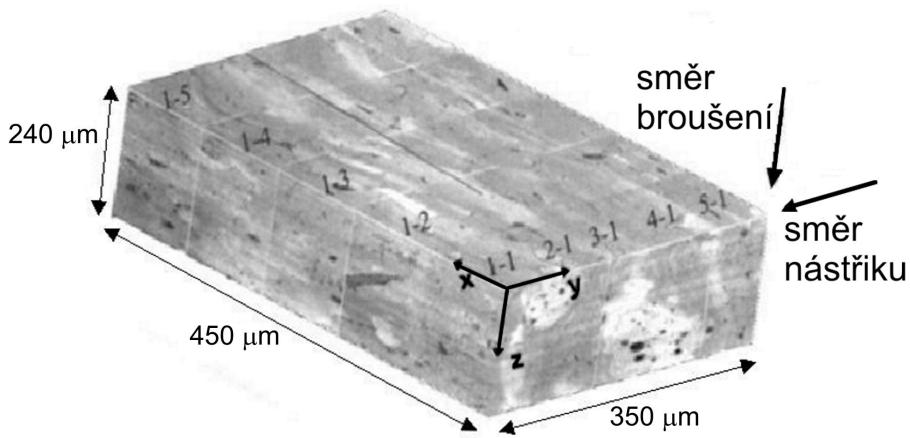
Tab. 5.4: P -hodnoty dvouvýběrových testů prostorového rozmístění spočtených (s eliminací vlivu hustoty částic). Vyčíslení pro všechny tři parametry dohromady ($m = 3$, sloupec „vše“) a potom pro jednotlivé parametry ($m=1$) s $n = 1$, $k = 11$, $\Delta = 1\mu\text{m}$ a s počtem permutací 5000.

v prostorovém rozmístění těžišť částic, tj. nulovou hypotézu nemůžeme zamítout na 5% hladině testu. Mezi materiály L a buď P , nebo Z stále jsou rozdíly, tedy nulovou hypotézu o shodnosti prostorového rozmístění zamítáme. Nicméně na základě výsledků pro distribuční funkci nejbližších sousedů bychom H_0 nemohli zamítout, což může nastat, protože zmíněné tři charakteristiky prostorového rozmístění jsou kvalitativně rozdílné, viz kapitola 2.3.2.

5.2 Statistická analýza pórů v plazmovém nástřiku

V této části popíšeme analýzu mikrostruktury keramického plazmového nástřiku. Studovaný nástřik patří mezi titanové sloučeniny, které tvoří významnou skupinu elektronické keramiky. Studium jeho mikrostruktury je důležité, neboť ta ovlivňuje jeho vlastnosti a následné použití. Mikrostrukturu nástřiku tvoří různé typy pórů a trhliny. Mezi základní typy pórů patří globulární póry, které mají přibližně kulovitý tvar, a interlamelární plošné póry. Naše analýza se zaměřila na zkoumání pórů obou těchto typů, především na určení jejich velikosti, rozmístění uvnitř vzorku a dále na popis vztahů mezi jednotlivými typy pórů.

K analýze jsme použili metody popsané v kapitolách 2.1, 2.2, 2.3.



Obr. 5.6: Zkoumaný vzorek keramického nástříku. Na obrázku je naznačen směr nástříku (osa y), který je kolmý na podkladovou desku, a směr následného broušení (osa z), který je kolmý na směr nástříku.

5.2.1 Materiál a příprava vzorku

Zkoumaný vzorek, keramický nástřík, byl připraven a prvně zpracován v Ústavu fyziky plazmatu Akademie věd ČR v Praze. Použitým materiálem byla technická keramika označována jako MCT, což je směs dvou titanových oxidů, konkrétně $MgTiO_3$ a $CaTiO_3$ s poměrem Mg:Ca rovnajícím se 94:6 (tj. 14 TiO_2 , 11 MgO , 1 CaO).

Vzorek byl vyroben užitím vysoce propustné stabilizované vodní plazmy nástříkem WSP[®] PAL 160. Na použitému systému nástříku závisí výsledná mikrostruktura vzorku, viz [14]. Rozměry výsledného vzorku byly $450 \times 350 \times 240 \mu\text{m}$, viz obrázek 5.6. Po nastříkání byl celý trojrozměrný (3D) vzorek postupně odbrušován po $3 \mu\text{m}$ a každá odbroušená plocha byla leštěna. V každé rovině výbrusu bylo mikroskopem Neophot 32 s CCD kamerou snímáno celkem 5×5 polí o velikosti $90 \times 70 \mu\text{m}^2$. Následně bylo 25 polí spojeno v jeden snímek a na každý snímek byla aplikována segmentace v obrazovém analyzátoru Lucia G3.52, viz obrázek 5.7a). Podrobnější informace o materiálu, způsobu jeho přípravy a následném zpracování jsou v [15].

5.2.2 Obrazová analýza a 3D rekonstrukce

Pro zkoumaný vzorek $W \subset \mathbb{R}^3$ platí, že

$$W = K \cup P,$$

kde K je keramická plazma a P je mikrostruktura. Označme

$$P = G \cup L \cup O,$$

kde G jsou globulární (přibližně konvexní) póry, L interlamelární plošné póry (dále plošné póry) a O tvoří ostatní póry a trhliny. Mikrostruktura P vzorku W je zachycena systematickým výběrem paralelních řezů s pevnou orientací τ (směr broušení odpovídá ose z); rovinu řezu označíme $T_k = T_{k,\tau}$, $k = 1 \dots n$, $n = 80$. Vzdálenost mezi rovinami T_k a T_{k+1} , $k = 1 \dots n - 1$ je $d = 3 \mu\text{m}$.

Pro černobílý snímek $W_k \subset \mathbb{R}^2$ odpovídající T_k , $k = 1, \dots, n$, platí

$$W_k = W \cap T_k = K_k \cup P_k = K_k \cup G_k \cup L_k \cup O_k,$$

kde $K_k = K \cap T_k$ (na snímcích znázorněno černě), $P_k = P \cap T_k$ (na snímcích znázorněno bíle), $G_k = G \cap T_k$, $L_k = L \cap T_k$, $O_k = O \cap T_k$. Způsob obrazové analýzy provedený v programu MicroImage (viz [34]) a 3D rekonstrukce se lišily pro G resp. G_k a L resp. L_k . Objekty typu O resp. O_k jsme se nezabývali.

Pro 3D rekonstrukci obou typů pórů jsme vytvořili speciální programy, viz přiložené CD.

