

UNIVERZITA PALACKÉHO V OLMOUCI
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
KATEDRA MATEMATICKÉ ANALÝZY A APLIKACÍ MATEMATIKY

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Slabě nelineární regresní model



Vedoucí diplomové práce:

prof. RNDr. Ing. Lubomír Kubáček, DrSc., Dr. h. c.

Rok odevzdání: 2011

Vypracovala:

Bc. Pavlína Steklá

MPM, II. ročník

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem vytvořila tuto diplomovou práci samostatně pod vedením prof. RNDr. Ing. Lubomíra Kubáčka, DrSc., Dr. h. c. a že jsem v seznamu použité literatury uvedla všechny zdroje použité při zpracování práce.

V Olomouci dne 31. března 2011

Poděkování

Ráda bych na tomto místě poděkovala především svému vedoucímu diplomové práce prof. RNDr. Ing. Lubomíru Kubáčkovi, DrSc., Dr. h. c. za obětavou spolupráci i za čas, který mi věnoval při konzultacích. Děkuji také své rodině a přátelům za to, že mě po celou dobu studia podporovali.

Obsah

Úvod	6
1 Definice a pomocná tvrzení	7
1.1 χ^2 rozdělení	7
1.2 Metoda nejmenších čtverců	7
1.3 Maticový počet	9
1.3.1 Spektrální rozklad matice	10
1.4 Lineární regresní model	11
2 Postup výpočtu	12
2.1 Linearizace modelu rozvojem do Taylorovy řady	12
2.1.1 Odhad parametru β	14
2.1.2 Linearizační oblast pro σ^2 a varianční komponenty	16
2.1.3 Konfidenční oblast	21
2.1.4 Testování slabě nelineárních hypotéz	26
3 Řešení příkladu	31
3.1 Linearizovatelný model	31
3.1.1 Vychýlenost odhadu parametru β	32
3.1.2 Linearizační oblast pro varianční komponenty	36
3.1.3 Konfidenční oblast	39
3.1.4 Testování slabě nelineárních hypotéz	41
3.2 Nelinearizovatelný model	44
3.2.1 Vychýlenost odhadu parametru β	45
3.2.2 Linearizační oblast pro σ^2	50
3.2.3 Konfidenční oblast a testování slabě nelineárních hypotéz	52
Závěr	53
Příloha A	56

Seznam obrázků

Obr. 1: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizačních oblastí \mathcal{L}_a a \mathcal{L}_b	34
Obr. 2: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} pro $\delta\beta$ a linearizační oblasti \mathcal{L}_ϑ	37
Obr. 3: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizační oblasti $\mathcal{L}_{d(\cdot),conf}$	40
Obr. 4: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizační oblasti \mathcal{L}_{test,H_0}	42
Obr. 5: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizační oblasti $\mathcal{L}_{test,\Delta}$	44

Obr. 6: Konfidenční elipsy a linearizační oblasti pro různé body $[\beta_1, \beta_2]'$ s hodnotami poměrů délek jejich hlavních poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$	47
Obr. 7: Konfidenční elipsy a linearizační oblasti se středem v bodech $[11, 6]'$ a $[6, 11]'$ s hodnotami poměrů délek jejich hlavních poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$	48
Obr. 8: Porovnání konfidenčních elips a linearizačních oblastí \mathcal{L}_{σ^2} pro různé hodnoty β a σ s uvedenými hodnotami poměrů délek jejich hlavních poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$	50

Seznam tabulek

Tabulka 2.1: Tabulka hodnot $K_0^{(par)}(\beta)$ vyčíslených pro různé parametry β	46
Tabulka 2.2: Tabulka poměrů velikostí hlavních poloos konfidenčních a linearizačních oblastí $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ pro $\sigma = 1$ a hodnot $K_0^{(par)}(\beta)$ v bodech na diagonále	49
Tabulka 2.3: Tabulka poměrů velikostí hlavních poloos konfidenčních a linearizačních oblastí $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ v bodech na diagonále pro různé hodnoty σ	49
Tabulka 2.4: Tabulka poměrů velikostí hlavních poloos konfidenčních a linearizačních oblastí $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ v bodech na diagonále pro $\sigma = 1$ a pro hodnoty σ , které umožňují model linearizovat	51

Označení

\mathbf{Y}	náhodný n -rozměrný vektor
$\boldsymbol{\beta}$	vektorový parametr 1. řádu
$\boldsymbol{\vartheta}$	vektorový parametr 2. řádu
$\mathbf{A}_{n,k}$	matice typu $n \times k$
$\mathcal{M}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{A}\mathbf{u} : \mathbf{u} \in R^k\}$	sloupcový prostor matice \mathbf{A}
$\text{Ker}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{u} : \mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{0}\}$	jádro matice \mathbf{A}
R^k	k -dimenzionální reálný vektorový prostor
$\mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}$	projekční matice na sloupcový prostor $\mathcal{M}(\mathbf{F})$ matice \mathbf{F} vzhledem k normě dané pozitivně definitní maticí $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$; $\ \cdot\ = \sqrt{\mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}}$
$\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}$	projekční matice na $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ - ortogonální komplement prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{F})$, tzn. $\mathbf{I} - \mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}$
α	hladina významnosti
\mathcal{E}	konfidenční elipsoid
$\Gamma(\cdot)$	gama funkce
$u(1 - \alpha)$	$(1 - \alpha)$ -kvantil normálního rozdělení $N(0,1)$
$\chi_r^2(0)$	náhodná veličina s centrálním chí-kvadrát rozdělením s počtem stupňů volnosti r
$\chi_r^2(0; 1 - \alpha)$	$(1 - \alpha)$ -kvantil náhodné veličiny s centrálním chí-kvadrát rozdělením s počtem stupňů volnosti r
$\chi_r^2(\delta)$	náhodná veličina s necentrálním chí-kvadrát rozdělením s počtem stupňů volnosti r a parametrem necentrality δ
$F_{f_1, f_2}(0)$	náhodná veličina s centrálním Fisher-Snedecorovým rozdělením s f_1 a f_2 stupni volnosti
$F_{f_1, f_2}(\delta)$	náhodná veličina s necentrálním Fisher-Snedecorovým rozdělením s f_1 a f_2 stupni volnosti a parametrem necentrality δ
$F_{f_1, f_2}(0; 1 - \alpha)$	$(1 - \alpha)$ -kvantil centrálního Fisher-Snedecorova rozdělení s f_1 a f_2 stupni volnosti
β	parametrický prostor
\mathcal{B}^k	třída borelovských množin v prostoru R^k
$h(\mathbf{F})$	hodnota matice \mathbf{F}
\mathbf{I}	jednotková matice
$\{\mathbf{A}\}_{i,j}$	(i, j) -tý prvek matice \mathbf{A}
$\{\mathbf{A}\}_{\cdot,j}$	j -tý sloupec matice \mathbf{A}
$\{\mathbf{A}\}_{i,\cdot}$	i -tý řádek matice \mathbf{A}

Úvod

Regresní modely jsou užitečný nástroj pro matematickou formulaci nějakého reálného problému. Oblíbené jsou pro svou jednoduchost především lineární modely, nicméně v praxi bývají vztahy mezi veličinami velmi často nelineární. S takovými případy se setkáváme v geodézii, stavebnictví, fyzice, ekonomii, ale i třeba v biologii a medicíně.

Práce s nelineárním modelem bývá náročná nejen z důvodu obtížnosti, ale i kvůli době potřebné pro výpočty. V některých případech ovšem existuje možnost si situaci zjednodušit. Jestliže je tedy statistický model nelineární, pak standardní procedurou je linearizovat ho a použít postupy lineární statistické teorie. Tento postup může samozřejmě vést také k problémům. Je potřeba najít kritéria, díky kterým určíme, zda je linearizace konkrétního modelu možná či nikoliv. Pokud není nelinearita silná, využívá se s výhodou jeho lineární verze.

Tím se dostáváme k hlavní náplni této diplomové práce. Cílem je určit míry nelinearity pro odhad parametrů prvního i druhého řádu, konfidenční oblast a test nelineární hypotézy pro nelineární regresní model. Pomocí těchto měr určit hranice linearizační oblasti a posoudit její vhodnost pro aplikace.

Práce je rozdělena do tří hlavních částí. První kapitola určuje základní pojmový aparát, ze kterého v diplomové práci budeme vycházet. Druhá kapitola obsahuje teorii využívanou k určení vhodnosti použití linearizovaného modelu. Důležitým pojmem jsou míry nelinearity, pomocí nichž lze nalézt linearizační oblasti. Třetí, stěžejní část práce, je tvořena praktickou ukázkou užití teorie. Zaměříme se na dva nelineární regresní modely a vyšetříme možnost jejich linearizace. Sestrojíme linearizační oblasti a konfidenční oblasti a porovnáme jejich velikosti.

1 Definice a pomocná tvrzení

Tato sekce je zpracována podle literatury [1], [2], [3], [4], [5], [6].

Lemma 1.1 (Schwarzova nerovnost) *Nechť $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in R^n$. Pak platí*

$$|\mathbf{x}'\mathbf{y}| \leq \sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}}\sqrt{\mathbf{y}'\mathbf{y}}$$

a

$$|\mathbf{x}'\mathbf{y}| = \sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}}\sqrt{\mathbf{y}'\mathbf{y}} \text{ tehdy a jen tehdy když } \exists\{\alpha \in R^1\} : \mathbf{x} = \alpha\mathbf{y}.$$

Věta 1.1 (Scheffého věta) *Nechť $\mathbf{x}_0 \in R^n$ a Σ je $n \times n$ pozitivně definitní matice. Pak platí*

$$\forall\{\mathbf{h} \in R^n\} |\mathbf{h}'\mathbf{x}_0| \leq |c|\sqrt{\mathbf{h}'\Sigma\mathbf{h}} \iff \mathbf{x}_0'\Sigma^{-1}\mathbf{x}_0 \leq c^2.$$

1.1 χ^2 rozdělení

Věta 1.2 *Nechť jsou X_1, \dots, X_n nezávislé náhodné veličiny, $X_i \sim N(0, 1)$, $\forall i = 1, \dots, n$. Náhodná veličina $Y_n = \sum_{i=1}^n X_i^2$ má hustotu*

$$g_n(y) = \begin{cases} 0, & \text{pro } y \leq 0, \\ \frac{y^{\frac{n}{2}-1}e^{-\frac{y}{2}}}{2^{\frac{n}{2}}\Gamma(\frac{n}{2})}, & \text{pro } y > 0 \end{cases} \quad (1)$$

Definice 1.1 *Hustota $g_n(y)$ z Věty 1.2 je hustota chí-kvadrát rozdělení o n stupních volnosti, $n \in N$ je parametr tohoto rozdělení.*

1.2 Metoda nejmenších čtverců

Metoda nejmenších čtverců umožňuje nalézt vhodnou aproximační funkci pro dané, empiricky zjištěné hodnoty. Hledaná funkce musí být lineární kombinací předem známých funkcí, přičemž tato metoda nám umožní vypočítat jejich koeficienty. Metoda nejmenších čtverců slouží k nalezení takového řešení, aby součet druhých mocnin rozdílů mezi daty a odhady hodnot měřených veličin byl minimální.

Věta 1.3 (*O ekvivalenci odhadů*) *Lineární odhady neznámých parametrů v lineárních regresních modelech optimální ve smyslu principu nejmenších čtverců jsou nestranné a sdruženě eficientní.*

Uvažujme lineární model $\mathbf{Y} = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta} + \mathcal{E}$, $\boldsymbol{\beta} \in \tau$, přičemž

$$\tau = \left\{ \begin{array}{l} R^k, \text{ měření vektorového parametru bez podmínek;} \\ \{\boldsymbol{\beta} : \boldsymbol{\beta} \in R^k, \mathbf{b} + \mathbf{B}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}\}, \\ \text{měření parametru s podmínkami typu I;} \\ \left\{ \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \mathbf{z} \end{pmatrix} : \boldsymbol{\beta} \in R^{k_1}, \mathbf{z} \in R^{k_2}, \mathbf{b} + \mathbf{B}_1\boldsymbol{\beta} + \mathbf{B}_2\mathbf{z} = \mathbf{0} \right\}, \\ \text{neúplné měření parametru s podmínkami typu II} \end{array} \right.$$

Hledá se takový bod variety $\tau \subset R^k$, který pro každou realizaci \mathbf{y} náhodného vektoru \mathbf{Y} , $\text{Var}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\Sigma}$, minimalizuje kvadratickou formu

$$(\mathbf{y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta})' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}), \quad \boldsymbol{\beta} \in \tau.$$

Nejlepší nestranný lineární odhad parametru $\boldsymbol{\beta}$ se liší v závislosti na typu kovarianční matice vektoru pozorování. Uvažujme model

$$\mathbf{Y} = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta} + \mathcal{E}, \quad \boldsymbol{\beta} \in R^k, \quad h(\mathbf{F}) = k < n.$$

Je-li $\text{Var}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\Sigma}$, kde $\boldsymbol{\Sigma}$ je známá pozitivně definitní matice, pak

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}) = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Y},$$

$$\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y})) = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}.$$

Je-li $\text{Var}(\mathbf{Y}) = \sigma^2\mathbf{V}$, kde \mathbf{V} je známá pozitivně definitní matice a $\sigma^2 > 0$ neznámé, pak

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}) = (\mathbf{F}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Y},$$

$$\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y})) = \sigma^2(\mathbf{F}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{F})^{-1}.$$

Nechť $\text{Var}(\mathbf{Y}) = \sum_{i=1}^p \vartheta_i \mathbf{V}_i$, kde \mathbf{V}_i jsou známé symetrické pozitivně semidefinitní matice, $\vartheta_i > 0$ neznámé parametry, $i = 1, \dots, p$ a nechť je dána aproximace $\boldsymbol{\vartheta}_0 = (\vartheta_{10}, \dots, \vartheta_{p0})'$, pak

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{Y}|\boldsymbol{\vartheta}_0) = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{Y},$$

$$\text{Var} \left(\hat{\beta}(\mathbf{Y}|\boldsymbol{\vartheta}_0) \right) = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{F})^{-1},$$

kde

$$\boldsymbol{\Sigma}_0 = \sum_{i=1}^p \vartheta_{i0} \mathbf{V}_i, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \sum_{i=1}^p \vartheta_i \mathbf{V}_i.$$

1.3 Maticový počet

Mají-li všechny složky náhodného vektoru $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)$ konečné druhé momenty, tj. $E(Y_j^2) < \infty$, $\forall j = 1, \dots, n$, lze pro každou dvojici Y_i, Y_j , $i \neq j$ určit kovarianci $\text{cov}(Y_i, Y_j)$.

Definice 1.2 Matice

$$\mathbf{C} = \text{Var } \mathbf{Y} = (\text{cov}(Y_i, Y_j))_{i,j=1}^n$$

se nazývá varianční matice náhodného vektoru.

Věta 1.4 *Varianční matice $\text{Var } \mathbf{Y}$ náhodného vektoru \mathbf{Y} je symetrická a pozitivně semidefinitní.*

Definice 1.3 Čtvercová matice $\mathbf{A}_{m \times m}$ se nazývá pozitivně semidefinitní, je-li symetrická a platí-li pro každý m -rozměrný vektor \mathbf{x} nerovnost $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0$. Píšeme $\mathbf{A} \geq 0$.

Definice 1.4 Čtvercová matice $\mathbf{A}_{m \times m}$ se nazývá pozitivně definitní, je-li symetrická a platí-li pro každý m -rozměrný vektor $\mathbf{x} \neq 0$ nerovnost $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$. Píšeme $\mathbf{A} > 0$.

Lemma 1.2 *Nechť \mathbf{A} je matice $m \times n$. Pak existuje alespoň jedna matice \mathbf{G} $n \times m$ s vlastností $\mathbf{A}\mathbf{G}\mathbf{A} = \mathbf{A}$. Matice \mathbf{G} je g -inverze matice \mathbf{A} .*

Lemma 1.3 *Nechť \mathbf{A} je matice $m \times n$. Pak existuje právě jedna matice \mathbf{A}^+ taková, že*

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A}, \quad \mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+, \quad \mathbf{A}\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}\mathbf{A}^+)', \quad \mathbf{A}^+\mathbf{A} = (\mathbf{A}^+\mathbf{A})'.$$

Matice \mathbf{A}^+ je Mooreova-Penroseova g -inverze matice \mathbf{A} .