Globulární póry

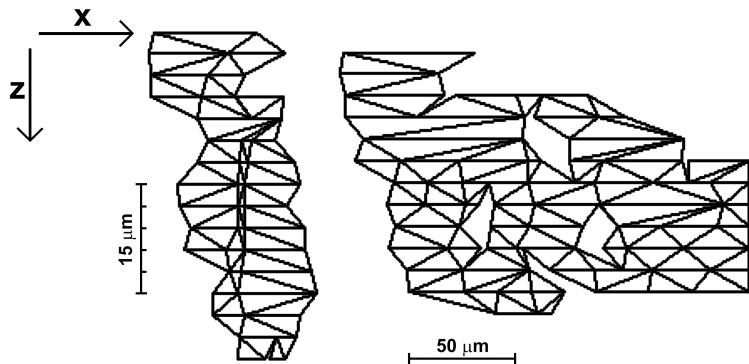
Detekce G_k ve W_k , $k = 1, \dots, n$, byla založena na morfologické transformaci otevření (2.1), tj.

$$G'_k = P_k \circ b(o, r) = \{g_j^k; j = 1, \dots, m_k\}, \quad (5.1)$$

kde o je počátek a r je stejné pro všechna k . Touto operací byly odstraněny L_k a O_k a také malé globulární póry, pro které $g \ominus b(o, r) = \emptyset$. Výsledek operace je zobrazen na obrázku 5.7b).



Obr. 5.7: a) Snímek zachycující mikrostrukturu vzorku. b) Morfologickou operací otevření získané globulární póry ze snímku a). c) Poloautomaticky získané interlamelární plošné póry ze snímku a), které jsou approximovány kombinací úseček.



Obr. 5.8: Projekce triangulací dvou detekovaných interlamelárních plošných pórů do roviny (x,z). Odhadnutá plocha těchto pórů je $3\ 060\ \mu\text{m}^2$ (vlevo) a $6\ 903\ \mu\text{m}^2$ (vpravo).

Pro každý transformovaný řez globulárního póru g_j^k byly obrazovým analyzátorem změřeny a zaznamenány základní parametry řezů pórů, tj. těžiště (střed) $[x_{g_j^k}, y_{g_j^k}]$, plocha $A_{g_j^k}$, maximální průměr $d_{max_{g_j^k}}$ a minimální průměr $d_{min_{g_j^k}}$. Tyto parametry byly použity pro zpětnou 3D rekonstrukci globulárních pórů. Výsledkem rekonstrukce je $\{g_i; i = 1, \dots, m\}$, přičemž g_i jsou charakterizovány pomocí parametrů těžiště $s_{g_i} = [x_{g_i}, y_{g_i}, z_{g_i}]$, počet protnutých rovin řezů p_{g_i} , objem V_{g_i} a maximální průměr $d_{max_{g_i}}$. Pro odhad V_{g_i} byl použit Cavalieriho odhad (2.4).

Interlamelární plošné póry

Plošné póry byly modelovány jako plochy. Tato volba souvisela se zanedbatelnou tloušťkou plošného póru oproti jeho ostatním rozměrům. Protože plošné póry byly přibližně kolmé na směr nástřiku, pozorovali jsme je na snímcích jako vodorovné trhliny.

V obrazovém analyzátoru jsme získali $L_k \cup O'_k = P_k \setminus G'_k$, kde G'_k odpovídá (5.1). Poté byly řezy plošných pórů l_j^k approximovány kombinací úseček, viz obrázek 5.7c), jejichž konce byly ručně označeny. Tedy

$$L_k \approx \{l_j^k; j = 1, \dots, t_k\},$$

kde t_k je počet zpracovaných plošných pórů zaznamenaných v rovině T_k ,

$$l_j^k = \{v_{j,s}^k\}_{s=1}^{s_{l_j^k}} \text{ a } v_{j,s}^k = [x_{j,s}^k, y_{j,s}^k, d(k-1)],$$

přičemž $s_{l_j^k}$ je počet zaznamenaných konců $v_{j,s}^k$ patřící k l_j^k a $d(k-1)$ odpovídá vzdálenosti roviny T_k od počátku ve směru osy z (viz obrázek 5.6).

Tyto údaje byly použity pro 3D rekonstrukci plošných pórů. Výsledkem rekonstrukce je množina $\{l_c; c = 1, \dots, t\}$, kde l_c jsou triangulace approximující plošný pór. Tedy l_c je systém vzájemně se nepřekrývajících trojúhelníků a pokrývající souvislou oblast. Formální zavedení l_c je následující.

Označme $\Delta(u, v, w)$ trojúhelník s vrcholy u, v, w . Necht' $k = 1, \dots, n$, $i = 1, \dots, t_k$ a $j = 1, \dots, t_{k+1}$. Necht' l_i^k, l_j^{k+1} náleží stejněmu plošnému poru. Triangulace mezi l_i^k a l_j^{k+1} je dána vztahem

$$\begin{aligned} \Delta_{i,j}^{k,k+1} &= \\ &= \left(\bigcup_{s^1=1}^{s_{l_i^k}-1} \Delta(v_{i,s^1}^k, v_{i,s^1+1}^k, v_{j,s^2}^{k+1}) \right) \cup \left(\bigcup_{s^3=1}^{s_{l_j^{k+1}}-1} \Delta(v_{j,s^3}^{k+1}, v_{j,s^3+1}^{k+1}, v_{i,s^4}^k) \right), \end{aligned}$$

kde $s^2 \in \{1, \dots, s_{l_j^{k+1}}\}$, $s^4 \in \{1, \dots, s_{l_i^k}\}$ a trojúhelníky $\Delta(\cdot, \cdot, \cdot)$ jsou po dvou disjunktní.

Mezi l_i^k a l_j^{k+1} lze sestrojit více navzájem různých triangulací $\Delta_{j,k}^{k,k+1}$. Všechny tyto triangulace se sestávají právě z $(s_{l_i^k} + s_{l_j^{k+1}} - 2)$ trojúhelníků, ale jejich velikosti ploch se obecně liší.

Označme triangulaci

$$\tilde{\Delta}_{i,j}^{k,k+1} \text{ takovou, že } S(\tilde{\Delta}_{i,j}^{k,k+1}) = \min_{\Delta_{i,j}^{k,k+1}} [S(\Delta_{i,j}^{k,k+1})],$$

kde

$$S(\Delta_{i,j}^{k,k+1}) = \sum_{\Delta(u,v,w) \in \Delta_{i,j}^{k,k+1}} \nu_2(\Delta(u,v,w)).$$

Konečně l_c , $c = 1, \dots, t$, odpovídající plošnému póru $l \in L$ je definováno vztahem

$$l_c = \bigcup_{k=1}^n \left\{ \tilde{\Delta}_{i,j}^{k,k+1} : l \cap T_k \neq \emptyset \wedge l \cap T_{k+1} \neq \emptyset \right\}.$$

Těžiště l_c označíme $[x_{l_c}, y_{l_c}, z_{l_c}]$, počet protínajících rovin p_{l_c} a jeho plochu S_{l_c} , přičemž

$$S_{l_c} = \sum_{\tilde{\Delta}_{i,j}^{k,k+1} \in l_c} S(\tilde{\Delta}_{i,j}^{k,k+1}).$$

Na obrázku 5.8 jsou zobrazeny projekce triangulací dvou plošných pórů do roviny (x, z) . Plocha těchto pórů je $3\ 060 \mu\text{m}^2$ (vlevo) resp. $6\ 903 \mu\text{m}^2$ (vpravo) a plocha projekce těchto pórů do roviny (x, z) je $1\ 855 \mu\text{m}^2$ resp. $4\ 439 \mu\text{m}^2$.

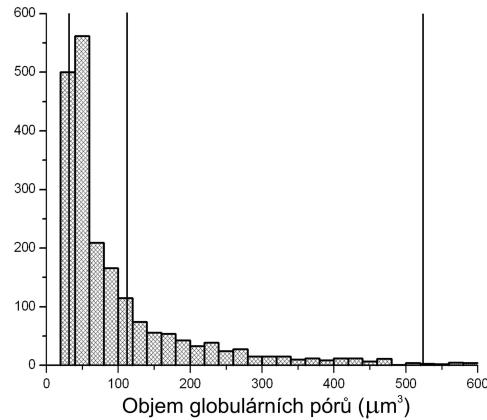
5.2.3 Numerické výsledky

Globulární pory

Z obrazové analýzy a následné 3D rekonstrukce jsme získali globulární pory s maximálními průměry v rozmezí $3 \mu\text{m}$ a $40 \mu\text{m}$. Jejich objemový podíl odhadnutý z první rovnosti ve vztahu (2.5) je

$$V_V \doteq 0,013.$$

Na obrázku 5.9 je zobrazen histogram objemů globulárních pórů. Na základě tohoto histogramu byly určeny tři třídy velikostí pórů odpovídající pórům s maximálním průměrem $4\text{--}6 \mu\text{m}$, $6\text{--}10 \mu\text{m}$ a $10\text{--}20 \mu\text{m}$. Hranice jsou zobrazeny svislými čarami. Volba velikostních tříd souvisí s procesem přípravy nástříku a lze předpokládat jejich různé prostorové rozmístění



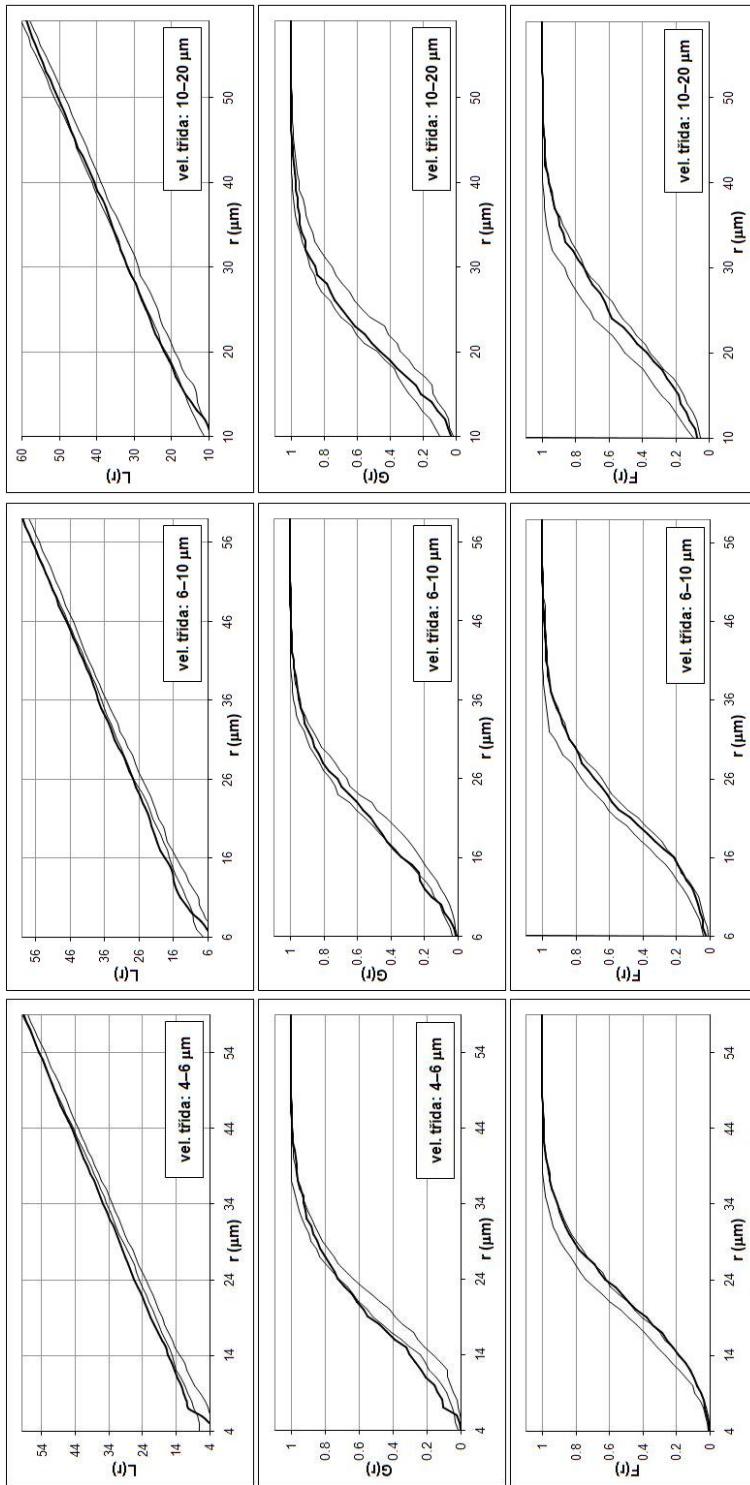
Obr. 5.9: Histogram objemů pórů detekovaných ve zkoumaném vzorku. Svislé čáry v histogramu ukazují hranice velikostních tříd, které odpovídají objemu koulí s průměrem 4 resp. 6 resp. 10 μm , tj. 33,5 resp. 113,1 resp. 523,6 μm^3 .