Lemma 1.4 *Nechť \mathbf{F} je matice $n \times k$ a Σ je pozitivně semidefinitní matice $n \times n$.*

Pak

$$(\mathbf{M}_F \Sigma \mathbf{M}_F)^+ = \begin{cases} \Sigma^{-1} - \Sigma^{-1} \mathbf{F} (\mathbf{F}' \Sigma^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}' \Sigma^{-1}, & \Sigma \text{ je pozitivně definitní,} \\ \Sigma^+ - \Sigma^+ \mathbf{F} (\mathbf{F}' \Sigma^+ \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}' \Sigma^+, & \mathcal{M}(\mathbf{F}) \subset \mathcal{M}(\Sigma), \\ \mathbf{T}^+ - \mathbf{T}^+ \mathbf{F} (\mathbf{F}' \mathbf{T}^+ \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}' \mathbf{T}^+, & \text{jinak,} \end{cases}$$

$$\mathbf{T} = \Sigma + \mathbf{F} \mathbf{F}'.$$

1.3.1 Spektrální rozklad matice

Nechť \mathbf{A} je čtvercová matice $n \times n$. Spektrálním rozkladem matice rozumíme její rozklad na vlastní čísla a vlastní vektory, přičemž platí

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i', \quad \mathbf{f}_i' \mathbf{f}_j = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \end{cases}$$

kde $\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_i'$ jsou vlastní vektory a λ_i jsou vlastní čísla.

Definice 1.5 *Nechť \mathbf{A} je čtvercová matice. Platí-li pro skalár λ a vektor \mathbf{f} , $\mathbf{f}' \mathbf{f} = 1$, který je nenulový,*

$$\mathbf{A} \mathbf{f} = \lambda \mathbf{f}$$

řekneme, že λ je vlastní číslo matice \mathbf{A} a \mathbf{f} vlastní vektor matice \mathbf{A} příslušný vlastní hodnotě λ .

Věta 1.5 *Každý vlastní vektor matice je příslušný jediné vlastní hodnotě této matice.*

Vlastní čísla matice 2×2 získáme řešením rovnice

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = \lambda^2 - \text{Tr}(\mathbf{A})\lambda + \det(\mathbf{A}) = 0;$$

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Je to nutná a postačující podmínka pro existenci vlastního vektoru matice \mathbf{A} příslušného λ . Dosadíme λ do

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) \mathbf{f} = 0$$

a odtud získáme \mathbf{f} .

1.4 Lineární regresní model

Mějme náhodné veličiny Y_1, \dots, Y_n a matici daných čísel \mathbf{F} typu $n \times k$, kde $k < n$. Předpokládejme, že pro náhodný vektor $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)'$ platí $\mathbf{Y} = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\mathcal{E}}$, kde $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_k)'$ je vektor neznámých parametrů a $\boldsymbol{\mathcal{E}} = (\mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n)'$ je náhodný vektor splňující podmínky $E\boldsymbol{\mathcal{E}} = \mathbf{0}$, $\text{Var}\boldsymbol{\mathcal{E}} = \sigma^2\mathbf{I}$. Parametr $\sigma^2 > 0$ je neznámý. Tento model budeme nazývat regresní. Protože \mathbf{Y} závisí na $\boldsymbol{\beta}$ lineárně, mluvíme o lineárním regresním modelu.

Matrice \mathbf{F} musí mít lineárně nezávislé sloupce. Předpokládáme, že $k < n$, tedy $h(\mathbf{F}) = k$. Vektor $\mathbf{F}\boldsymbol{\beta}$ je nenáhodný, proto platí $E\mathbf{Y} = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}$ a $\text{Var}\mathbf{Y} = \sigma^2\mathbf{I}$.

Parametry β_1, \dots, β_k se odhadují metodou nejmenších čtverců, tj. z podmínky, že výraz $(\mathbf{Y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta})$ jakožto funkce $\boldsymbol{\beta}$ má být minimální.

Definice 1.6 $(1 - \alpha)$ - konfidenční oblast pro parametr $\boldsymbol{\beta}$ z třídy distribučních funkcí

$$\mathcal{F} = \{F(\cdot, \boldsymbol{\beta}) : \boldsymbol{\beta} \in \underline{\beta}(R^k)\}$$

je zobrazení $\mathcal{C}_\beta : R^n \rightarrow \mathcal{B}^k$ s vlastností

$$\forall(\boldsymbol{\beta} \in \underline{\beta}) \quad P_\beta\{\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{C}_\beta(\mathbf{Y})\} = 1 - \alpha.$$

Při konkrétním tvaru oblasti hovoříme například o konfidenčním intervalu nebo konfidenčním elipsoidu. Podrobněji viz [2] strana 87.

2 Postup výpočtu

Tato sekce je zpracována podle literatury [1], [2].

2.1 Linearizace modelu rozvojem do Taylorovy řady

Uvažujme regresní model

$$\mathbf{Y} \sim N_n[\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\Sigma}], \quad \boldsymbol{\beta} \in R^k,$$

kde \mathbf{f} je známá funkce, která má spojité druhé derivace, $\boldsymbol{\Sigma}$ je známá pozitivně definitní matice a R^k je k -dimenzionální lineární vektorový prostor. Je-li $\boldsymbol{\beta}_0$ známý vektor, lze model rozvinout do Taylorovy řady v bodě $\boldsymbol{\beta}_0$. Tento model nazveme modelem se slabou nelinearitou, jestliže v Taylorově řadě funkce $\mathbf{f}(\cdot)$ v přibližné hodnotě parametru $\boldsymbol{\beta}_0$ můžeme členy druhých a vyšších řádů zanedbat. Tedy odhad parametru může být určen lineárně, v případě normality observačního vektoru \mathbf{Y} lze použít standardní postupy také při určování konfidenčních oblastí a testování lineární hypotézy o parametrech. Musí se prověřit, zda je vliv zanedbaných členů zanedbatelný či nikoliv.

Dále budeme uvažovat nelineární model

$$\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n \left(\mathbf{F} \delta \boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\Sigma} \right), \quad \delta \boldsymbol{\beta} \in R^k, \quad (2)$$

kde $\delta \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0$, $\boldsymbol{\beta}_0$ je přibližná hodnota parametru $\boldsymbol{\beta}$,

$$\mathbf{f}_0 = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_0),$$

$$\mathbf{F} = \left. \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}'} \right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0},$$

$$\boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}) = (\delta \boldsymbol{\beta}' \mathbf{F}_1 \delta \boldsymbol{\beta}, \dots, \delta \boldsymbol{\beta}' \mathbf{F}_n \delta \boldsymbol{\beta})',$$

$$\mathbf{F}_i = \left. \frac{\partial^2 f_i(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}'} \right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Definice 2.1 Batesovy a Wattsovy míry křivosti modelu (2) v bodě β_0 jsou vnitřní křivost

$$K^{(int)}(\beta_0) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\kappa}'(\delta\beta)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\kappa}(\delta\beta)}}{\delta\beta'\mathbf{C}\delta\beta} : \delta\beta \in R^k \right\}$$

a parametrická křivost

$$K^{(par)}(\beta_0) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\kappa}'(\delta\beta)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\kappa}(\delta\beta)}}{\delta\beta'\mathbf{C}\delta\beta} : \delta\beta \in R^k \right\},$$

kde $\mathbf{C} = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}$, $\mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}} = \mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$, $\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}} = \mathbf{I} - \mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}$.

Poznámka 2.1 Obecná forma veličiny $K^{(int)}(\beta_0)$, $K^{(par)}(\beta_0)$ a dalších měř nelinearity je

$$C(\beta_0) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\alpha}'_{\delta u}\mathbf{S}\boldsymbol{\alpha}_{\delta u}}}{\delta\mathbf{u}'\mathbf{R}\delta\mathbf{u}} : \delta\mathbf{u} \in R^k \right\},$$

kde

$$\boldsymbol{\alpha}_{\delta u} = (\delta\mathbf{u}'\mathbf{A}_1\delta\mathbf{u}, \dots, \delta\mathbf{u}'\mathbf{A}_r\delta\mathbf{u})',$$

kde $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_r$ jsou $k \times k$ symetrické matice, \mathbf{S} je $r \times r$ pozitivně semidefinitní matice a \mathbf{R} je $k \times k$ pozitivně definitní matice.

Doporučuje se použít iterační proceduru pro určení $C(\beta_0)$.

1.krok: Zvolíme libovolný vektor $\delta\mathbf{u}_1 \in R^k$ takový, že $\delta\mathbf{u}'_1\delta\mathbf{u}_1 = 1$.

2.krok: Určíme vektor $\delta\mathbf{s}$

$$\delta\mathbf{s} = \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{A}_1\delta\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{A}_r\delta\mathbf{u}_1)\mathbf{S} \begin{pmatrix} \delta\mathbf{u}'_1\mathbf{A}_1\delta\mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \delta\mathbf{u}'_1\mathbf{A}_r\delta\mathbf{u}_1 \end{pmatrix}$$

a použijeme ho pro určení vektoru $\delta\mathbf{u}_2$

$$\delta\mathbf{u}_2 = \frac{\delta\mathbf{s}}{\sqrt{\delta\mathbf{s}'\delta\mathbf{s}}}.$$

3.krok: Jestliže $\delta \mathbf{u}'_2 \delta \mathbf{u}_1 \geq 1 - \varepsilon$, kde ε je dostatečně malé kladné číslo, iterační proces ukončíme a $C(\beta_0)$ je určeno hodnotou

$$C(\beta_0) = \frac{\sqrt{\alpha'_{\delta u_2} \mathbf{S} \alpha_{\delta u_2}}}{\delta \mathbf{u}'_2 \mathbf{R} \delta \mathbf{u}_2}.$$

Jestliže $\delta \mathbf{u}'_2 \delta \mathbf{u}_1 < 1 - \varepsilon$, vrátíme se k prvnímu kroku s vektorem $\delta \mathbf{u}_2$, který použijeme místo vektoru $\delta \mathbf{u}_1$.

2.1.1 Odhad parametru β

Věta 2.1 *Jestliže v modelu (2)*

$$\delta \beta \in \mathcal{L}_\alpha = \left\{ \delta \beta : \delta \beta' \mathbf{C} \delta \beta \leq \frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{K^{(int)}(\beta_0)} \right\},$$

kde δ_{max} splňuje rovnici

$$P \left\{ \chi_{n-k}^2(\delta_{max}) \leq \chi_{n-k}^2(0; 1 - \alpha) \right\} = 1 - (\alpha + \varepsilon),$$

pak

$$P \left\{ \mathbf{v}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{v} \leq \chi_{n-k}^2(0; 1 - \alpha) \right\} \geq 1 - (\alpha + \varepsilon),$$

kde $\mathbf{v} = \mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F} \hat{\delta} \beta$.

Důkaz: Nechceme, aby parametr necentrality

$$\begin{aligned} \delta &= E(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F} \delta \beta)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} E(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F} \delta \beta) = \\ &= \frac{1}{4} \boldsymbol{\kappa}'(\delta \beta) \left(\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}} \right)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}} \right) \boldsymbol{\kappa}(\delta \beta) = \frac{1}{4} \boldsymbol{\kappa}'(\delta \beta) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta \beta) \end{aligned}$$

překročil parametr necentrality δ_{max} , to znamená, že musí platit $\delta < \delta_{max}$.

Z definice veličiny $K^{(int)}(\beta_0)$ plyne

$$\boldsymbol{\kappa}'(\delta \beta) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}} \boldsymbol{\kappa}(\delta \beta) \leq [K^{(int)}(\beta_0)]^2 (\delta \beta' \mathbf{C} \delta \beta)^2.$$

Protože

$$[K^{(int)}(\beta_0)]^2 (\delta \beta' \mathbf{C} \delta \beta)^2 \leq \delta_{max} \quad \text{a} \quad \frac{1}{4} \boldsymbol{\kappa}'(\delta \beta) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}} \boldsymbol{\kappa}(\delta \beta) = \delta,$$

platí

$$4\delta = \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \leq [K^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)]^2(\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta})^2 \leq 4\delta_{max};$$

$$\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{K^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \implies \delta \leq \delta_{max}$$

$$\implies \mathbb{P}\{\chi_{n-k}^2(\delta) \leq \chi_{n-k}^2(0; 1 - \alpha)\} \geq 1 - \alpha - \varepsilon. \quad \square$$

Kvadratický člen $\frac{1}{2}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})$ může být zanedbán, jestliže je splněn předpoklad Věty 2.1. Jeho vliv na shodu mezi observačním vektorem \mathbf{Y} a linearizovaným modelem $\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n(\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\Sigma})$ je zanedbatelný. Je to charakterizováno hodnotou ε v hladině testu.

Věta 2.2 *Jestliže v modelu (2)*

$$\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_b = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{C_b}{K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\},$$

kde $C_b > 0$ je reálné dostatečně malé číslo, pak

$$\forall \{\mathbf{h} \in R^k\} |\mathbf{h}'\mathbf{b}| \leq C_b \sqrt{\mathbf{h}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{h}}.$$

Zde $\mathbf{b} = E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \boldsymbol{\beta} = \frac{1}{2}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})$ a $\mathbf{C} = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}$.

Důkaz:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) &= \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) = \\ &= \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) = 4(\mathbf{b}'\mathbf{C}\mathbf{b}). \end{aligned}$$

Z definice veličiny $K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)$ plyne

$$4(\mathbf{b}'\mathbf{C}\mathbf{b}) \leq (\delta\boldsymbol{\beta}'(\mathbf{F}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})\delta\boldsymbol{\beta})^2 [K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)]^2.$$

Chceme, aby

$$(\delta\boldsymbol{\beta}'(\mathbf{F}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})\delta\boldsymbol{\beta})^2 [K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)]^2 \leq C_b^2,$$

z toho dostaneme

$$\sqrt{\mathbf{b}'\mathbf{C}\mathbf{b}} \leq C_b \iff \forall \{\mathbf{h} \in R^k\} |\mathbf{h}'\mathbf{b}| \leq C_b \sqrt{\mathbf{h}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{h}}.$$

Poslední ekvivalence plyne z Schefféovy věty. \square

Věta 2.2 nám dává kritérium, podle kterého lze určit, zda vychýlenost $\mathbf{h}'\mathbf{b}$ lineárních odhadů každé funkce $h(\boldsymbol{\beta}_0 + \delta\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{h}'\boldsymbol{\beta}_0 + \mathbf{h}'\delta\boldsymbol{\beta}$ je dostatečně menší než standardní odchylka odhadu, to znamená $|\mathbf{h}'\mathbf{b}| \leq C_b\sqrt{\mathbf{h}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{h}}$. Číslo $C_b > 0$ je blízké nule.

Srovnáním linearizační oblasti \mathcal{L}_b s $(1 - \alpha)$ -konfidenčním elipsoidem \mathcal{E} pro dostatečně malé α určíme, zda $\delta\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^* - \boldsymbol{\beta}_0$ je prvkem linearizační oblasti \mathcal{L}_b . Jestliže $\mathcal{E} \subset \mathcal{L}_b$, pak může být použita linearizovaná verze modelu namísto kvadratické.