Maximální průměr pórů	Počet pórů
libovolný	2116
4 - 20 μm	1601
4 - 6 μm	598
6 - 10 μm	548
10 - 20 μm	455

Tab. 5.5: Počet globulárních pórů v jednotlivých velikostních třídách.

(více v [15]). V tabulce 5.5 jsou zobrazeny počty zaznamenaných pórů ve vzorku v jednotlivých studovaných velikostních třídách.

Jedním z hlavních cílů statistické analýzy naměřených dat bylo testování hypotézy (2.19) o úplné prostorové náhodnosti rozdílení globulárních pórů v prostoru. Při testování jsme postupovali podle poznámky 2.7. Realizace bodového procesu ve W byla tvořena množinou těžišť příslušných globulárních pórů s_g . Použili jsme sumární statistiky (kapitola 2.3.2), tj. K -funkci resp. L -funkci resp. distribuční funkci vzdáleností nejbližších sousedů G resp. sférickou kontaktní distribuční funkci F , které byly odhadnuty pomocí vztahů (2.14) resp. (2.15) resp. (2.18) resp. (2.17). Počet simulovaných nezávislých realizací homogenního Poissonova procesu bylo 19, a tedy hladina významnosti testu odpovídá 10 %. Získané grafy jsou na obrázku 5.10.



Obrázek 5.10: Grafy ukazují hodnoty (tučná křivka) $L(\cdot)$, distribuční funkci nejbližších sousedů $G(\cdot)$ a sférickou kontaktní distribuční funkci $F(\cdot)$ pro bodový proces tvořený těžišti pórů s průměrem 4–6 μm resp. 6–10 μm resp. 10–20 μm . Tenké křivky odpovídají 90% intervalu spolehlivosti získaného z 19 simulací Poissonova bodového procesu. Počáteční hodnota r odpovídá minimu z teoretické vzdálenosti mezi těžištěmi nejmenších pórů, tj. 4 μm resp. 6 μm resp. 10 μm .

Poznamenejme, že bodový proces tvořený těžišti globulárních pórů je obecně regulární, neboť nejmenší možné vzdálenosti mezi body jsou ovlivněny velikostmi pórů. Nás však zajímala náhodnost rozmístění globulárních pórů, a proto jsme se zaměřili na prostorovou náhodnost ve větších vzdálenostech mezi body, tj. grafy funkcí sumárních statistik L , G a F na obrázku 5.10 mají počáteční hodnotu r rovnou minimu z teoretické vzdálenosti mezi těžišti nejmenších pórů v příslušné studované velikostní třídě, např. počáteční hodnota r pro třídu 4–6 μm je 4 μm .

Zamítání hypotézy o úplné prostorové náhodnosti (2.19) je zřejmé pro L -funkci ve všech třech velikostních třídách a pro funkce G a F v případě velikostní třídy 4–6 μm . Z polohy křivky odpovídající sumární statistice odhadnuté z příslušné velikostní třídy oproti vykreslené obálce vyplývá, že zamítání je vždy ve prospěch shlukování.

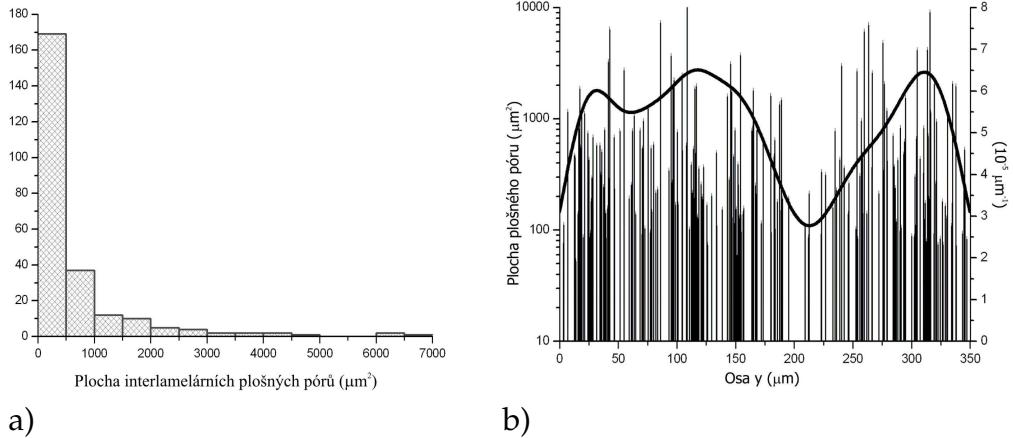
Jestliže hodnotíme celou množinu globulárních pórů ve všech velikostních třídách dohromady, tj. s průměrem 4–20 μm , potom nulovou hypotézu o náhodném prostorovém rozmístění globulárních pórů opět zamítáme ve prospěch jejich shlukování.

Interlamelární plošné póry

Cílem této části analýzy bylo kvantifikovat plošné póry, jejich počet, velikost, tvar a prostorové rozmístění. Ve vzorku bylo detekováno a triangulací modelováno 250 plošných pórů l_c takových, že počet protnutých rovin $p_{l_c} > 1$. Histogram ploch pórů S_{l_c} je uveden na obrázku 5.11a), přičemž $S_{l_c} \geq 51,8 \mu\text{m}^2$. Poznamenejme, že 39 plošných pórů zasahuje do hranice W .

Pro testování homogenity plošných pórů podél osy y (směr nástřiku) zavádeme kótovaný bodový proces na přímce $\{y_{l_c}, S_{l_c}\}_{c=1}^{250}$. Kótovaný bodový proces je vyznačen na obrázku 5.11b) svislými čarami a hodnotami na levé svislé ose. V tomtéž grafu je křivkou znázorněn gaussovský jádrový odhad intenzity se šírkou pásma 20 μm , tj. (2.8) a (2.9), bodového procesu projekcí plošných pórů podél osy y , tj. $\{y_{l_c}\}_{c=1}^{250}$, s hodnotami na pravé svislé ose. Žádné velké nehomogenity v grafu nebyly pozorovány. Nicméně jsou zde pozorovány vrcholy a poklesy na křivce plošných pórů podél osy y .

Fyzikální vysvětlení tohoto jevu může být následující: vzdálenosti mezi sousedními lokálními maximy a minimy jsou mezi 75 a 100 μm , viz graf na

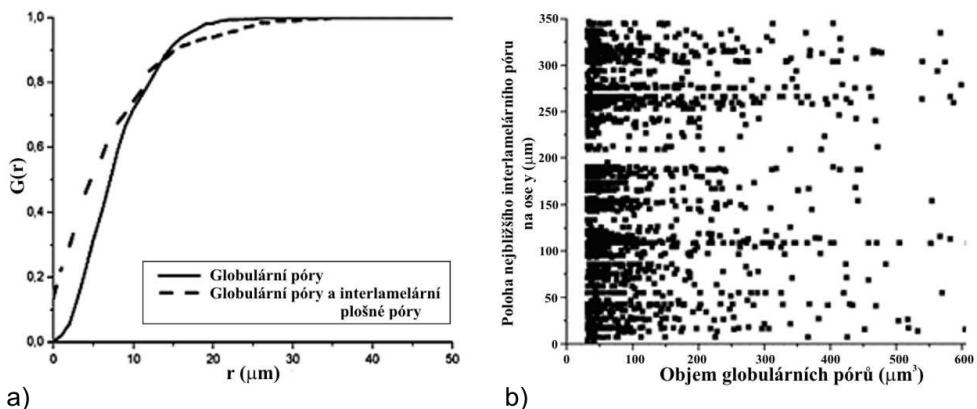


Obr. 5.11: a) Histogram ploch interlamelárních plošných pórů detekovaných ve vzorku. b) Graf představuje kótovaný bodový proces, kde vodorovná osa odpovídá projekci plošných pórů do směru nástřiku (viz parametr y_{l_c}) a na levé svislé ose jejich odhadnutou plochu. Křivka značí gaussovský jádrový odhad bodového procesu $\{y_{l_c}; c = 1, \dots, 250\}$ s hodnotami na pravé svislé ose.

obrázku 5.11, což odpovídá přibližně jedné vrstvě, která byla nastříkána na podklad a poté se nechala dostatečně vychladnout před nastříkáním další vrstvy.

Vztahy mezi globulárními a interlamelárními plošnými pory

Pro vzájemnou analýzu globulárních a plošných pórů jsme vybrali velké globulární pory s objemem mezi $100\text{--}500 \mu\text{m}^3$. Počet těchto globulárních pórů je roven 405. Plošné pory jsme použili všechny z předchozí analýzy. Z naměřených hodnot u obou typů pórů jsme spočetli vzdálenosti mezi těžišti globulárních pórů a povrchem nejbližšího plošného póru. Empirická distribuční funkce těchto vzdáleností je zachycena na obrázku 5.12a) společně s distribuční funkcí nejbližších sousedů G vybraných globulárních pórů odhadnuté podle vztahu (2.18). V grafu můžeme pozorovat, že menší vzdálenosti než $13 \mu\text{m}$ se vyskytují častěji mezi globulárními a plošnými pory, než v případě globulárních pórů. Pro větší vzdálenosti je tomu naopak. Dále vidíme, že víc jak 10 % globulárních pórů protíná nějaký plošný pór. Obrázek 5.12b) zobrazuje velikosti globulárních pórů přiřazených k nejbližšímu plošnému póru.



Obr. 5.12: a) Graf distribučních funkcí vzdálenosti nejbližších sousedů pro globulární pory s objemem 100–500 μm^3 (plná čára) a graf empirické distribuční funkce vzdáleností mezi těmito globulárními pory a interlamelárními plošnými pory (přerušovaná čára). b) Korelační pole s objemy globulárních pórů (vodorovná osa) a projekcí jejich nejbližšího plošného póru do směru nástřiku (svislá osa).

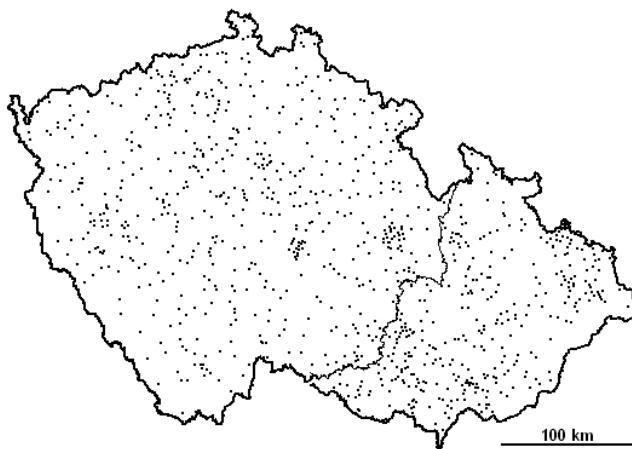
5.3 Aplikace bodových procesů ve státní správě

Elektronická podatelna je jedním z důležitých nástrojů e-Governmentu [26]. Funkční elektronickou podatelnu definujeme jako takovou elektronickou podatelnu, která je realizována dle platných legislativních pravidel, což mimo jiné znamená, že její adresa je zveřejněna na Portálu veřejné správy (PVS) [49]. Konkrétní výzkum zužujeme ještě na oblast úřadů územních samosprávných celků (ÚSC), která se vyznačuje stejnorodostí pravidel, jimiž se tyto úřady musí řídit. V analýze se zaměříme na prostorové vztahy mezi úřady ÚSC, které elektronické podatelnny realizovaly a kterých je navzdory nařízení vlády pouze 952 z celkových 6249 [49]. Tento výzkum přispívá k vytvoření celkového obrazu stavu rozvoje e-Governmentu v ČR.

K analýze jsme použili metody popsané v kapitole 2.3.

5.3.1 Data a metody

Při sběru dat vycházíme z adresáře elektronických podatelen úřadů ÚSC platného k únoru 2008 [49]. Polohu jednotlivých úřadů ÚSC určujeme na

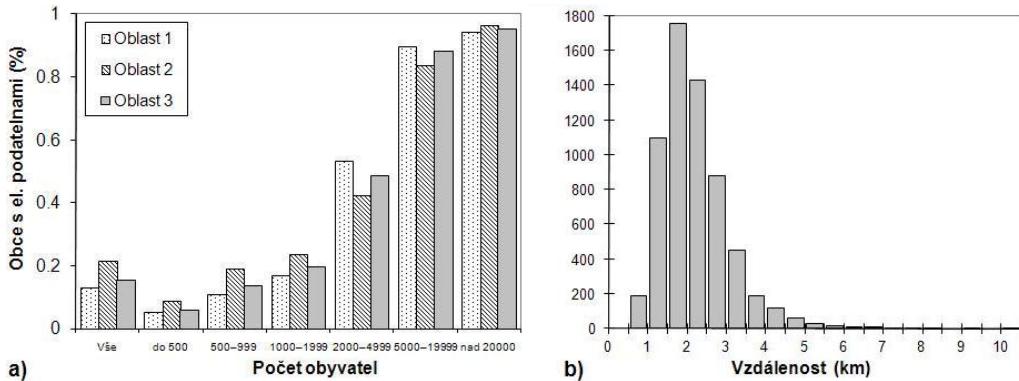


Obr. 5.13: Na obrázku jsou vyznačeny polohy obcí České republiky, které mají elektronickou podatelnu, stav v únoru 2008. Slabá čára rozděluje Českou republiku na Oblast 1 (vlevo) a Oblast 2 (vpravo).