2.1.2 Linearizační oblast pro σ^2 a varianční komponenty

Je potřeba také odhadnout σ^2 v případě, že $\boldsymbol{\Sigma} = \sigma^2\mathbf{V}$, kde \mathbf{V} je známá pozitivně definitní matice. V linearizovaném modelu $\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim_n (\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{V})$ je nestranný odhad σ^2 dán vztahem

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})}{n - k} = \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0)'(\mathbf{M}_F\mathbf{V}\mathbf{M}_F)^+(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0)}{n - k}.$$

Věta 2.3 *Linearizační oblast pro odhad σ^2 je*

$$\mathcal{L}_{\sigma^2} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{F}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \sigma \frac{\sqrt{8\varepsilon(n - k)}}{K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\},$$

kde

$$K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\mathbf{V}^{-1}\mathbf{M}_F\mathbf{V}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})}}{\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}_0\delta\boldsymbol{\beta}} : \delta\boldsymbol{\beta} \in R^k \right\},$$

$$K^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0) = \sigma K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0), \quad \mathbf{C}_0 = \mathbf{F}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{F}.$$

Jestliže $\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_{\sigma^2}$, pak

$$\left| \sqrt{E(\hat{\sigma}^2)} - \sigma \right| \leq \varepsilon\sigma.$$

Důkaz: Statistika

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})}{n - k}$$

má necentrální rozdělení pravděpodobnosti

$$\sigma^2 \frac{\chi_{n-k}^2(\delta)}{n-k}, \text{ kde } \delta = \frac{1}{4\sigma^2} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F \mathbf{V} \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}).$$

Protože $E[\chi_{n-k}^2(\delta)] = n - k + \delta$, je

$$\begin{aligned} E\left[\sigma^2 \frac{\chi_{n-k}^2(\delta)}{n-k}\right] &= E(\hat{\sigma}^2) = \frac{\sigma^2}{n-k} \left(n - k + \frac{1}{4\sigma^2} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F \mathbf{V} \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \right) = \\ &= \sigma^2 + \frac{1}{4(n-k)} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F \mathbf{V} \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}). \end{aligned}$$

Z definice veličiny $K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)$ plyne

$$\frac{1}{4(n-k)} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F \mathbf{V} \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \leq (\delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{C}_0 \delta\boldsymbol{\beta})^2 [K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)]^2 \frac{1}{4(n-k)}.$$

Chceme, aby $\left| \sqrt{E(\hat{\sigma}^2)} - \sigma \right| \leq \varepsilon\sigma$. Jestliže

$$\delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{C}_0 \delta\boldsymbol{\beta} \leq \sigma \frac{\sqrt{8\varepsilon(n-k)}}{K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)},$$

pak

$$|E(\hat{\sigma}^2) - \sigma^2| \leq \varepsilon^2 \sigma^2. \quad \square$$

Pokud chceme určit oblast \mathcal{L}_{σ^2} , hodnota σ^2 musí být známá. Protože tato hodnota je odhadnutá, může být určen pouze odhad oblasti \mathcal{L}_{σ^2} . Platí, že čím je menší hodnota σ , tím menší bude linearizační oblast \mathcal{L}_{σ^2} . Tvar konfidenčního elipsoidu pro $\delta\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^* - \boldsymbol{\beta}_0$ a linearizační oblasti \mathcal{L}_{σ^2} je stejný, rozdílná je pouze velikost oblastí. Nutná podmínka pro to, aby $\mathcal{E} \subset \mathcal{L}_{\sigma^2}$ je

$$\sigma^2 \chi_k^2(0; 1 - \alpha) \ll \sigma \frac{\sqrt{8\varepsilon(n-k)}}{K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \iff \sigma \ll \frac{2}{\chi_k^2(0; 1 - \alpha)} \frac{\sqrt{2\varepsilon(n-k)}}{K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)}.$$

Dostatečně malý rozptyl tedy umožňuje linearizovat model s respektem k odhadu σ^2 .

Dále budeme uvažovat regresní model tvaru

$$\mathbf{Y} \sim_n \left(\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}), \sum_{i=1}^p \vartheta_i \mathbf{V}_i \right), \quad \boldsymbol{\beta} \in R^k$$

kde \mathbf{Y} je n -dimensionální náhodný vektor. Kovarianční matice má tvar $\sum_{i=1}^p \vartheta_i \mathbf{V}_i$. Zde $\boldsymbol{\vartheta} = (\vartheta_1, \dots, \vartheta_p)'$ je p -dimensionální vektor variančních komponent a $\boldsymbol{\vartheta} \in \underline{\vartheta} \subset R^p$. Matice $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_p$ jsou známé symetrické pozitivně semidefinitní a varianční komponenty $\vartheta_i > 0$, $i = 1, \dots, p$.

Předpokládejme, že máme model tvaru

$$\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n \left(\mathbf{F} \delta \boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}), \sum_{i=1}^p \vartheta_i \mathbf{V}_i \right), \quad (3)$$

kde

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_0 &= \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_0), \quad \mathbf{F} = \left. \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}'} \right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0}, \\ \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}) &= (\kappa_1(\delta \boldsymbol{\beta}), \dots, \kappa_n(\delta \boldsymbol{\beta}))', \\ \kappa_i(\delta \boldsymbol{\beta}) &= \delta \boldsymbol{\beta}' \left. \frac{\partial^2 f_i(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}'} \right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0} \delta \boldsymbol{\beta}, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Lineární verze modelu je

$$\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n \left(\mathbf{F} \delta \boldsymbol{\beta}, \sum_{i=1}^p \vartheta_i \mathbf{V}_i \right), \quad \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_0 + \delta \boldsymbol{\beta} \in R^k, \quad \boldsymbol{\vartheta} \in \underline{\vartheta}. \quad (4)$$

Předpokládáme, že hodnost matice \mathbf{F} je $h(\mathbf{F}) = k < n$ a $\forall \{\boldsymbol{\vartheta} \in \underline{\vartheta}\}$ $\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{\vartheta}) = \sum_{i=1}^p \vartheta_i \mathbf{V}_i$ je pozitivně definitní.

Nechť $\boldsymbol{\vartheta}_0$ je přibližná hodnota skutečné hodnoty vektoru $\boldsymbol{\vartheta}$, $\boldsymbol{\Sigma}_0 = \boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{\vartheta}_0)$.
Nechť matice $\mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}$, kde

$$\{\mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}\}_{i,j} = \text{Tr}[\mathbf{V}_i (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_j (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+], \quad i, j = 1, \dots, p \quad (5)$$

je regulární.

Lemma 2.1 V modelu (4) je nestranný kvadratický odhad vektoru $\boldsymbol{\vartheta}$ s minimální kovarianční maticí v bodě $\boldsymbol{\vartheta}_0$ dán vztahem

$$\hat{\boldsymbol{\vartheta}} = \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1} \begin{pmatrix} (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0)'(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_1 (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0) \\ \vdots \\ (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0)'(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_p (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0) \end{pmatrix} \quad (6)$$

a jeho kovarianční matice v bodě $\boldsymbol{\vartheta}_0$ je

$$\text{Var}_{\boldsymbol{\vartheta}_0}(\hat{\boldsymbol{\vartheta}}) = 2\mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1}.$$

Důkaz: viz [2] Věta IV.1.11.

Lemma 2.2 V modelu (3) pro vychýlenost odhadu $\hat{\boldsymbol{\vartheta}}$ platí

$$E_{\beta_0, \boldsymbol{\vartheta}}(\hat{\boldsymbol{\vartheta}}) - \boldsymbol{\vartheta} = \frac{1}{4} \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_1 (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_p (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \end{pmatrix}.$$

Důkaz: viz [1] strana 49.

Věta 2.4 Necht' $\mathbf{C}_0 = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{F}$, kde $\boldsymbol{\Sigma}_0 = \boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{\vartheta}_0)$. Jestliže

$$\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}_0\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{K_{\boldsymbol{\vartheta}_0}^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)}$$

$(K_{\boldsymbol{\vartheta}_0}^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0))$ je dán Definicí 2.1 kde $\mathbf{C} = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\mathbf{F}$, pak

$$\forall \{i = 1, \dots, p\} |E_{\beta_0, \boldsymbol{\vartheta}}(\hat{\vartheta}_i) - \vartheta_i| \leq \sum_{j=1}^p |k_{i,j}| \varepsilon^2,$$

kde

$$\mathbf{k}'_i = (k_{i,1}, \dots, k_{i,p}) = \left\{ \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1} \right\}_{i, \cdot} (\text{Diag}(\boldsymbol{\vartheta}_0))^{-1}, \quad i = 1, \dots, p.$$

Důkaz: Nechť

$$\hat{\zeta}_i = (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0)'(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_i (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0),$$

pak

$$\mathbb{E}(\hat{\zeta}_i) = \{\mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}\}_{i,\cdot} \boldsymbol{\vartheta} + \frac{1}{4} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_i (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}),$$

$i = 1, \dots, p$. Jestliže $\hat{\boldsymbol{\zeta}} = (\hat{\zeta}_1, \dots, \hat{\zeta}_p)'$, pak

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\boldsymbol{\vartheta}}) - \boldsymbol{\vartheta} &= \\ &= \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1} \left[\mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\boldsymbol{\zeta}}) - \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+} \boldsymbol{\vartheta} \right] = \\ &= \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_1 (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_p (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \end{pmatrix} = \\ &= \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1} [\text{Diag}(\boldsymbol{\vartheta}_0)]^{-1} \text{Diag}(\boldsymbol{\vartheta}_0) \times \\ &\quad \times \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_1 (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \mathbf{V}_p (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{k}'_1 \\ \vdots \\ \mathbf{k}'_p \end{pmatrix} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \vartheta_1^{(0)} \mathbf{V}_1 (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \vartheta_p^{(0)} \mathbf{V}_p (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Jelikož jsou matice $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_p$ pozitivně semidefinitní a $\vartheta_i > 0$, $i = 1, \dots, p$, platí $\mathcal{M}(\mathbf{V}_i) \subset \mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}_0)$. Díky tomu

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \vartheta_i^{(0)} \mathbf{V}_i (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \leq \\ &\leq \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\Sigma}_0 (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}). \end{aligned}$$

Dostáváme

$$\begin{aligned} |\mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\vartheta}_i) - \vartheta_i| &= \left| \frac{1}{4} \sum_{j=1}^p k_{i,j} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \vartheta_j^{(0)} \mathbf{V}_j (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \right| \leq \\ &\leq \frac{1}{4} \sum_{j=1}^p |k_{i,j}| \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) (\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+ \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}). \end{aligned}$$

Z definice $K_{\vartheta_0}^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)$ plyne

$$\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F\boldsymbol{\Sigma}_0\mathbf{M}_F)^+\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \leq \left(K_{\vartheta_0}^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)\right)^2 (\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}_0\delta\boldsymbol{\beta})^2.$$

Jestliže

$$\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}_0\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{K_{\vartheta_0}^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)},$$

pak

$$\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F\boldsymbol{\Sigma}_0\mathbf{M}_F)^+\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \leq 4\varepsilon^2$$

a tedy

$$|\mathbf{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\vartheta}_i) - \vartheta_i| \leq \frac{1}{4} \sum_{j=1}^p |k_{i,j}| \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})(\mathbf{M}_F\boldsymbol{\Sigma}_0\mathbf{M}_F)^+\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \leq \sum_{k=1}^p |k_{i,j}| \varepsilon^2,$$

$i = 1, \dots, p.$ \square

2.1.3 Konfidenční oblast

V modelu

$$\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n \left(\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\Sigma} \right), \quad \delta\boldsymbol{\beta} \in R^k,$$

uvažujme r -rozměrnou funkci $\mathbf{d}: R^k \rightarrow R^r$

$$\mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}_0) + \mathbf{D}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}_{\delta\boldsymbol{\beta}},$$

kde $\mathbf{D} = \partial\mathbf{d}(\boldsymbol{\beta})/\partial\boldsymbol{\beta}'|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0}$, $h(\mathbf{D}_{r,k}) = r \leq k$, $\boldsymbol{\alpha}_{\delta\boldsymbol{\beta}} = (\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{A}_1\delta\boldsymbol{\beta}, \dots, \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{A}_r\delta\boldsymbol{\beta})$,
 $\mathbf{A}_i = \partial^2 d_i(\boldsymbol{\beta})/\partial\boldsymbol{\beta}\partial\boldsymbol{\beta}'|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0}$, $i = 1, \dots, r$.

Věta 2.5 *Nechť α a η jsou dostatečně malá kladná reálná čísla a nechť ε^2 je řešení rovnice*

$$P\{\chi_r^2(\varepsilon^2) \leq \chi_r^2(0; 1 - \alpha)\} = 1 - \alpha - \eta.$$

Jestliže

$$\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_\varepsilon = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\},$$

pak

$$\mathcal{E}^* = \left\{ \mathbf{u} : (\mathbf{u} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\mathbf{u} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \left(\sqrt{\chi_r^2(0; 1 - \alpha)} + \varepsilon \right)^2 \right\}$$

pokrývá $\mathbf{D}\delta\boldsymbol{\beta}$ s pravděpodobností alespoň $(1 - \alpha - \eta)$. Zde $\mathbf{C} = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}$.

Důkaz: S ohledem na definici $K^{(par)}$ platí

$$\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \leq (\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta})^2 (K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0))^2.$$

Protože $4\mathbf{b}'\mathbf{C}\mathbf{b} = \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})$, platí implikace

$$\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \implies \mathbf{b}'\mathbf{C}\mathbf{b} \leq \varepsilon^2.$$

Potom pro $\mathbf{h} = \mathbf{D}'\mathbf{u}$ dostaneme

$$\forall \{\mathbf{u} \in R^r\} \quad \left| \mathbf{u}'\mathbf{D}[\mathbf{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta}] \right| \leq \varepsilon\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}'\mathbf{u}},$$

což je, vzhledem k Scheffého větě, ekvivalentní s nerovností

$$[\mathbf{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta}]'\mathbf{D}'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}\mathbf{D}[\mathbf{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta}] \leq \varepsilon^2.$$

Vychýlenost $\mathbf{D}[\mathbf{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta}]$ odhadu $\mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$ leží uvnitř elipsoidu

$$\{\mathbf{u} : \mathbf{u}'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}\mathbf{u} \leq \varepsilon^2\}. \quad (7)$$

Nechť $(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1} = \sum_{i=1}^r \lambda_i \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i'$ je spektrální rozklad matice $(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}$.

Konfidenční elipsoid v linearizovaném modelu je

$$\left\{ \mathbf{u} \in R^r : (\mathbf{u} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\mathbf{u} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \chi_r^2(0; 1 - \alpha) \right\}$$

a jeho poloosy a_i jsou $a_i = \sqrt{\chi_r^2(0; 1 - \alpha)}/\sqrt{\lambda_i}$, $i = 1, \dots, r$. Poloosy elipsoidu (7) jsou $\pi_i = \varepsilon/\sqrt{\lambda_i}$, $i = 1, \dots, r$. Elipsoid \mathcal{E}^* má poloosy $a_i + \pi_i$, $i = 1, \dots, r$ a pokrývá všechny $(1 - \alpha)$ -konfidenční elipsoidy v linearizovaném modelu, jejichž

středy se odchyľují od vektoru $\mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$ o vektory $\mathbf{D}[\mathbb{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta}]$, kde $\mathbb{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{E}^*$.
Náhodná veličina

$$(\mathbf{D}\delta\boldsymbol{\beta} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\mathbf{D}\delta\boldsymbol{\beta} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})$$

má $\chi_r^2(\delta)$ rozdělení s parametrem necentrality

$$\delta = \{\mathbf{D}[\mathbb{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta}]\}'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}\mathbf{D}[\mathbb{E}(\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \delta\boldsymbol{\beta}] < \varepsilon^2.$$

Jestliže η splňuje rovnost

$$P\{\chi_r^2(\varepsilon^2) \leq \chi_r^2(0; 1 - \alpha)\} = 1 - \alpha - \eta,$$

potom elipsoid \mathcal{E}^* pokrývá vektor $\mathbf{D}\delta\boldsymbol{\beta}$ s pravděpodobností větší nebo rovnou $1 - \alpha - \eta$. \square

Důsledek 2.1 Necht $\mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\beta}$. Jestliže

$$\delta\boldsymbol{\beta} \in \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\},$$

pak

$$\mathcal{E}^* = \left\{ \mathbf{u} : (\mathbf{u} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{C}(\mathbf{u} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \left(\sqrt{\chi_r^2(0; 1 - \alpha)} + \varepsilon \right)^2 \right\}$$

pokrývá $\delta\boldsymbol{\beta}$ s pravděpodobností alespoň $(1 - \alpha - \eta)$.

Definice 2.2 Míra nelinearity pro konfidenční elipsoid v uvažovaném modelu je

$$\begin{aligned} C_{d(\cdot), conf} &= \\ &= \sup \left\{ \frac{\sqrt{(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa})'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa})}}{\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta}} : \delta\boldsymbol{\beta} \in R^k \right\}. \end{aligned} \tag{8}$$

Zde předpokládáme, že $h(\mathbf{F}) = k < n$ a $\boldsymbol{\Sigma}$ je pozitivně definitní. Parametr $\boldsymbol{\alpha}$ je definován na straně 21.

Věta 2.6 *Nechť ε^2 splňuje rovnost*

$$P \{ \chi_r^2(\varepsilon^2) \leq \chi_r^2(0; 1 - \alpha) \} = 1 - \alpha - \eta, \quad (9)$$

kde α a η jsou pozitivní dostatečně malá reálná čísla. Nechť

$$\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_{d(\cdot), conf} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{C_{d(\cdot), conf}} \right\}.$$

Pak elipsoid

$$\mathcal{E}_{d(\cdot)} = \left\{ \mathbf{u} \in R^r : (\mathbf{u} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\mathbf{u} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \leq \left(\sqrt{\chi_r^2(0; 1 - \alpha)} + \varepsilon \right)^2 \right\} + \mathbf{D}\boldsymbol{\beta}_0$$

pokrývá vektor $\mathbf{D}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}(\delta\boldsymbol{\beta})$ s pravděpodobností větší nebo rovnou $1 - \alpha - \eta$.