základě dat prezentovaných Českým statistickým úřadem (ČSÚ) v rámci Územně identifikačního registru ÚIR-ZSJ [48], kde jsou geografická data uváděna v metrech v souřadnicovém systému Jednotné trigonometrické sítě katastrální (S-JTSK), který je definován v nařízení vlády č. 430/2006 Sb., o stanovení geodetických referenčních systémů a státních mapových děl závazných na území státu a zásadách jejich používání. V tomto souřadnicovém systému lze provádět standardní geodetická měření a chyba při měření vzdálenosti bodů může být maximálně v jednotkách metrů.

Nechť $x = \{x_1, \dots, x_k\}$ jsou body, které reprezentují polohy úřadů ÚSC, jimiž approximujeme obce v ČR. Obcím s elektronickou podatelnou nechť odpovídají body $x' = \{x'_1, \dots, x'_n\}$, přičemž platí, že $x' \subseteq x$. Pozorovacím oknem nechť je území České republiky nebo její souvislé části, konkrétně

- Oblast 1 je tvořena hl. m. Prahou a dále Středočeským, Jihočeským, Plzeňským, Karlovarským, Ústeckým, Libereckým, Královéhradeckým a Pardubickým krajem a krajem Vysočina.
- Oblast 2 je tvořena Jihomoravským, Olomouckým, Zlínským a Moravskoslezským krajem.
- Oblast 3 je vymezena celým územím ČR, tj.
Oblast 3 = Oblast 1 \cup Oblast 2.



Obr. 5.14: a) Graf zobrazuje procento obcí, které mají elektronickou podatelnou, v závislosti na počtu jejich obyvatel. b) Histogram vzdáleností mezi nejbližšími obcemi v ČR.

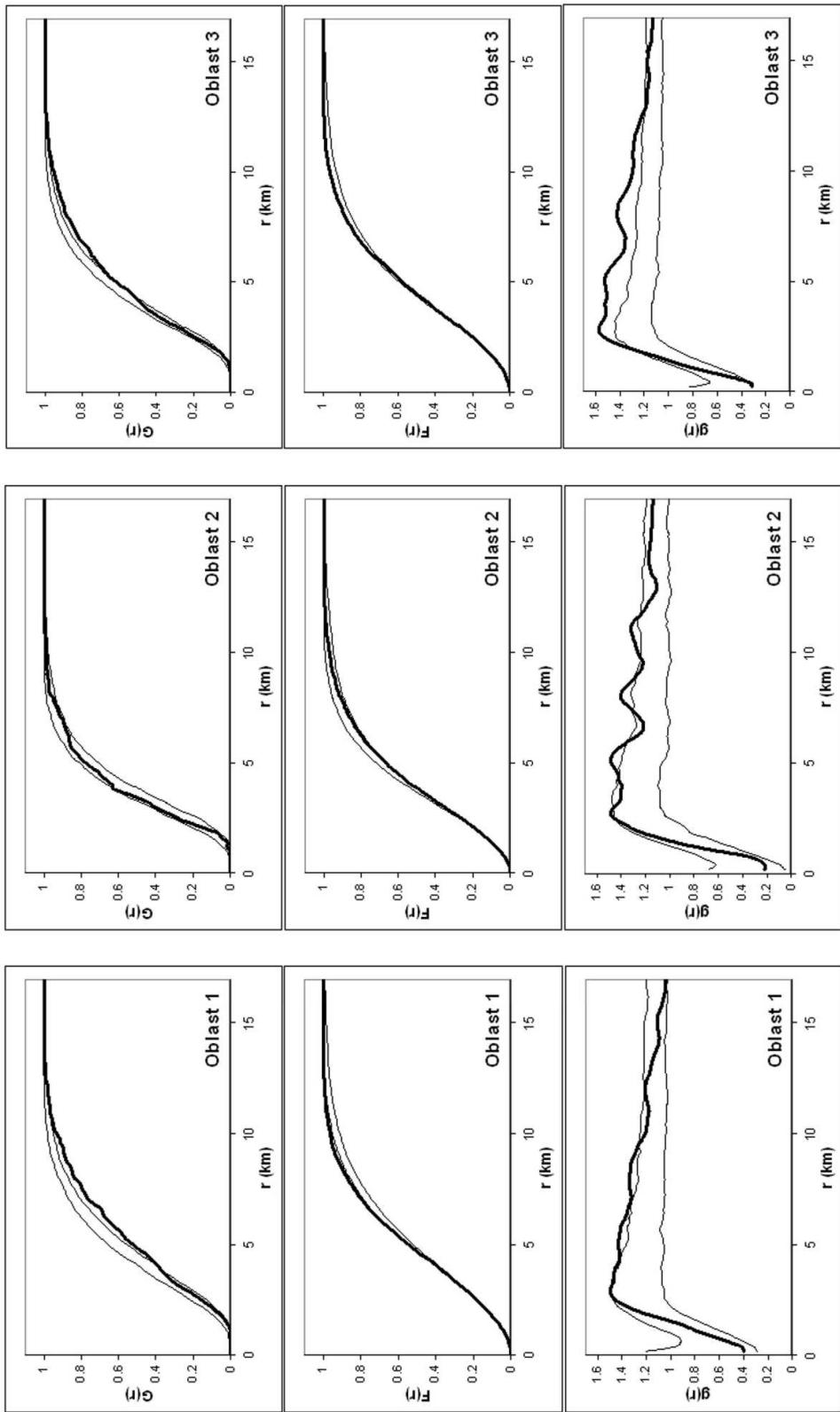
Naše analýza se zabývá otázkou, zda mezi body x' jsou nebo nejsou nějaké interakce (přitažlivé či odpudivé). Budeme tedy testovat hypotézu

$$\begin{aligned} H_0 &: \text{Body } x' \text{ jsou rovnoměrně náhodně rozdělené na } x & (5.2) \\ H_1 &: \text{Body } x' \text{ nejsou rovnoměrně náhodně rozdělené na } x \end{aligned}$$

Pro testování hypotézy (5.2) použijeme Monte Carlo test založený na sumárních statistikách. Použité sumární statistiky jsou sférická kontaktní distribuční funkce F resp. distribuční funkce vzdáleností nejbližších sousedů G resp. párová korelační funkce g , které byly odhadnuty pomocí vztahů (2.17) resp. (2.18) resp. (2.16). Poznamenejme, že stacionaritu u našich bodových procesů předpokládáme. Při testu postupujeme obdobně jako v poznámce 2.7, přičemž místo Poissonova bodového procesu simulujeme náhodný rovnoměrný výběr N bodů z množiny $x \cap O$, kde $N = \#(x' \cap O)$ a O je testovaná oblast. Počet simulací je 199 a zvolená hladina testu je $\alpha = 5\%$.