Důkaz: Náhodná veličina

$$\left[\mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}) - \mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}_0) - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}} \right]' (\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1} \left[\mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}) - \mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}_0) - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}} \right]$$

má $\chi_r^2(\delta)$ rozdělení pravděpodobnosti s parametrem necentrality

$$\delta = \frac{1}{4} (\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa})' (\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1} (\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa})$$

pokud

$$E[\mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}) - \mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}_0) - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}] = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}).$$

Definice 2.2 veličiny $C_{d(\cdot), conf}$ implikuje

$$4\delta \leq (C_{d(\cdot), conf})^2 (\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta})^2.$$

Jestliže

$$\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq 2\varepsilon/C_{d(\cdot), conf},$$

pak $\delta \leq \varepsilon^2$ a vektor

$$E[\mathbf{d}\boldsymbol{\beta}_0 + \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}] - [\mathbf{d}(\boldsymbol{\beta}_0) + \mathbf{D}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}(\delta\boldsymbol{\beta})]$$

je prvkem elipsoidu

$$\{\mathbf{u} : \mathbf{u} \in R^r, \mathbf{u}'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}\mathbf{u} \leq \varepsilon^2\}.$$

Důkaz se dále provádí analogicky jako důkaz Věty 2.5. \square

Nyní uvažujme matici Σ tvaru $\Sigma = \sigma^2\mathbf{V}$, kde σ^2 je neznámý parametr a \mathbf{V} je pozitivně definitní. Pak linearizovaný tvar konfidenčního elipsoidu parametru $\delta\boldsymbol{\beta}$ je

$$\mathcal{E} = \left\{ \mathbf{u} : (\mathbf{u} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{F}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{F} (\mathbf{u} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq k\hat{\sigma}^2 F_{k,n-k}(0; 1 - \alpha) \right\}, \quad (10)$$

kde $\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$ je nejlepší nestranný lineární odhad $\delta\boldsymbol{\beta}$ a $\hat{\sigma}^2$ je standardní odhad σ^2 v linearizovaném modelu. Necht' v regulárním linearizovaném tvaru uvažovaného modelu platí

$$T(\delta\boldsymbol{\beta}) = U \frac{n-k}{k}, \quad U = \frac{(\delta\boldsymbol{\beta} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{F}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{F} (\delta\boldsymbol{\beta} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}})}{(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})}.$$

Pak $T(\delta\boldsymbol{\beta}^*)$ má Fisher-Snedecorovo rozdělení $F_{k,n-k}(\cdot)$ v souladu s linearizovanou verzí regresního modelu. Pro kvadratický model platí

$$(\delta\boldsymbol{\beta}^* - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{F}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{F} (\delta\boldsymbol{\beta}^* - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \sim \sigma^2 \chi_k^2(\delta_1),$$

kde

$$\delta_1 = \frac{1}{4\sigma^2} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) \mathbf{V}^{-1} \mathbf{P}_F^{V^{-1}} \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})$$

a

$$(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 - \mathbf{F}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \sim \sigma^2 \chi_{n-k}^2(\delta_2),$$

kde

$$\delta_2 = \frac{1}{4\sigma^2} \boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta}) \mathbf{V}^{-1} \mathbf{M}_F^{V^{-1}} \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}).$$

Hustota pravděpodobnosti náhodné veličiny $\chi_f^2(\delta)$ je

$$g_{f,\delta}(y) = \begin{cases} \exp[-(y + \delta)/2] \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(\frac{\delta}{2}\right)^r \frac{y^{r+(f/2)-1}}{2^{r+f/2} \Gamma(r+f/2)}, & y > 0, \\ 0, & y \leq 0, \end{cases}$$

hustota náhodné veličiny U je

$$g(u; \delta_1, \delta_2) = \int_0^\infty g_{k, \delta_1}(uv) g_{n-k, \delta_2}(v) v dv.$$

Nechť množina C_{δ_1, δ_2} je definována následovně

$$C_{\delta_1, \delta_2} = \left\{ (\delta_1, \delta_2) : \int_0^{\frac{n-k}{k} F_{k, n-k}(0; 1-\alpha)} g(u; \delta_1, \delta_2) du = 1 - \alpha - \varepsilon \right\}.$$

Věta 2.7 *Nechť má být v uvažovaném modelu zkonstruována konfidenční oblast pro parametr $\delta\boldsymbol{\beta}$. Nechť $\boldsymbol{\Sigma} = \sigma^2 \mathbf{V}$, kde σ^2 musí být odhadnutý. Jestliže $\delta\boldsymbol{\beta}$ leží v linearizační oblasti*

$$\mathcal{L}_{\delta_1, \delta_2} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{C} \delta\boldsymbol{\beta} < \frac{2\sqrt{\delta_1}}{K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \ \& \ \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{C} \delta\boldsymbol{\beta} < \frac{2\sqrt{\delta_2}}{K^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\},$$

kde (δ_1, δ_2) je prvkem množiny C_{δ_1, δ_2} a $\mathbf{C} = \mathbf{F}'(\sigma^2 \mathbf{V})^{-1} \mathbf{F}$, pak $\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_{\delta_1, \delta_2} \implies P\{\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{E}\} \geq 1 - \alpha - \varepsilon$, kde \mathcal{E} je dán vztahem (10).

Důkaz: viz [1] strana 64.

Při určování linearizační oblasti je třeba užít odhad $\hat{\sigma}^2$ místo σ^2 , protože σ^2 je neznámé.

Hodnoty $K^{(int)}$ a $K^{(par)}$ jsou obvykle různé. Tedy jejich vliv na oblast $\mathcal{L}_{\delta_1, \delta_2}$ je také různý. Aby nedošlo k upřednostňování jenoho parameru necentrality nad druhým, bereme v úvahu podmínku

$$\delta_1 / \delta_2 = (K^{(par)})^2 / (K^{(int)})^2.$$

Tedy vybereme takový bod (δ_1, δ_2) z množiny C_{δ_1, δ_2} , pro které daná podmínka platí.

2.1.4 Testování slabě nelineárních hypotéz

V modelu

$$\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n \left(\mathbf{F} \delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\Sigma} \right)$$

je testována nulová hypotéza

$$H_0 : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{0}$$

proti alternativě

$$H_a : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) \neq \mathbf{0}.$$

Zde $\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) = (\gamma_1(\delta\boldsymbol{\beta}), \dots, \gamma_h(\delta\boldsymbol{\beta}))'$, $\gamma_i(\delta\boldsymbol{\beta}) = \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{G}_i\delta\boldsymbol{\beta}$, $\mathbf{G}_i = \mathbf{G}'_i$, $i = 1, \dots, h$ a předpokládáme, že $h(\mathbf{F}_{n,k}) = k < n$, $\boldsymbol{\Sigma}$ je pozitivně definitní a $h(\mathbf{G}_{h,k}) = h < k$.

Dále uvažujme linearizovaný model

$$\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n(\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\Sigma})$$

a linearizované hypotézy

$$H_0 : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \quad \text{proti} \quad H_a : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0}.$$

Testovací statistika pro linearizovaný problém má tvar

$$(\mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1}\mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

a její rozdělení pravděpodobnosti je $\chi_h^2(\delta)$ s parametrem necentrality

$$\delta = \mathbf{E}(\mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1}\mathbf{E}(\mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}), \quad \mathbf{C} = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}.$$

Jestliže platí hypotéza H_0 , parametr necentrality δ_{H_0} má tvar

$$\begin{aligned} \delta_{H_0} &= \left[\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \right) \right]' (\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1} \left[\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) \right) \right] = \\ &= \left(\frac{1}{2}\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) - \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) \right)' (\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1} \left(\frac{1}{2}\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) - \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Definice 2.3 Uvažujme model $\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_n(\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\Sigma})$ a hypotézu $H_0 : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{0}$. Nechť míra nelinearity pro testování nulové hypotézy H_0 je

$$C_{H_0}^{(test)} = \sup \left\{ \frac{\sqrt{4\delta_{H_0}}}{\delta\mathbf{u}'\mathbf{K}'_G\mathbf{C}\mathbf{K}_G\delta\mathbf{u}} : \delta\mathbf{u} \in R^{k-h} \right\},$$

kde \mathbf{K}_G je $k \times (k - h)$ matice s vlastností $\mathcal{M}(\mathbf{K}_G) = \text{Ker}(\mathbf{G})$.

Lemma 2.3 *Nechť δ_{max} je řešením rovnice*

$$P\{\chi_h^2(\delta_{max}) \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha)\} = \alpha + \varepsilon. \quad (12)$$

Pak linearizační oblast pro testování hypotéz

$$H_0 : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{0} \quad \text{proti} \quad H_a : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) \neq \mathbf{0}$$

je

$$\mathcal{L}_{test, H_0} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} = \mathbf{K}_G \delta\mathbf{u} : \delta\mathbf{u}' \mathbf{K}'_G \mathbf{C} \mathbf{K}_G \delta\mathbf{u} \leq \frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{C_{H_0}^{(test)}} \right\},$$

to znamená

$$\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_{test, H_0} \implies P_{H_0} \left\{ (\mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1} \mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}} \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha) \right\} \leq \alpha + \varepsilon.$$

Tedy $\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_{test, H_0}$ zaručuje, že pravděpodobnost chyby I.druhu nenaroste o více než ε .

Důkaz: Zřejmě

$$4\delta_{H_0} \leq (\delta\mathbf{u}' \mathbf{K}'_G \mathbf{C} \mathbf{K}_G \delta\mathbf{u})^2 \left(C_{H_0}^{(test)} \right)^2.$$

Jestliže

$$\delta\mathbf{u}' \mathbf{K}'_G \mathbf{C} \mathbf{K}_G \delta\mathbf{u} \leq \frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{C_{H_0}^{(test)}}, \quad \text{pak} \quad \delta_{H_0} \leq \delta_{max}$$

$$\implies P \left\{ \chi_h^2(\delta_{H_0}) \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha) \right\} \leq P \left\{ \chi_h^2(\delta_{max}) \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha) \right\} = \alpha + \varepsilon.$$

□

Nechť je dána alternativní hypotéza $H_a : \mathbf{G}\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) = \Delta \neq \mathbf{0}$. Pak parametr necentrality testovací statistiky $(\mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1} \mathbf{G}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$ je

$$\begin{aligned} \delta &= \left[\frac{1}{2} \mathbf{G}\mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) + \Delta \right]' (\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1} \times \\ &\quad \times \left[\frac{1}{2} \mathbf{G}\mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) + \Delta \right]. \end{aligned}$$

Veličina δ může být rozložena do dvou částí, $\delta = \delta_{H_0} + \delta_\Delta$, kde δ_{H_0} je dán vztahem (11) a

$$\delta_\Delta = -2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{GC}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) \right)' (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta + \Delta' (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta.$$

Protože $\boldsymbol{\gamma}(\delta\boldsymbol{\beta}) = (\delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{G}_1 \delta\boldsymbol{\beta}, \dots, \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{G}_h \delta\boldsymbol{\beta})'$ a $\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta}) = (\delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{F}_1 \delta\boldsymbol{\beta}, \dots, \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{F}_n \delta\boldsymbol{\beta})'$, platí

$$\begin{aligned} \delta_\Delta = \sum_{i=1}^h \left(\delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{G}_i \delta\boldsymbol{\beta} - \sum_{j=1}^n \{ \mathbf{GC}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \}_{i,j} \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{F}_j \delta\boldsymbol{\beta} \right) \{ (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta \}_i + \\ + \Delta' (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta. \end{aligned}$$

Nechť

$$\mathbf{A}_\Delta = \sum_{i=1}^h \left(\mathbf{G}_i - \sum_{j=1}^n \{ \mathbf{GC}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \}_{i,j} \mathbf{F}_j \right) \{ (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta \}_i, \quad (13)$$

pak

$$\delta_\Delta = \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{A}_\Delta \delta\boldsymbol{\beta} + \Delta' (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta.$$

Síla testu v bodě $\Delta \neq \mathbf{0}$ je

$$P\{\chi_h^2(\delta_{H_0} + \delta_\Delta) \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha)\}.$$

Aby byla linearizace modelu možná, síla musí být větší než

$$P\{\chi_h^2[\Delta' (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta] \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha)\} - \varepsilon$$

pro dostatečně malé $\varepsilon > 0$. Nechť

$$P\{\chi_h^2(\delta_{min,\Delta}) \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha)\} = P\{\chi_h^2[\Delta' (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta] \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha)\} - \varepsilon. \quad (14)$$

Jestliže $\delta_{H_0} + \delta_\Delta \geq \delta_{min,\Delta}$, pak pravděpodobnost zamítnutí nulové hypotézy H_0 ve prospěch alternativní hypotézy $\Delta \neq \mathbf{0}$ je ovlivněna nelinearitou o méně než ε . Dokázali jsme tedy následující větu.

Věta 2.8 *Linearizační oblast pro alternativní hypotézu $\Delta \neq \mathbf{0}$ je*

$$\mathcal{L}_{test,\Delta} = \{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{A}_\Delta \delta\boldsymbol{\beta} + \Delta' (\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1} \Delta \geq \delta_{min,\Delta} \},$$

to znamená

$$\delta\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{L}_{test,\Delta} \implies P\{rej \Delta \neq \mathbf{0}\} \geq P\{\chi_h^2[\Delta' (\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{G}')^{-1} \Delta] \geq \chi_h^2(0; 1 - \alpha)\} - \varepsilon.$$

3 Řešení příkladu

V této části ukážeme příklady, které jasně demonstrují, kdy je možné použít lineární teorii a kdy nikoliv. Jsou zde ilustrovány oba případy.

3.1 Linearizovatelný model

Uvažujme trojúhelník, jehož vrcholy jsou v bodech $A=[1200,400]$, $B=[1800,300]$, $C=[\beta_1, \beta_2]$, přičemž hodnoty jsou dány v metrech. Skutečná hodnota parametru $\beta = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$ je $\beta^* = \begin{pmatrix} 1700 \\ 1100 \end{pmatrix}$. Dále víme, že směrodatná odchylka úhlu je v sexagesimální soustavě $\sigma = 20''$, což znamená, že v obloukové míře $\sigma = \frac{20}{206264.806}$ a směrodatná odchylka strany je $\sigma = 0.05 m$. Uvažujme tedy model

$$\mathbf{Y} \sim N_4(\mathbf{f}(\beta), \Sigma),$$

kde

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \left(\frac{20}{206264.806}\right)^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.05^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{20}{206264.806}\right)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.05^2 \end{pmatrix}.$$

Do vztahu

$$\mathbf{E}(\mathbf{Y}) = \mathbf{f}(\beta) = \begin{pmatrix} \arctan \frac{b_2 - a_2}{b_1 - a_1} - \arctan \frac{\beta_2 - b_2}{\beta_1 - b_1} \\ \sqrt{(b_1 - \beta_1)^2 + (b_2 - \beta_2)^2} \\ \arctan \frac{\beta_2 - a_2}{\beta_1 - a_1} - \arctan \frac{b_2 - a_2}{b_1 - a_1} \\ \sqrt{(\beta_1 - a_1)^2 + (\beta_2 - a_2)^2} \end{pmatrix}$$

dosadíme za a_1, a_2 souřadnice bodu A, za b_1, b_2 souřadnice bodu B a za β_1, β_2 skutečnou hodnotu parametru β , tím dostaneme bezchybná měření. Naměřené hodnoty získáme ze vztahu

$$\mathbf{Y} = \mathbf{E}(\mathbf{Y}) + \mathcal{E},$$

kde vektor chyb měření \mathcal{E} má normální rozdělení. Zvolíme si přibližnou hodnotu $\beta_0 = \begin{pmatrix} 1699.5 \\ 1100.5 \end{pmatrix}$. Linearizací funkce $\mathbf{f}(\beta)$ rozvojem do Taylorovy řady,

kde zanedbáme derivace druhého a vyšších řádů

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_0) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}'} \right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0} \delta \boldsymbol{\beta}, \quad \delta \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0,$$

obdržíme model

$$\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0 \sim N_4(\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\Sigma}).$$

Dále budeme uvažovat realizaci vektoru $\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0$ ve tvaru

$$\begin{pmatrix} 4.600252 \cdot 10^{-4} \\ -0.531836 \\ -7.894351 \cdot 10^{-4} \\ -0.162625 \end{pmatrix};$$

matice \mathbf{F} pro dané $\boldsymbol{\beta}_0$ je

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \frac{\beta_2 - b_2}{(\beta_1 - b_1)^2 + (\beta_2 - b_2)^2} & \frac{-(\beta_1 - b_1)}{(\beta_1 - b_1)^2 + (\beta_2 - b_2)^2} \\ \frac{-(b_1 - \beta_1)}{\sqrt{(\beta_1 - b_1)^2 + (\beta_2 - b_2)^2}} & \frac{-(b_2 - \beta_2)}{\sqrt{(\beta_1 - b_1)^2 + (\beta_2 - b_2)^2}} \\ \frac{-(\beta_2 - a_2)}{(\beta_1 - a_1)^2 + (\beta_2 - a_2)^2} & \frac{\beta_1 - a_1}{(\beta_1 - a_1)^2 + (\beta_2 - a_2)^2} \\ \frac{\beta_1 - a_1}{\sqrt{(\beta_1 - a_1)^2 + (\beta_2 - a_2)^2}} & \frac{\beta_2 - a_2}{\sqrt{(\beta_1 - a_1)^2 + (\beta_2 - a_2)^2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.229835 \cdot 10^{-3}; & 1.544015 \cdot 10^{-4} \\ -0.124569; & 0.992211 \\ -9.463652 \cdot 10^{-4}; & 6.748172 \cdot 10^{-4} \\ 0.580578 & 0.814204 \end{pmatrix}.$$

Spočítáme $\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$ vztahem $\delta\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{f}_0)$, kde

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 3.971680 \cdot 10^2; & 91.915627 \\ 91.915627; & 7.099356 \cdot 10^2 \end{pmatrix},$$

dosadíme ho do vzorce $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{\beta}_0 + \delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$ a dostaneme $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} 1699.938436 \\ 1100.002141 \end{pmatrix}$.

3.1.1 Vychýlenost odhadu parametru $\boldsymbol{\beta}$

Je potřeba zjistit, zda platí podmínka pro linearizaci modelu s respektem k vychýlenosti odhadu $\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}$, respektive $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. Sestrojíme konfidenční elipsu pro $\delta\boldsymbol{\beta}$

$$\mathcal{E} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : (\delta\boldsymbol{\beta} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{C} (\delta\boldsymbol{\beta} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \chi_2^2(0; 1 - \alpha) \right\}$$

a linearizační oblasti

$$\mathcal{L}_\alpha = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{C} \delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{K^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\},$$

$$\mathcal{L}_b = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{C_b}{K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\}.$$

Zvolíme si $C_b = 0.1$, $\alpha = 0.05$. Hodnoty $K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)$, $K^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)$ spočítáme pro $\varepsilon = 0.001$ postupem uvedeným v Poznámce 2.1, kdy za \mathbf{S} vezmeme matici $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}$ pro parametrickou křivost respektive $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}$ pro vnitřní křivost, za \mathbf{R} dosadíme matici \mathbf{C} a za \mathbf{A}_i matice \mathbf{F}_i ,

$$\mathbf{F}_i = \frac{\partial^2 f_i(\boldsymbol{\beta})}{\partial\boldsymbol{\beta}\partial\boldsymbol{\beta}'}, \quad i = 1, \dots, 4, \quad f_i \text{ jsou prvky vektoru } \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}). \quad (15)$$

Hodnotu

$$K^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{M}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})}}{\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta}} : \delta\boldsymbol{\beta} \in R^2 \right\} = 2.027941 \cdot 10^{-5},$$

dostaneme po 26 iteracích a pro získání

$$K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})}}{\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta}} : \delta\boldsymbol{\beta} \in R^2 \right\} = 8.599687 \cdot 10^{-5}$$

potřebujeme 4 iterace. Parametr necentrality δ_{max} , potřebný pro konstrukci \mathcal{L}_a , je určen z rovnice

$$P \{ \chi_{n-k}^2(\delta_{max}) \leq \chi_{n-k}^2(0; 1 - \alpha) \} = 1 - (\alpha + \varepsilon), \quad (16)$$

kde si zvolíme $\varepsilon = 0.04$. Při jejím řešení využijeme aproximace náhodné veličiny $\chi_{n-k}^2(\delta)$ náhodnou veličinou $c^2\chi_f^2(0)$ (podrobněji viz [2] str. 92), kde

$$f = \frac{((n-k) + \delta)^2}{(n-k) + 2\delta} = \frac{(2 + \delta)^2}{2 + 2\delta} \quad \text{a} \quad c^2 = \frac{(n-k) + 2\delta}{(n-k) + \delta} = \frac{2 + 2\delta}{2 + \delta}.$$

Rovnici (16) zapíšeme jako

$$P \{ c^2\chi_f^2(0) \leq \chi_{n-k}^2(0; 1 - \alpha) \} = P \left\{ \chi_f^2(0) \leq \frac{1}{c^2}\chi_{n-k}^2(0; 1 - \alpha) \right\} = 1 - \alpha - \varepsilon.$$

Platí

$$P \left\{ \chi_f^2(0) \leq \frac{1}{c^2} \chi_{n-k}^2(0; 1 - \alpha) \right\} = \int_{-\infty}^{\frac{5.99}{c^2}} g \, dy,$$

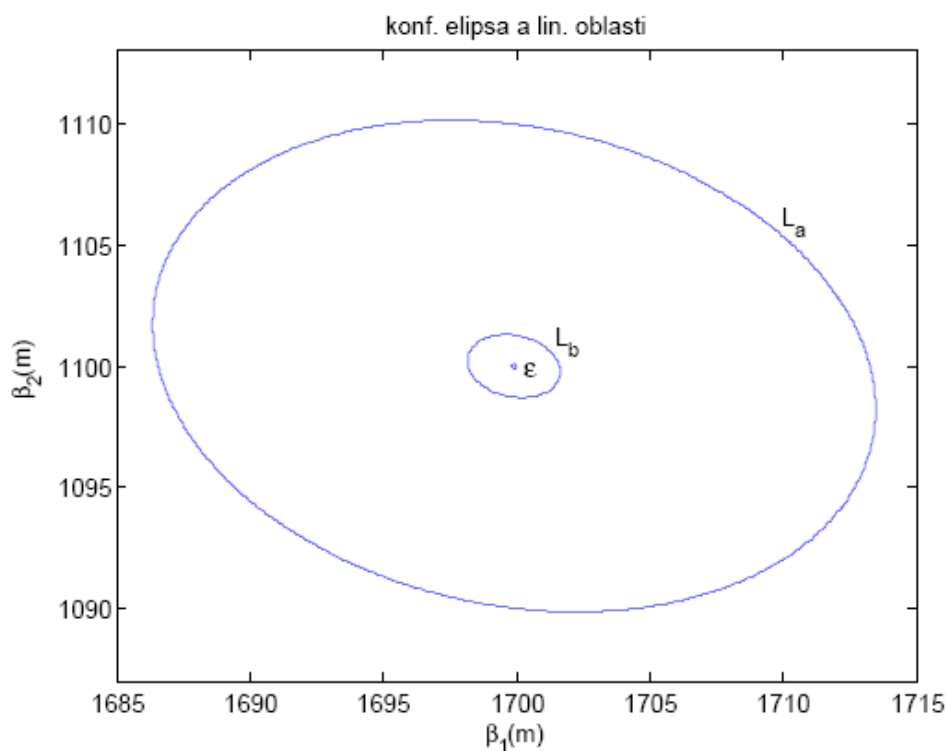
kde g je hustota χ^2 rozdělení s f stupni volnosti daná vztahem (1). Parametr δ_{max} vyhovující rovnici (16) má hodnotu 0.5161.

Obr. 1 znázorňuje konfidenční elipsu i obě linearizační oblasti. Jejich střed je umístěn do bodu $\hat{\beta}$. Všechny tři oblasti mají stejný tvar, liší se tedy pouze jejich velikostí. Ta je určena hodnotou pravé strany, to znamená

$$\chi_2^2(0; 1 - \alpha) = 5.99,$$

$$\frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{K^{(int)}(\beta_0)} = 70850.27,$$

$$\frac{C_b}{K^{(par)}(\beta_0)} = 1162.83.$$



Obr. 1: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizačních oblastí \mathcal{L}_a a \mathcal{L}_b

Obr. 1 poskytuje informaci o korektnosti linearizace. Oblast spolehlivosti \mathcal{E} leží uvnitř linearizačních oblastí \mathcal{L}_a i \mathcal{L}_b , což nám umožňuje použít linearizovaný model. Lze tedy říci, že linearizovaný model neodporuje datům.

Zpětně chceme prověřit správnost našeho řešení, tedy ukázat, že vychýlenost $\mathbf{b} = \mathbb{E}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \boldsymbol{\beta}$ skutečně leží v oblasti \mathcal{L}_b . Zvolíme $\boldsymbol{\beta}_0$ z kraje linearizační oblasti \mathcal{L}_b , například $\boldsymbol{\beta}_0 = \begin{pmatrix} 1701 \\ 1099 \end{pmatrix}$. Nasimulujeme hodnoty $\mathbf{Y}^{(i)} = \mathbb{E}(\mathbf{Y}) + \boldsymbol{\mathcal{E}}^{(i)}$, $i = 1, \dots, 10000$, které se liší pouze hodnotami chybových složek. Pro každé $\mathbf{Y}^{(i)}$ spočítáme $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(i)}$. Pro tyto hodnoty dostaneme vychýlenost \mathbf{b} následujícím způsobem

$$\mathbf{b} = \mathbb{E}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) - \boldsymbol{\beta}^* = \frac{1}{10000} \sum_{i=1}^{10000} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{(i)} - \boldsymbol{\beta}^*.$$

Pro \mathbf{b} musí platit

$$\mathbf{b}'[\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}})]^{-1}\mathbf{b} \leq C_b^2, \quad \text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1} = \mathbf{C}^{-1},$$

což je také v našem případě splněno. Při náhodném generování chybových složek $\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(i)}$ totiž dostaneme například

$$\mathbf{b}'\mathbf{C}\mathbf{b} = 6.141182 \cdot 10^{-4},$$

tedy hodnotu menší než $C_b^2 = 0.01$.

Zajímá nás, zda množství 10000 nasimulovaných hodnot je dostatečné. Pro ověření sestrojíme intervaly spolehlivosti (v tomto případě považujeme

$\left\{ \frac{1}{10000} \sum_{j=1}^{10000} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{(j)} \right\}_i$ za náhodnou veličinu)

$$-u \left(1 - \frac{\alpha}{2} \right) \leq \frac{\widehat{\mathbb{E}(\hat{\beta}_i)} - \beta_i - \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}) \right\}_i}{\sqrt{\frac{\{\mathbf{C}^{-1}\}_{ii}}{10000}}} \leq u \left(1 - \frac{\alpha}{2} \right), \quad i = 1, 2,$$

přičemž platí

$$\widehat{\mathbb{E}(\hat{\beta}_i)} = \left\{ \frac{1}{10000} \sum_{j=1}^{10000} \hat{\boldsymbol{\beta}}^{(j)} \right\}_i \sim_1 \left(\beta_i + \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}) \right\}_i; \frac{\{\mathbf{C}^{-1}\}_{ii}}{10000} \right).$$

Pokud hodnota $\beta_i + \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}) \right\}_i$ leží v intervalu

$$\left[\widehat{\mathbf{E}(\hat{\beta}_i)} - 1.96 \sqrt{\frac{\{\mathbf{C}^{-1}\}_{ii}}{10000}}; \widehat{\mathbf{E}(\hat{\beta}_i)} + 1.96 \sqrt{\frac{\{\mathbf{C}^{-1}\}_{ii}}{10000}} \right], \quad (17)$$

pak 10000 simulací stačí k tomu, abychom mohli říci, že výpočet je korektní. Z níže uvedeného je zřejmé, že intervaly tvaru (17) skutečně, s pravděpodobností alespoň 95%, pokrývají dané hodnoty.

$$\beta_1 + \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}) \right\}_1 = 1700.001059 \in [1699.999906; 1700.001890];$$

$$\beta_2 + \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta}) \right\}_2 = 1100.000633 \in [1099.999785; 1100.001279].$$

3.1.2 Linearizační oblast pro varianční komponenty

Pro tento příklad nás bude dále zajímat, zda je možné linearizovat model s respektem k odhadu variančních komponent. Varianční matici $\boldsymbol{\Sigma}$ lze rozepsat takto

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= \begin{pmatrix} \left(\frac{20}{206264.806}\right)^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.05^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{20}{206264.806}\right)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.05^2 \end{pmatrix} = \\ &= \left(\frac{20}{206264.806}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 0.05^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Porovnáme 95%-konfidenční oblast pro $\delta \boldsymbol{\beta}$ a linearizační oblast pro varianční komponenty, to znamená oblasti

$$\mathcal{E} = \left\{ \delta \boldsymbol{\beta} : (\delta \boldsymbol{\beta} - \delta \hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{C} (\delta \boldsymbol{\beta} - \delta \hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \chi_2^2(0; 1 - \alpha) \right\}$$

a

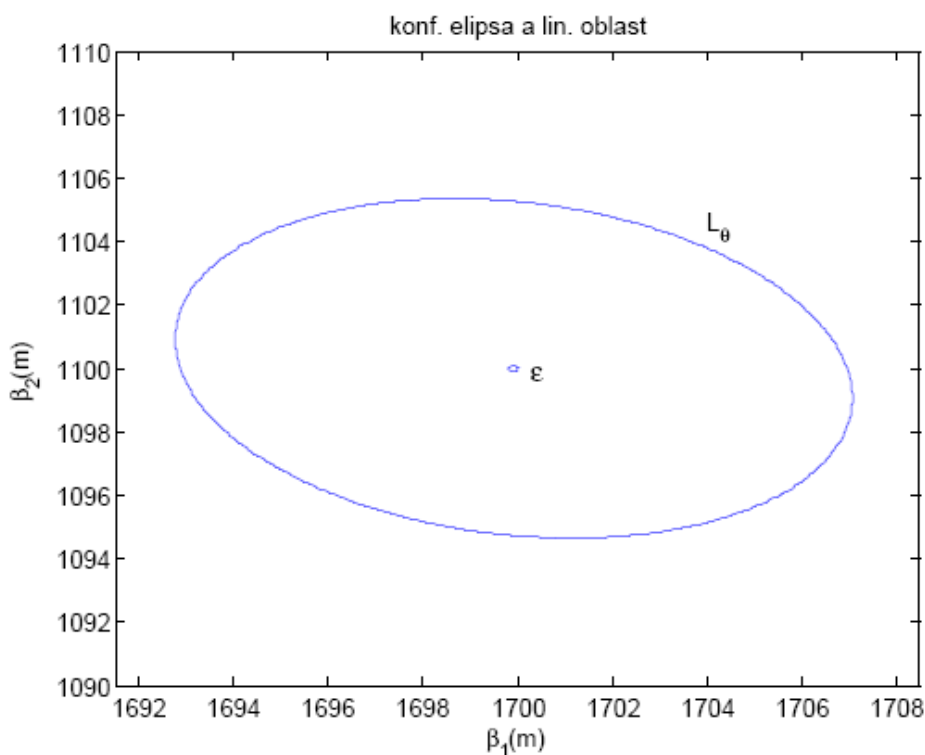
$$\mathcal{L}_{\vartheta} = \left\{ \delta \boldsymbol{\beta} : \delta \boldsymbol{\beta}' \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\vartheta}_0) \mathbf{F} \delta \boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{K_{\boldsymbol{\vartheta}_0}^{(int)}(\boldsymbol{\beta}_0)} \right\},$$

kde $\varepsilon = 0.2$ a za ϑ_0 dosadíme $\left(\left(\frac{20}{206264.806} \right)^2 \right)$, tedy skutečné hodnoty rozptylů.

Čili v našem případě platí $\Sigma(\vartheta_0) = \Sigma_0 = \Sigma$. Vnitřní křivost

$$K_{\vartheta_0}^{(int)}(\beta_0) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\kappa'(\delta\beta)\Sigma_0^{-1}\mathbf{M}_F^{\Sigma_0^{-1}}\kappa(\delta\beta)}}{\delta\beta'\mathbf{F}'\Sigma_0^{-1}\mathbf{F}\delta\beta} : \delta\beta \in R^2 \right\} = 2.027941 \cdot 10^{-5}$$

získáme opět postupem uvedeným v Poznámce 2.1 po 26 iteracích.



Obr. 2: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} pro $\delta\beta$ a linearizační oblasti \mathcal{L}_ϑ

Na obr. 2 je znázorněna konfidenční oblast \mathcal{E} a linearizační oblast \mathcal{L}_ϑ pro $\varepsilon = 0.2$. Velikost elips je určena hodnotami

$$\chi_2^2(0; 1 - \alpha) = 5.99, \quad \frac{2\varepsilon}{K_{\vartheta_0}^{(int)}(\beta_0)} = 19724.43,$$

tedy platí $\mathcal{E} \subset \mathcal{L}_\vartheta$.

Zpětné ověření vhodnosti linearizace se provede analogicky jako v případě

odhadu parametru β . Nasimulujeme hodnoty $\mathbf{Y}^{(i)}$ a spočítáme $\hat{\boldsymbol{\vartheta}}^{(i)}$, $i = 1, \dots, 10000$, podle vztahu (6).