5.3.2 Numerické výsledky

Z celkového počtu $k = 6249$ obcí mělo v únoru roku 2008 realizováno funkční elektronickou podatelnou 952 obcí, tj. přibližně 15,2 % obcí (viz obrázek 5.13). Pro podrobnější zkoumání jsme rozdělili obce podle velikostních kategorií (dle standardu používaného ČSÚ). Podle výsledků



Obr. 5.15: Grafy sumárních statistik $G(\cdot)$, $F(\cdot)$ a $g(\cdot)$ (tučné křivky) odhadnuté pro data z Oblasti 1 (levý sloupec), Oblasti 2 (prostřední sloupec) a Oblasti 3 (pravý sloupec). Obalky (tenké křivky) vymezují 95% interval spolehlivosti pro testování hypotézy o rovnoměrně náhodném rozmístění obcí s elektronickou podatelnou v obcích ČR.

prezentovaných v [26] jsou mezi jednotlivými kraji ČR nezadanbatelné rozdíly v procentech obcí, které povinnost provozovat elektronickou podatelnu plní. Z grafu na obrázku 5.14a) plyne, že celkově je lepší situace v Oblasti 2 a rovněž jsou na tom v této Oblasti lépe malé obce až do velikosti 1999 obyvatel. V případě středně velkých obcích je stav lepší v Oblasti 1 a pro velké obce je situace v obou oblastech téměř shodná. Dále platí, že čím vyšší je velikostní kategorie, tím větší procento obcí má elektronickou podatelnu realizovánu.

Na obrázku 5.14b) je znázorněn histogram vzdáleností mezi nejbližšími obcemi ČR. Z něj také vyplývá, že v rozmezí od 0,5 km do 10,4 km se od libovolné obce nachází další obec, přičemž převládají menší vzdálenosti. Podíl obcí, které jsou od sebe vzdáleny více než 3,5 km, nepřevyšuje 4 %.

Grafy na obrázku 5.15 prezentují výsledky testu hypotézy (5.2). Pro všechny zkoumané Oblasti (1, 2, 3) hypotézu na 5% hladině testu zamítáme. Z detailního rozboru grafů jednotlivých sumárních statistik plyne, že v Oblasti 1 se prosazují slabé odpudivé síly na vzdálenostech nad 3,8 km (funkce G) resp. nad 6 km (funkce F), avšak pro menší vzdálenosti obcí se výsledek blíží rovnoměrně náhodnému rozmístění. V Oblasti 2 jsou patrné nevýrazné shluky (funkce g), které mohou ukazovat na spolupráci blízkých obcí. Protože poměr rozlohy Oblast 1 : Oblast 2 $\approx 2,6$, není překvapivé, že výsledky pro Oblast 3 jsou obdobné jako v případě Oblasti 1 (funkce G). Nicméně funkce g dosahuje nejvyšších hodnot v intervalu mezi 2,8 km a 5 km, což odpovídá výsledkům pro Oblast 2. Ve všech zkoumaných Oblastech (1, 2, 3) jsou zjištěné odchylky od testované hypotézy (5.2) nepříliš výrazné.

Podíváme-li se na získané výsledky z hlediska e-Governmentu, zjistíme, že tento výsledek neodpovídá záměru zákona č. 500/2004 Sb., správní řád, který zavedl možnost prostřednictvím veřejnoprávní smlouvy zajistit provozování elektronických podatek pro malé obce obcemi s rozšířenou působností. Pokud by se tento postup ve velké míře realizoval, museli bychom v rozmístění obcí s možností příjmu elektronických podání pozorovat výrazné shluky, což se neukázalo. Zdá se dokonce, že v oblasti zajištění provozu elektronických podatek úřady ÚSC výrazně nespolu-pracují, neboť na malých vzdálenostech jsou obce s elektronickou podatelnu rovnoměrně náhodně rozmístěné.

Literatura

- [1] Anděl J.: *Základy matematické statistiky. 1. vydání.* MATFYZPRES, Praha 2005.
- [2] Baddeley A.J., Gill, R.D.: Kaplan-Meier estimators of distance distributions for spatial point processes. *Annals of Statistics*, 1997, 25:263–292.
- [3] Baddeley A.J., Jensen E.B.V: *Stereology for Statisticians*. Chapman & Hall/CRC, 2003.
- [4] Bakshaev A.: Nonparametric tests based on \mathfrak{N} -distances. *Lithuanian Math J*, 2008, 48, 4:368–379.
- [5] Barndorff-Nielsen O., Shephard N.: Non-Gaussian Ornstein-Uhlenbeck based models and some of their uses in financial economics. *JRSS*, 2001, B 63:167–241.
- [6] Beneš V. (1998): *Stereologie a výběr*, Sborník ROBUST 1998, 43–50.
- [7] Beneš V., Klebanov L., Lechnerová R.: *Two-sample tests for germ-grain models*. Sborník 10th European Congress of ISS. V. Capasso, G. Aletti, A. Micheletti (Eds.), ESCULAPIO Pub. Co., Bologna, Italy 2009, 520–525.
- [8] Beneš V., Lechnerová R., Klebanov L.: *Nelineární filtrování Coxových bodových procesů*. Sborník ROBUST 2006. J. Antoch a G. Dohnal (Eds.), JČMF, Praha 2006, 17–23.
- [9] Beneš V., Lechnerová R., Klebanov L., Slámová M., Sláma P.: Statistical comparison of the geometry of second phase particles. *Materials Characterization*, 2009, 60, 10:1076–1081.

- [10] Beneš V., Prokešová M.: *Nonlinear filtration in doubly stochastic point processes*. Sborník 4th International Conference Aplimat 2005. M. Kováčová (Eds.), SjF STU Bratislava 2005, 415–420.
- [11] Brix A., Diggle P: Spatio-temporal prediction for log-Gaussian Cox processes. *J. Royal Statist. Soc.*, 2001, B-63:823–841.
- [12] Cont, R., Tankov P.: *Financial Modelling with Jump Processes*. Chapman& Hall/CRC, Boca Raton, 2004.
- [13] Cressie N.: *Spatial Statistics*. Wiley, New York, 1991.
- [14] Ctibor P., Lechnerová R., Hofmann P.: *Quantification of thermal spray coatings structure using volumetric reconstruction*. Sborník S⁴G. R. Lechnerová, I. Saxl, V. Beneš (Eds.), JČMF, Praha 2006, 251–256.
- [15] Ctibor, P., Lechnerová, R., Beneš, V.: Quantitative analysis of pores of two types in a plasma-sprayed coating, *Materials Characterization*, 2006, 56:297–304.
- [16] Ctibor P., Roussel O., Tricoire A.: Unmelted particles in plasma sprayed coatings. *Journal of European Ceramic Society*, 2003, 23,16:2993-2999.
- [17] Daley D.J., Vere-Jones D.: *An Introduction to the Theory of Point Processes*. Springer, New York, 1988.
- [18] Jůzková R.: *Geometrická pravděpodobnost a obrazová analýza*. Diplomová práce, Univerzita Karlova, Praha 2003.
- [19] Jůzková R., Ctibor P., Beneš V.: Analysis of porous structure in plasma-sprayed coating. *Image Analysis & Stereology*, 2004, 23:45–52.
- [20] Jůzková R., Ctibor P., Beneš V.: *Interlamellar flat pores analysis in plasma-sprayed coating*. Sborník 9th European Congress on Stereology and Image Analysis and 7th STERMAT. J. Chraponsky, J. Cwajna, L. Wojnar (Eds.), Zakopane, Poland 2005, 1:65–72.
- [21] Karr A.F.: State estimation for Cox processes on general spaces. *Stoch. Proc. and their Applic.* 1983, 14:209–232.
- [22] Klain D.A., Rota G.-C.: *Introduction to Geometric Probability*, Cambridge University Press, Cambridge 1997.
- [23] Klebanov L.: *N-Distances and their applications*. The Karolinum Press, Praha 2005.

- [24] Klebanov L., Gordon A., Xiao Y., Land H., Yakovlev A.: A permutation test motivated by microarray data analysis. *Computational Statistics & Data Analysis*, 2006, 50, 12:3619–3628.
- [25] Klebanov L., Lechnerová R., Slámová M., Sláma P., Beneš V.: Statistical testing of microstructure differences, *Inžynieria materialova*, 2008, 164, 4:181–184.
- [26] Lechner T.: *Základní nástroje E-Governmentu v ČR*. Sborník konference Veřejná ekonomika a správa 2007: Inovace ve veřejném sektoru jako faktor rozvoje územních samosprávných celků, Vaňková I. (Eds.). VŠB – Technická univerzita Ostrava 2007, 216 – 223.
- [27] Lechnerová R., Helisová K., Beneš V.: Cox Point Processes Driven by Ornstein-Uhlenbeck Type Processes, *Methodology and Computing in Applied Probability*, 2008, 10, 3:315–335.
- [28] Lechnerová R., Lechner T.: *Analýza rozmístění elektronických podatek obcí v České republice*. Sborník ROBUST 2008. J. Antoch a G. Dohnal (Eds.), JČMF, Praha 2009, 231–238.
- [29] Lieshout, M.N.M. van: *Markov Point Processes and Their Applications* Imperial College Press, London, 2000.
- [30] Mates P., Smejkal V.: *E-Government v českém právu*. Linde Praha, Praha, 2006.
- [31] Moller J., Waagepetersen R.P.: *Statistical Inference and Simulation for Spatial Point Processes*. Chapman & Hall/CRC, 2003.
- [32] Nachtigal P., Semecký V., Gojová A., Kopecký M., Beneš V., Jůzková R.: The application of Stereological Methods for the quantitative analysis of the atherosclerotic lesions in rabbits, *Image Analysis & Stereology*, 2002, 21,3:165–173.
- [33] Ohser J., Mücklich F.: *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*. Wiley, New York 2002.
- [34] Olympus MicroImage 2, Reference Guide, 1999.
- [35] Prokešová M.: *Modelling and statistics of spatial point processes*, Dizertační práce, Univerzita Karlova, Praha 2005.

- [36] Prokešová M., Hellmund G., Vedel Jensen E.B.: *On spatio-temporal Lévy based Cox processes*. Sborník S⁴G. R. Lechnerová, I. Saxl, V. Beneš (Eds.), JČMF, Praha 2006, 112–117.
- [37] Rataj J.: *Bodové procesy*. Karolinum, Praha 2006.
- [38] Ripley B.D.: *Statistical inference for spatial processes*. Cambridge University Press, Cambridge 1988.
- [39] Sato K.: *Lévy Processes and Infinitely Divisible Distributions*. Cambridge University Press, 1999.
- [40] Serra J.: *Image analysis and mathematical morphology*. Academic Press, London 1982.
- [41] Snyder D.L.: Filtering and detection for doubly stochastic Poisson processes. *IEEE Trans. Inform. Theory* IT-18, 91–102, 1972.
- [42] Snyder D., Miller M.: *Random Point Processes in Time and Space*. Springer Verlag, New York, 1991.
- [43] Stoyan D., Kendall W.S., Mecke J.: *Stochastic geometry and its applications (second edition)*. Wiley, New York 1995.
- [44] Stoyan D., Stoyan H.: *Fractals, random shapes and point fields: methods of geometrical statistics*. John Wiley and Sons, Chichester, 1994.
- [45] Tewari A., Gokhale A.M.: Nearest neighbor distributions in thin films, sheets, and plates, *Acta Materialia*, 2006, 54, 7: 1957–1963.
- [46] Tewari A., Gokhale A.M.: Computations of contact distributions for representation of microstructural spatial clustering, *Comput. Materials Sci*, 2006, 38: 75–82.
- [47] Programovací jazyk R: <http://www.r-project.org/>
- [48] Český statistický úřad – územně identifikační registr: http://www.czso.cz/csu/rso.nsf/i/prohlizec_uir_zsj
- [49] Portál veřejné správy (PVS): http://portal.gov.cz/wps/portal/_s.155/696?kam=epodatelny