Vychýlenost získáme takto

$$|\mathbb{E}(\hat{\boldsymbol{\vartheta}}) - \boldsymbol{\vartheta}^*| = \frac{1}{10000} \sum_{i=1}^{10000} \hat{\boldsymbol{\vartheta}}^{(i)} - \boldsymbol{\vartheta}^*.$$

Zvolíme-li β_0 z kraje oblasti \mathcal{L}_ϑ , musí být splněno

$$|\mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\vartheta}_i) - \vartheta_i^*| \leq \sum_{j=1}^2 |k_{i,j}| \varepsilon^2, \quad (18)$$

kde

$$\boldsymbol{\vartheta}^* = \left(\left(\frac{20}{206264.806} \right)^2 \right) \text{ a } \mathbf{k}'_i = \left\{ \mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1} \right\}_i [\text{Diag}(\boldsymbol{\vartheta}^*)]^{-1}, \quad i = 1, 2.$$

Uvažujme $\beta_0 = \begin{pmatrix} 1706 \\ 1102 \end{pmatrix}$ z kraje oblasti \mathcal{L}_ϑ pro $\varepsilon = 0.2$. Užijeme vztahu (5) pro prvky matice $\mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}$ a spočítáme

$$\mathbf{k}'_1 = (11.066825 \cdot 10^{-9}; -5.454039 \cdot 10^{-9}),$$

$$\mathbf{k}'_2 = (-1.450269 \cdot 10^{-3}; 5.557461 \cdot 10^{-3}).$$

Platí

$$|\mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\vartheta}_1) - \vartheta_1^*| \leq 0.2^2 (k_{1,1} + k_{1,2}) = 6.608345 \cdot 10^{-10}$$

a

$$|\mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\vartheta}_2) - \vartheta_2^*| \leq 0.2^2 (k_{2,1} + k_{2,2}) = 2.803092 \cdot 10^{-4},$$

neboť při náhodném generování chybových složek dojdeme například k hodnotám

$$|\mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\vartheta}_1) - \vartheta_1^*| = 2.790125 \cdot 10^{-11},$$

$$|\mathbb{E}_{\beta_0, \vartheta}(\hat{\vartheta}_2) - \vartheta_2^*| = 2.891803 \cdot 10^{-6}.$$

Tedy můžeme říct, že vychýlenost leží v linearizační oblasti \mathcal{L}_ϑ .

I zde je potřeba ověřit, zda je použití 10000 hodnot dostačující pro korektnost výsledku. Opět tedy sestrojíme konfidenční interval. Pro případ variančních komponent musí platit

$$-u \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right) \leq \frac{\widehat{\mathbb{E}(\vartheta_i)} - \vartheta_i}{\sqrt{\left\{2\mathbf{S}_{(\mathbf{M}_F \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{M}_F)^+}^{-1}\right\}_{ii}}} \leq u \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right), \quad \widehat{\mathbb{E}(\vartheta_i)} = \left\{ \frac{1}{10000} \sum_{j=1}^{10000} \hat{\vartheta}^{(j)} \right\}_i,$$

$i=1,2$. Pro takto velký počet simulací lze použít 0.975-kvantil normovaného normálního rozdělení, případně ho můžeme nahradit číslem 2. Toho se často v praxi využívá, neboť nelze říci, že odhady variančních komponent mají přímo normální rozdělení. Skutečně, hodnoty ϑ_i náležejí do daných intervalů spolehlivosti;

$$\vartheta_1 = \left(\frac{20}{206264.806} \right)^2 \in [-1.890014 \cdot 10^{-8}; 3.764788 \cdot 10^{-8}],$$

$$\vartheta_2 = 0.05^2 \in [-7.828986 \cdot 10^{-3}; 1.283477 \cdot 10^{-2}].$$

3.1.3 Konfidenční oblast

Nyní se budeme věnovat otázce, zda je možné model linearizovat s respektem ke konfidenční elipse \mathcal{E} . Sestrojíme konfidenční elipsu \mathcal{E} pro parametr $\delta\boldsymbol{\beta}$

$$\mathcal{E} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : (\delta\boldsymbol{\beta} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\delta\boldsymbol{\beta} - \mathbf{D}\delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \chi_2^2(0; 1 - \alpha) \right\} \stackrel{\mathbf{D}=\mathbf{I}}{=}$$

$$\stackrel{\mathbf{D}=\mathbf{I}}{=} \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : (\delta\boldsymbol{\beta} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}})' \mathbf{C} (\delta\boldsymbol{\beta} - \delta\hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \chi_2^2(0; 1 - \alpha) \right\}$$

a linearizační oblast

$$\mathcal{L}_{d(\cdot), conf} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}' \mathbf{C} \delta\boldsymbol{\beta} \leq \frac{2\varepsilon}{C_{d(\cdot), conf}} \right\},$$

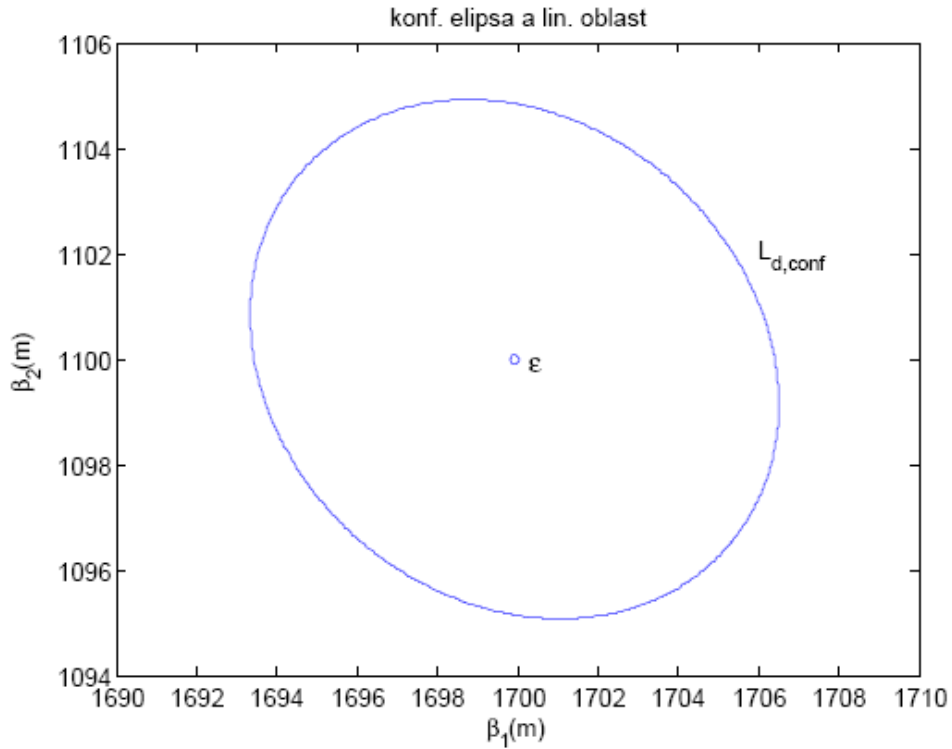
kde míra nelinearity $C_{d(\cdot), conf}$ daná vztahem (8) se pro $\mathbf{D} = \mathbf{I}$ shoduje s $K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0)$, což ukážeme v následujícím.

$$(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa})'(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}) =$$

$$\begin{aligned}
&= (\boldsymbol{\alpha}' - \boldsymbol{\kappa}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')(\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}')^{-1}(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}) \stackrel{\mathbf{D}=\mathbf{I}}{=} \\
&\stackrel{\mathbf{D}=\mathbf{I}}{=} (\boldsymbol{\kappa}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{C}^{-1})\mathbf{C}(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\kappa}) = \boldsymbol{\kappa}'(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1})\boldsymbol{\kappa} = \\
&= \boldsymbol{\kappa}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1})\boldsymbol{\kappa} \\
&\implies C_{d(\cdot),conf} = K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}_0) = \\
&= \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{P}_F^{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})}}{\delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{C}\delta\boldsymbol{\beta}} : \delta\boldsymbol{\beta} \in R^2 \right\} = 8.599243 \cdot 10^{-5}.
\end{aligned}$$

K jejímu získání potřebujeme 3 iterace při použití postupu v Poznámce 2.1.

Ke konstrukci linearizační oblasti je potřeba spočítat hodnotu parametru ε^2 , která je řešením rovnice (9), kde zvolíme $\alpha = 0.05$ a $\eta = 0.04$. Při jejím zjišťování postupujeme analogicky jako v případě hledání hodnoty δ_{max} potřebné ke konstrukci oblasti \mathcal{L}_α parametru $\boldsymbol{\beta}$. Dojdeme k výsledku $\varepsilon^2 = 0.5161$.



Obr. 3: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizační oblasti $\mathcal{L}_{d(\cdot),conf}$

Obr. 3 znázorňuje rozdílnost velikostí oblastí \mathcal{E} a $\mathcal{L}_{d(\cdot),conf}$. Vzhledem k tomu, že konfidenční elipsa \mathcal{E} je menší, a to výrazně, než linearizační oblast $\mathcal{L}_{d(\cdot),conf}$, což je vidět i z následujících výsledků

$$\chi_2^2(0; 1 - \alpha) = 5.99, \quad \frac{2\varepsilon}{K^{(par)}(\beta_0)} = 16708.47,$$

můžeme říci, že tento model lze linearizovat s respektem k elipse spolehlivosti \mathcal{E} .

3.1.4 Testování slabě nelineárních hypotéz

V této části budeme řešit, zda je možné pro uvažovaný model použít jeho lineární tvar při testování platnosti linearizovaných hypotéz. Testujeme hypotézu

$$H_0 : \beta_1^2 + \beta_2^2 = 4100000 \quad \text{proti} \quad H_a : \beta_1^2 + \beta_2^2 \neq 4100000,$$

tedy zda je součet druhých mocnin složek parametru β roven součtu druhých mocnin skutečných hodnot parametru, $\beta^* = \begin{pmatrix} 1700 \\ 1100 \end{pmatrix}$. Platí

$$\beta_1^2 + \beta_2^2 - 4100000 = \mathbf{G}\delta\beta + \frac{1}{2}\gamma(\delta\beta),$$

kde

$$\mathbf{G} = \left. \frac{\partial(\beta_1^2 + \beta_2^2 - 4100000)}{\partial\beta'} \right|_{\beta=\beta_0} = (2\beta_{10}, 2\beta_{20}) = (3399, 2201),$$

β_{10}, β_{20} jsou složky parametru β_0 ;

$$\begin{aligned} \gamma(\delta\beta) &= \delta\beta' \mathbf{G}_1 \delta\beta = \delta\beta' \frac{\partial^2(\beta_1^2 + \beta_2^2 - 4100000)}{\partial\beta\partial\beta'} \delta\beta = \\ &= \delta\beta' \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \delta\beta = 2\delta\beta_1^2 + 2\delta\beta_2^2. \end{aligned}$$

Abychom zjistili, zda je linearizace i v tomto případě možná, zkonstruuje opět 95%-konfidenční elipsu \mathcal{E} pro parametr $\delta\beta$ a porovnáme ji s linearizační oblastí

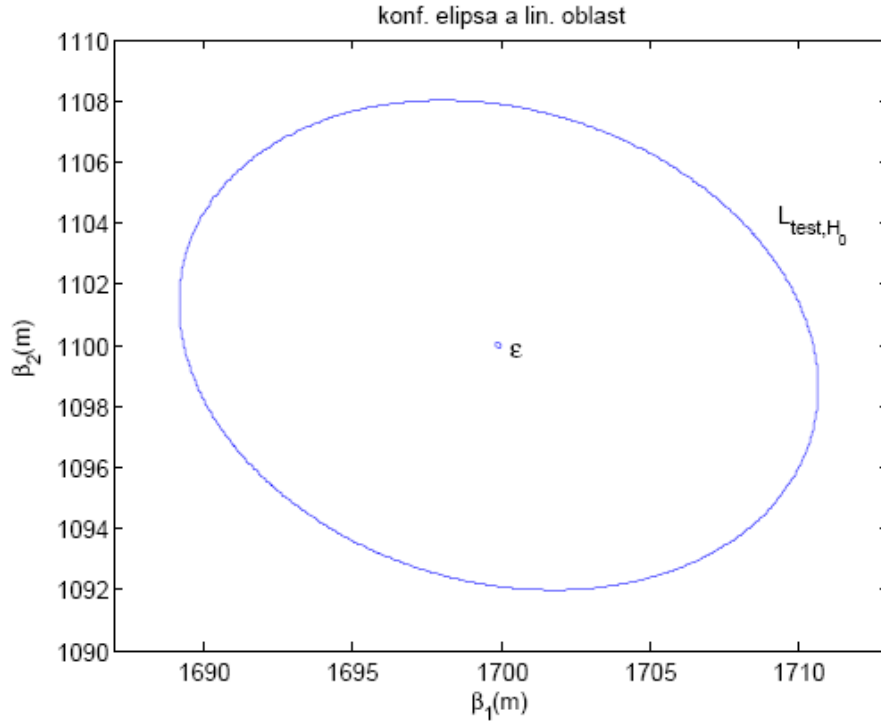
$$\mathcal{L}_{test,H_0} = \left\{ \delta\beta = \mathbf{K}_G \delta\mathbf{u} : \delta\mathbf{u}' \mathbf{K}'_G \mathbf{C} \mathbf{K}_G \delta\mathbf{u} \leq \frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{C_{H_0}^{(test)}} \right\}.$$

Parametr δ_{max} splňující vztah (12) má hodnotu 0.3591, $\mathbf{K}_G = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\beta_{10}} \\ -\frac{1}{2\beta_{20}} \end{pmatrix}$ a míru nelinearity vypočítáme následujícím způsobem

$$C_{H_0}^{(test)} = \sup \left\{ \frac{\sqrt{4\delta_{H_0}}}{\delta \mathbf{u}' \mathbf{K}'_G \mathbf{C} \mathbf{K}_G \delta \mathbf{u}} : \delta \mathbf{u} \in R^1 \right\} =$$

$$= 2 \left(\mathbf{K}'_G \left(\sum_{i=1}^4 \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{G} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{F}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right\}_i \mathbf{F}_i - \frac{1}{2} \mathbf{G}_1 \right) \mathbf{K}_G \right) \frac{\sqrt{(\mathbf{G} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{G}')^{-1}}}{\mathbf{K}'_G \mathbf{C} \mathbf{K}_G} = 2.706593 \cdot 10^{-5},$$

\mathbf{F}_i , $i = 1, \dots, 4$ jsou dány vztahem (15).



Obr. 4: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizační oblasti \mathcal{L}_{test, H_0}

Vezmeme-li v úvahu hypotézu H_0 , jinak řečeno, hypotézu H_0 nelze zamítnout, můžeme námi uvažovaný model a hypotézy linearizovat a dále pracovat s jejich lineárními tvary. Tuto situaci posuzujeme z obr. 4, z něhož je zřetelně vidět, že oblast $\mathcal{E} \subset \mathcal{L}_{test, H_0}$. Korektnost řešení ověříme porovnáním hodnot

$$\chi_2^2(0; 1 - \alpha) = 5.99 \ll \frac{2\sqrt{\delta_{max}}}{C_{H_0}^{(test)}} = 44280.73.$$

Podobnou úlohu lze řešit pro sílu testu v konkrétní alternativě. Pokud tedy nulovou hypotézu zamítneme, platí hypotéza alternativní, to v našem případě znamená

$$\beta_1^2 + \beta_2^2 - 4100000 = \Delta.$$

Vhodné Δ nalezneme pomocí linearizace hypotézy

$$(\beta_{10} + \delta\beta_1)^2 + (\beta_{20} + \delta\beta_2)^2 - 4100000 = \Delta;$$

$$(2\beta_{10}, 2\beta_{20}) \begin{pmatrix} \delta\beta_1 \\ \delta\beta_2 \end{pmatrix} - 4100000 + (\beta_{10}^2 + \beta_{20}^2) = \Delta.$$

Posuneme skutečnou hodnotu parametru β v x -ové souřadnici o 50 *cm* a v y -ové souřadnici o 0 *cm* a dostaneme

$$(2 \cdot 1699.5, 2 \cdot 1100.5) \begin{pmatrix} 0.50 \\ 0 \end{pmatrix} - 4100000 + (1699.5^2 + 1100.5^2) = 1100 = \Delta.$$

Stejně jako v předchozích případech, i zde, pro ověření vhodnosti linearizace modelu, sestrojíme konfidenční elipsu \mathcal{E} pro parametr $\delta\beta$ a linearizační oblast

$$\mathcal{L}_{test,\Delta} = \{ \delta\beta : \delta\beta' \mathbf{A}_\Delta \delta\beta + \Delta' (\mathbf{GC}^{-1} \mathbf{G}')^{-1} \Delta \geq \delta_{min,\Delta} \},$$

kde matice \mathbf{A}_Δ je daná vztahem (13),

$$\mathbf{A}_\Delta = \begin{pmatrix} -4.441375 \cdot 10^{-7} & 5.083973 \cdot 10^{-5} \\ 5.083973 \cdot 10^{-5} & 8.721446 \cdot 10^{-6} \end{pmatrix}.$$

Je potřeba znát hodnotu $\delta_{min,\Delta}$. Pro tuto neznámou musí při zvoleném $\alpha = 0.05$ a $\varepsilon = 0.04$ platit vztah (14), speciálně pro náš příklad

$$P\{\chi_1^2(\delta_{min,\Delta}) \geq \chi_1^2(0; 1 - \alpha)\} = P\{\chi_1^2(37.819827) \geq \chi_1^2(0; 1 - \alpha)\} = 0.04.$$

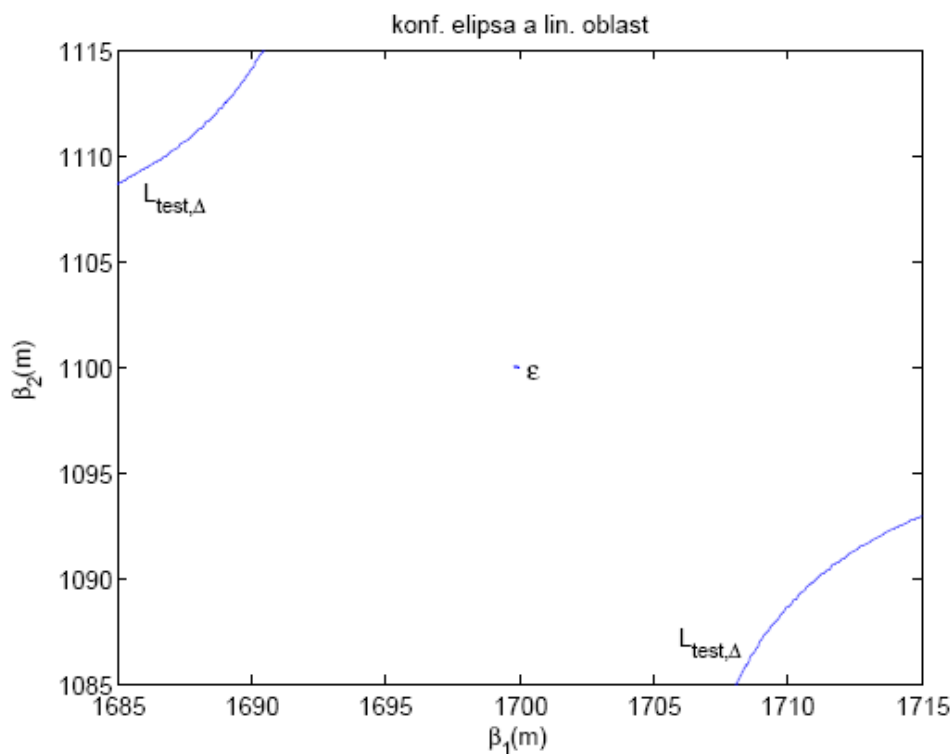
Provedeme analogicky postup, s jehož pomocí jsme získali δ_{max} při ověřování vhodnosti linearizace pro parametr β , to znamená, že použijeme aproximaci náhodné veličiny s necentrálním chí-kvadrát rozdělením náhodnou veličinou s centrálním chí-kvadrát rozdělením. Dostaneme $\delta_{min,\Delta} = 12.4688$ při $\Delta = 1100$.

Na obr. 5 vidíme konfidenční elipsu pro $\delta\boldsymbol{\beta}$ se středem v $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ a linearizační oblast $\mathcal{L}_{test,\Delta}$, jejíž střed je umístěn do $\boldsymbol{\beta}_0$. Je zřejmé, že na rozdíl od předchozích případů, kdy měly všechny linearizační oblasti tvar elipsy, má $\mathcal{L}_{test,\Delta}$ tvar hyperboly. Z obrázku je patrné, že při naší alternativě $\Delta = 1100$ je možné použít model i hypotézy v lineárním tvaru. I zde spočítáme hodnoty pravých stran;

$$\chi_2^2(0; 1 - \alpha) = 5.99,$$

$$\delta_{min} - \Delta'(\mathbf{GC}^{-1}\mathbf{G}')^{-1}\Delta = -25.35.$$

Vidíme tedy, že v úloze síly testu je situace opačná k předešlým případům.



Obr. 5: Porovnání konfidenční elipsy \mathcal{E} a linearizační oblasti $\mathcal{L}_{test,\Delta}$

3.2 Nelinearizovatelný model

V následujícím příkladě ukážeme, že skutečně ne každý model lze linearizovat. Uvažujme regresní model

$$\mathbf{Y} \sim N_{10}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}), \sigma^2\mathbf{I}), \quad \boldsymbol{\beta} \in R^2,$$

kde

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}) = 3 \cos \frac{2\pi}{\beta_1} t + 4 \sin \frac{2\pi}{\beta_1} t - 2 \cos \frac{2\pi}{\beta_2} t + 5 \sin \frac{2\pi}{\beta_2} t, \quad t = 1, \dots, 10.$$

Zajímá nás, jak se chová parametrický prostor R^2 v různých hodnotách parametru $\boldsymbol{\beta}$.

3.2.1 Vychýlenost odhadu parametru $\boldsymbol{\beta}$

Postup provedeme analogicky jako u předchozího příkladu. Tedy, spočítáme parciální derivace funkce $\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})$ podle $\boldsymbol{\beta}'$, dosadíme souřadnice bodů $[\beta_1, \beta_2]'$ a dostaneme matici \mathbf{F} ,

$$\{\mathbf{F}\}_i = \left(\frac{6\pi i \sin \frac{2\pi i}{\beta_1}}{\beta_1^2} - \frac{8\pi i \cos \frac{2\pi i}{\beta_1}}{\beta_1^2}; -\frac{4\pi i \sin \frac{2\pi i}{\beta_2}}{\beta_2^2} - \frac{10\pi i \cos \frac{2\pi i}{\beta_2}}{\beta_2^2} \right), \quad i = 1, \dots, 10.$$

Její velikost je 10×2 . Dále spočítáme matice \mathbf{F}_i vztahem

$$\mathbf{F}_i = \left. \frac{\partial^2 f_i(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}'} \right|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_0}, \quad i = 1, \dots, 10,$$

kde f_i jsou prvky vektoru $\mathbf{f}(\boldsymbol{\beta})$. Pro náš model mají linearizační oblasti \mathcal{L}_b tvar

$$\mathcal{L}_b = \left\{ \delta \boldsymbol{\beta} : \delta \boldsymbol{\beta}' \mathbf{C} \delta \boldsymbol{\beta} \leq \frac{C_b}{K^{(par)}(\boldsymbol{\beta})} \right\},$$

přičemž $K^{(par)}(\boldsymbol{\beta}) = \sigma K_0^{(par)}(\boldsymbol{\beta})$, kde

$$K_0^{(par)}(\boldsymbol{\beta}) = \sup \left\{ \frac{\sqrt{\boldsymbol{\kappa}'(\delta \boldsymbol{\beta}) \mathbf{P}_F \boldsymbol{\kappa}(\delta \boldsymbol{\beta})}}{\delta \boldsymbol{\beta}' (\mathbf{F}' \mathbf{F}) \delta \boldsymbol{\beta}} : \delta \boldsymbol{\beta} \in R^2 \right\}.$$

Parametrickou křivost $K_0^{(par)}(\boldsymbol{\beta})$ spočítáme pro zvolené $\varepsilon = 0.001$ opět postupem uvedeným v Poznámce 2.1. Tabulka 2.1 přehledně zobrazuje její hodnoty pro různé $\boldsymbol{\beta}$. Dále si zvolíme $\alpha = 0.05$ a $C_b = 0.1$. Elipsy spolehlivosti \mathcal{E} jsou konstruovány s pravděpodobností 95%,

$$\mathcal{E} = \left\{ \delta \boldsymbol{\beta} : (\delta \boldsymbol{\beta} - \delta \hat{\boldsymbol{\beta}})' (\mathbf{F}' \mathbf{F}) (\delta \boldsymbol{\beta} - \delta \hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \sigma^2 \chi_2^2(0; 1 - \alpha) \right\}.$$

β	$K_0^{(par)}(\beta)$
$[9, 5]'$	$8.317729 \cdot 10^{-2}$
$[6, 4]'$	$8.916235 \cdot 10^{-2}$
$[5, 9]'$	$8.723957 \cdot 10^{-2}$
$[4, 6]'$	$7.618460 \cdot 10^{-2}$
$[4, 12]'$	$9.081061 \cdot 10^{-2}$
$[8, 12]'$	$1.392266 \cdot 10^{-1}$
$[12, 4]'$	$1.049059 \cdot 10^{-1}$
$[12, 8]'$	$2.718323 \cdot 10^{-1}$
$[6, 11]'$	$1.138648 \cdot 10^{-1}$
$[11, 6]'$	$1.202542 \cdot 10^{-1}$
$[12, 11]'$	$5.883491 \cdot 10^{-1}$
$[10, 12]'$	$1.758460 \cdot 10^{-1}$
$[11, 12]'$	$9.726026 \cdot 10^{-2}$
$[12, 10]'$	2.689034

Tabulka 2.1: Tabulka hodnot $K_0^{(par)}(\beta)$ vyčíslených pro různé parametry β

Tabulku 2.1 vhodně doplňuje obr. 6 znázorňující konfidenční elipsy a linearizační oblasti \mathcal{L}_b vykreslené pro $\sigma^2 = 1$. V námi vymezené oblasti parametrického prostoru jsou zobrazeny pro několik bodů $\beta = [\beta_1, \beta_2]'$, které jsou jejich středem. Velikost parametrických křivostí naznačuje, že může nastat situace, že model nebude možné pro zvolené parametry linearizovat. K rozhodnutí nám pomůže právě grafické vyobrazení.

Užitečná jsou i čísla zde uvedená, která značí poměr délek hlavních poloos daných oblastí. Jedná se o poměr délky poloosy konfidenční elipsy ku délce poloosy linearizační oblasti, to znamená $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$, při značení

$a_{\mathcal{E}}$ jako délka hlavní poloosy konfidenční elipsy \mathcal{E} ,

$a_{\mathcal{L}}$ jako délka hlavní poloosy linearizační oblasti \mathcal{L}_b .

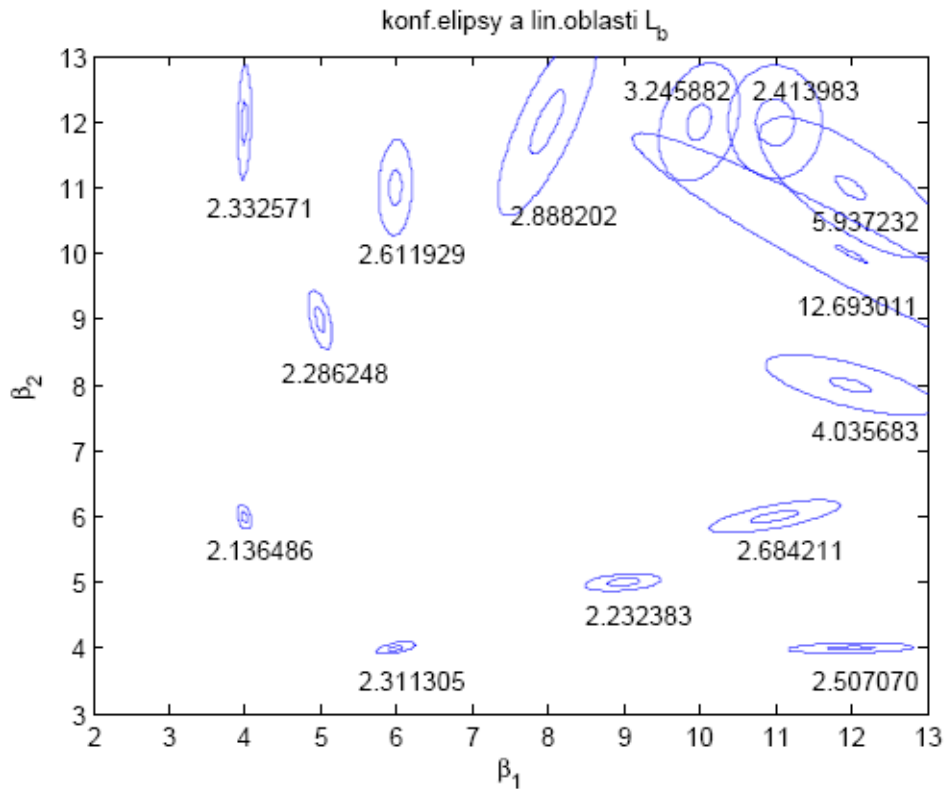
Vzhledem k velikosti poměru je zřejmé, že pro žádný bod β , pro který jsou dané oblasti konstruované, nelze model linearizovat.

Hodnoty délek hlavních poloos získáme pomocí rozkladu matice \mathbf{C}^{-1} na vlastní čísla λ_i a vlastní vektory \mathbf{f}_i , $i = 1, 2$ (spektrální rozklad). Máme-li tyto hodnoty,

umíme sestavit obecnou rovnici elipsy

$$\frac{[(\delta\beta_1, \delta\beta_2)\mathbf{f}_1]^2}{\text{pravá strana} \cdot \lambda_1} + \frac{[(\delta\beta_1, \delta\beta_2)\mathbf{f}_2]^2}{\text{pravá strana} \cdot \lambda_2} = 1,$$

(více o rovnicích kuželoseček viz [6]). Pojem pravá strana v předchozí rovnici znamená $\sigma^2 \chi_2^2(0; 1 - \alpha)$ pro konfidenční elipsu a $\frac{C_b}{\sigma K_0^{(par)}(\boldsymbol{\beta})}$ pro oblast \mathcal{L}_b .

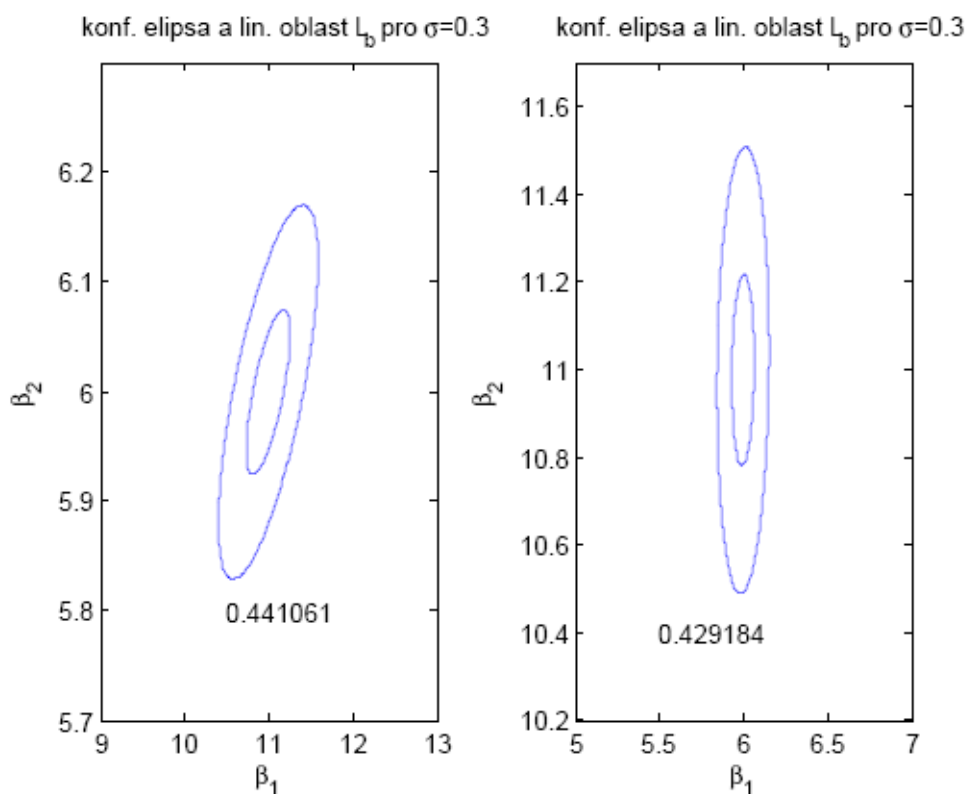


Obr. 6: Konfidenční elipsy a linearizační oblasti pro různé body $[\beta_1, \beta_2]'$ s hodnotami poměrů délek jejich hlavních poloos $a_E/a_{\mathcal{L}}$

Zmenšením hodnoty σ se zmenšuje oblast spolehlivosti i linearizační oblast, rozdíl je ovšem v rychlosti zmenšování. Platí, že konfidenční elipsa \mathcal{E} se zmenšuje rychleji než oblast \mathcal{L}_b . Čili ke každému bodu $[\beta_1, \beta_2]'$ existuje takové σ , že $\mathcal{E} \subset \mathcal{L}_b$. Ukážeme to například v bodech $[11, 6]'$ a $[6, 11]'$.

Pro zřetelnost jsou poměry poloosy elipsy \mathcal{E} ku poloose oblasti \mathcal{L}_b uvedeny na obr. 6 i obr. 7. Umožní nám to vidět změnu, která nastane, když zmenšíme σ . Jak již bylo zmíněno, původně byly oblasti \mathcal{E} a \mathcal{L}_b vykresleny pro $\sigma = 1$.

Poměr jejich poloos v bodech $[11, 6]'$, $[6, 11]'$ je dán hodnotou 2.684211, respektive 2.611929. Srovnáme je s poměry poloos uvedenými na obr. 7, tedy 0.441061, respektive 0.429184. Z hodnot je jasné, že pro $\sigma = 0.3$ je možné model v těchto dvou bodech linearizovat, neboť $\mathcal{E} \subset \mathcal{L}_b$.



Obr. 7: Konfidenční elipsy a linearizační oblasti se středem v bodech $[11, 6]'$ a $[6, 11]'$ s hodnotami poměrů délek jejich hlavních poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$

Pro body na diagonále uvažujeme model s jedním neznámým parametrem, to znamená

$$\mathbf{Y} \sim N_{10}(\mathbf{f}(\beta), \sigma^2 \mathbf{I}), \quad \beta \in R^1,$$

kde

$$\mathbf{f}(\beta) = 3 \cos \frac{2\pi}{\beta_1} t + 4 \sin \frac{2\pi}{\beta_1} t - 2 \cos \frac{2\pi}{\beta_1} t + 5 \sin \frac{2\pi}{\beta_1} t, \quad t = 1, \dots, 10.$$

Opět se zabýváme pouze některými body zvolené oblasti. Zde samozřejmě postupujeme analogicky jako u bodů mimo diagonálu. S tím rozdílem, že situace je

jednodušší, neboť, jak již bylo zmíněno, máme model s pouze jedním parametrem. Poměr hlavní poloosy konfidenční oblasti ku hlavní poloose linearizační oblasti $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ nám odpoví na otázku, zda je možné v těchto bodech model linearizovat. Z výsledků v tabulce 2.2 je patrné, že nikoliv. Vzhledem k tomu, že máme pouze jeden neznámý parametr, oblastí spolehlivosti \mathcal{E} je interval. Stejně tak linearizační oblast \mathcal{L}_b je intervalem.

β	poměr poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$	$K_0^{(par)}(\beta)$
$[4, 4]'$	14.269978	5.300910
$[8, 8]'$	19.261448	9.657878
$[12, 12]'$	2.061625	$1.106428 \cdot 10^{-1}$

Tabulka 2.2: Tabulka poměrů velikostí hlavních poloos konfidenčních a linearizačních oblastí $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ pro $\sigma = 1$ a hodnot $K_0^{(par)}(\beta)$ v bodech na diagonále

V tomto případě tedy nelze použít teorii pro lineární regresní model, ale je potřeba zabývat se přímo nelineárním modelem a použít teorii jemu určenou. Jednodušším řešením je ovšem nalézt takové $\sigma < 1$, které linearizaci modelu umožní. Abychom mohli použít lineární tvar, musí být splněna podmínka

$$\frac{C_b}{\sigma K_0^{(par)}(\beta)} > \sigma^2 \chi_1^2(0; 1 - \alpha),$$

to znamená, že pro σ platí

$$\sigma < \sqrt[3]{\frac{C_b}{\chi_1^2(0; 1 - \alpha) K_0^{(par)}(\beta)}} = \sqrt[3]{\frac{0.1}{3.84 K_0^{(par)}(\beta)}}. \quad (19)$$

Tabulka 2.3 zobrazuje, pro námi zvolené body, poměry hlavních poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ oblastí \mathcal{E} a \mathcal{L}_b pro různé parametry σ , které splňují vztah (19).

β	poměr poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$	σ
$[4, 4]'$	0.913279	0.16
$[8, 8]'$	0.902826	0.13
$[12, 12]'$	0.982210	0.61

Tabulka 2.3: Tabulka poměrů velikostí hlavních poloos konfidenčních a linearizačních oblastí $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ v bodech na diagonále pro různé hodnoty σ

3.2.2 Linearizační oblast pro σ^2

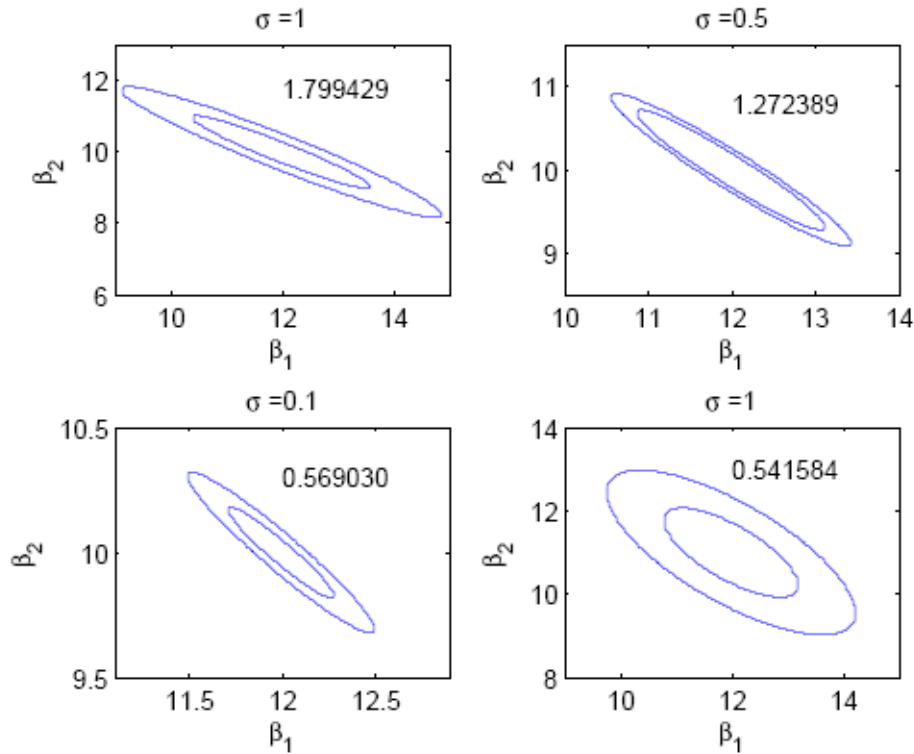
Nyní prozkoumáme, jestli je možné linearizovat model s respektem k σ^2 . Zkonstruujeme 95%-konfidenční elipsu \mathcal{E} a linearizační oblast

$$\mathcal{L}_{\sigma^2} = \left\{ \delta\boldsymbol{\beta} : \delta\boldsymbol{\beta}'\mathbf{F}'\mathbf{F}\delta\boldsymbol{\beta} \leq \sigma \frac{\sqrt{8\varepsilon 8}}{K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta})} \right\},$$

pro $\varepsilon = 0.2$ a různé σ , kde křivost

$$K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta}) = \sup \left\{ \frac{\boldsymbol{\kappa}'(\delta\boldsymbol{\beta})\mathbf{M}_F\boldsymbol{\kappa}(\delta\boldsymbol{\beta})}{\delta\boldsymbol{\beta}'(\mathbf{F}'\mathbf{F})\delta\boldsymbol{\beta}} : \delta\boldsymbol{\beta} \in R^2 \right\}$$

hledáme při zvoleném $\varepsilon = 0.001$. Pro ilustraci této situace se zaměříme pouze na některé body.



Obr. 8: Porovnání konfidenčních elips a linearizačních oblastí \mathcal{L}_{σ^2} pro různé hodnoty $\boldsymbol{\beta}$ a σ s uvedenými hodnotami poměrů délek jejich hlavních poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$

Hodnota vnitřní křivosti pro námi zvolené parametry je

pro bod $[12, 10]'$ rovna 1.933489,

pro bod $[12, 11]'$ rovna $1.751472 \cdot 10^{-1}$.

Pro lepší názornost jsou k obr. 8 uvedeny poměry $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ velikostí hlavních poloos oblastí \mathcal{E} a \mathcal{L}_{σ^2} , při značení

$a_{\mathcal{E}}$ jako délka hlavní poloosy konfidenční elipsy \mathcal{E} ,

$a_{\mathcal{L}}$ jako délka hlavní poloosy linearizační oblasti \mathcal{L}_{σ^2} .

Postup nalezení hodnot délek hlavních poloos pro \mathcal{E} a \mathcal{L}_{σ^2} se samozřejmě provede analogicky jako pro předchozí případ, to znamená pro konfidenční oblast \mathcal{E} a linearizační oblast \mathcal{L}_b . Přičemž pojem pravá strana tentokrát znamená $\sigma \frac{\sqrt{8\varepsilon_8}}{K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta})}$ pro \mathcal{L}_{σ^2} a $\sigma^2 \chi_2^2(0; 1-\alpha)$ pro oblast \mathcal{E} . Obr. 8 je rozdělen do čtyř částí, z nichž hned tři zobrazují oblasti konstruované pro tentýž bod, ovšem s využitím různých hodnot σ . Je zřetelné, že s menším σ se oblasti zmenšují. Rozdíl v rychlosti zmenšování není sice tak výrazný jako v případě linearizačních oblastí \mathcal{L}_b pro parametr $\boldsymbol{\beta}$, nicméně i zde může dojít k tomu, že pro určité σ už linearizace modelu bude možná. Čtvrtá část obr. 8 demonstruje možnost linearizace modelu pro bod $\boldsymbol{\beta} = [12, 11]'$ a $\sigma = 1$.

Jak nám ukazují výsledky zapsané v obr. 8, linearizovat lze model v bodě $[12, 10]'$ pro $\sigma = 0.1$. Na tomto příkladě je vidět, že při nesplněných podmínkách potřebných k linearizaci modelu je jedním z východisek pro řešení problému změnit experiment tak, aby disperze byla výrazně menší.

Nyní se budeme opět věnovat bodům na diagonále.

$\boldsymbol{\beta}$	$K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta})$	poměr poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ ($\sigma=1$)	poměr poloos $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$
$[4, 4]'$	11.216778	3.470401	0.981578 ($\sigma=0.08$)
$[8, 8]'$	26.086307	5.292391	0.916669 ($\sigma=0.03$)
$[12, 12]'$	47.210783	7.119774	0.711977 ($\sigma=0.01$)

Tabulka 2.4: Tabulka poměrů velikostí hlavních poloos konfidenčních a linearizačních oblastí $a_{\mathcal{E}}/a_{\mathcal{L}}$ v bodech na diagonále pro $\sigma = 1$ a pro hodnoty σ , které umožňují model linearizovat

Tabulka 2.4 zobrazuje vysoké hodnoty vnitřní křivosti pro parametr σ^2 , které způsobují, že model pro $\sigma = 1$ nelze linearizovat. Vidíme, že parametry σ , které jsou hledány jako východisko z této situace, je potřeba zvolit výrazně menší. Musí splňovat

$$\sigma < \frac{\sqrt{8\varepsilon\delta}}{\chi_1^2(0; 1 - \alpha) K_0^{(int)}(\boldsymbol{\beta})}.$$

3.2.3 Konfidenční oblast a testování slabě nelineárních hypotéz

Vzhledem k tomu, že pro $\sigma^2 = 1$ model nelze ve vybraných bodech $\boldsymbol{\beta} = [\beta_1, \beta_2]'$ linearizovat, nemá pro tyto hodnoty parametrů smysl zkoumat, zda je či není možné použít konfidenční elipsy lineárního modelu, respektive testovat lineární hypotézy o parametrech.

Závěr

V této práci jsme se zabývali problémem nelinearity regresního modelu. Posuzovali jsme, zda je možné zjednodušit si situaci převedením modelu na jeho lineární tvar, jinak řečeno, jeho linearizací. Zajímalo nás, zda jsou při zanedbání kvadratických členů všechna kritéria, pro linearizaci potřebná, splněna.

Stěžejním pojmem diplomové práce jsou bezpochyby míry nelinearity. Tyto hodnoty nám umožnily nalézt linearizační oblasti, jejichž velikosti rozhodovaly o možnosti použití linearizovaného modelu pro další aplikace. Zabývali jsme se dvěma konkrétními modely, na nichž jsme demonstrovali použití teorie. Pro ilustraci problematiky jsme zvolili jeden model linearizovatelný a druhý nelinearizovatelný. Početní část je rozdělena do několika podkapitol, kde jsme zkoumali možnost linearizace modelu z různých hledisek. Konkrétně se jednalo o nalezení míry nelinearity pro odhad parametrů prvního a druhého řádu, konfidenční oblast a konečně i pro test nelineární hypotézy nelineárního regresního modelu.

Koncepce tvorby linearizačních oblastí vychází z infinitezimálních posunů parametrů. V některých příznivých situacích může linearizační oblast vyjít až nerealisticky velká. To se může dít v případě, že použité derivace se blíží nule. V takové situaci je potřeba s linearizační oblastí pracovat s určitou opatrností.

Na prvním příkladu jsme ukázali, že mají-li míry nelinearity malé hodnoty, je linearizace kvadratického modelu s výhodou využitelná. Naopak, jak bylo vidět u druhého případu, jakmile vyjdou míry nelinearity v řádu desetin, případně i setin, nelze nelineární model nahradit jeho linearizovanou verzí. Příklad nelinearizovatelného modelu demonstroval, že vhodnou změnou parametrů, zde se jednalo o zmenšení σ , lze umožnit linearizaci modelu. Nutno ovšem podotknout, že ne vždy lze změnu provést.

Tato práce se týkala pouze modelů bez podmínek, takže by jistě bylo zajímavé prozkoumat možnost linearizace u modelů s podmínkami. Užitečné by také bylo věnovat se oblastem necitlivosti parametrů.

Díky mé diplomové práci jsem podkryla problematiku nelinearity a řešení

složitějších problémů než pouze lineárních. Je dobré vědět, že mezi nimi existují případy, které je možné zjednodušit, aniž by byla porušena jejich spolehlivost. Tato práce pro mě byla velikým přínosem. Výpočty jsem prováděla pomocí matematického software MATLAB a MAPLE.

Literatura

- [1] Kubáček, L., Tesaříková, E.: Weakly nonlinear regression models, 1. vyd. Publishing House of Palacký University Olomouc, 2008.
- [2] Kubáček, L., Kubáčková, L.: Statistika a metrologie, 1. vyd. UP v Olomouci, 2000.
- [3] Kunderová, P.: Úvod do teorie pravděpodobnosti a matematické statistiky, 2., nezměněné vyd. UP v Olomouci, 2004.
- [4] Anděl, J.: Základy matematické statistiky, 1. vyd. Matfyzpress, Praha, 2005.
- [5] Fišerová, E.: Pravděpodobnost a matematická statistika 3 (texty k přednáškám), 2010.
- [6] Jukl, M.: Analytická geometrie kuželoseček a kvadrik, 2. (upravené) vyd. UP v Olomouci, 2006.

Příloha A

Součástí této práce je CD disk s následujícím obsahem:

Zdrojový kód **příklad 1.m** popisuje postup výpočtu prvního příkladu. Počítá míry nelinearity pro odhad parametrů prvního a druhého řádu, konfidenční oblast a pro test hypotéz. Zároveň pro porovnání kreslí konfidenční oblast a linearizační oblasti.

Simulace dat pro ověření, že vychýlenost skutečně padne do linearizační oblasti se provádí v **simulace beta.m** a **simulace theta.m**.

Pro nalezení hodnot parametrů necentrality potřebných ke konstrukci linearizačních oblastí se využije

parametr necentrality beta a elipsa.mw,

parametr necentrality nulovahypoteza.mw,

parametr necentrality alternativa.mw.

Postup výpočtu druhého příkladu popisují zdrojové kódy

příklad 2 diagonala.m,

příklad 2 mimodiagonalu.m.

Pro vybrané body na diagonále a mimo ni počítají parametrickou a vnitřní křivost. Pro body mimo diagonálu jsou vykreslovány konfidenční a linearizační oblasti.