Karel Zvára

R & Regrese

Verze ze dne 22. prosince 2005

Tyto poznámky jsou určeny pouze studentům, kteří mají v akademickém roce 2005/2006 zapsánu přednášku STP094 Regrese, nejsou určeny k dalšímu šíření. Uvítám všechny připomínky k textu, který čas od času obměňuji. Text není identický s odpřednášenou látkou, měl by ji však v zásadě pokrývat.

Obsah

Text je určen především studentům matematické statistky či ekonometrie na matfyzu Univerzity Karlovy v Praze. Doufám však, že bude užitečný i dalším zájemcům, kteří budou ochotni překonat použitý formalismus. Nijak nechci skrývat dojem, který na mě udělalo programové prostředí R, proto jsem jej učinil svým hlavním fámulem. Doufám, že jsem tím neodradil příliš zájemců o regresní model, *erko opravdu stojí za to*!
KZv.

V Praze dne 22. prosince 2005.

1. Úvod

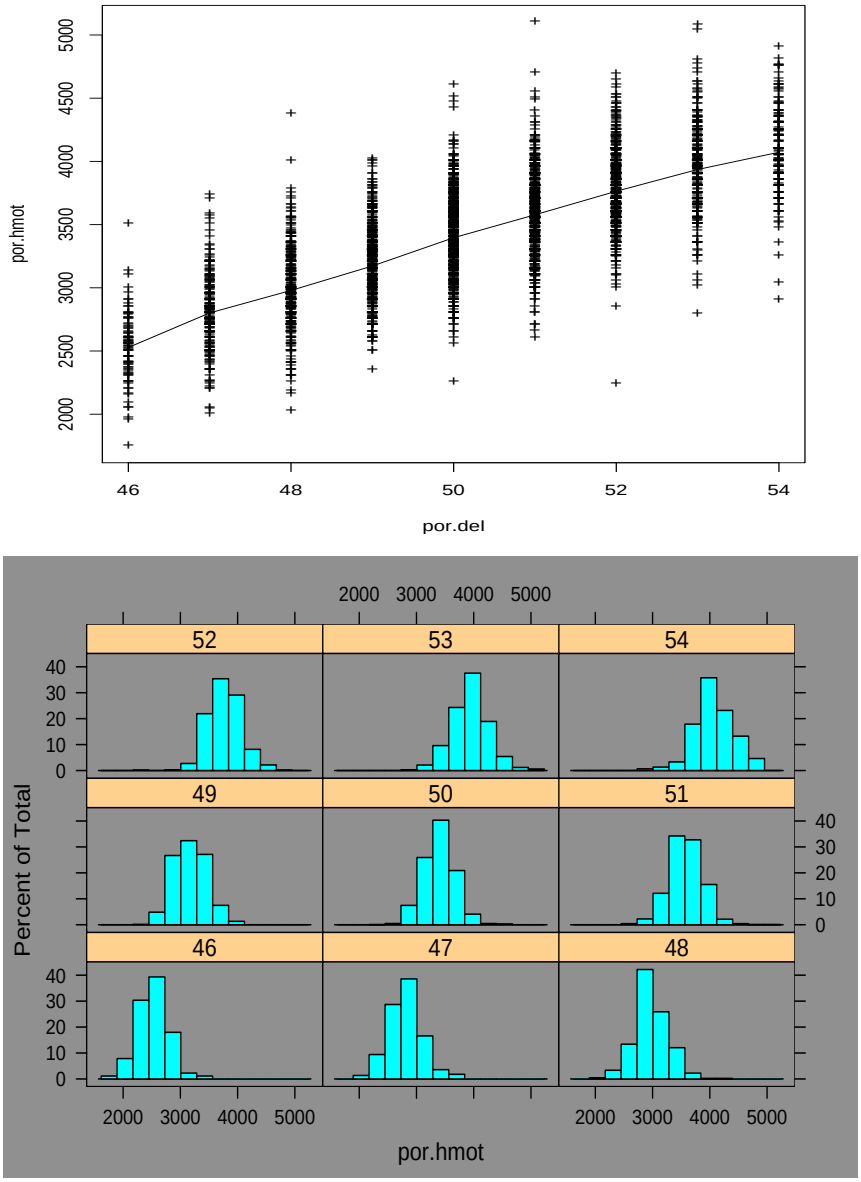
Začněme původem slova regrese. Ve stejném smyslu, jak jej používá tato kniha, použil pojem regrese jako první Francis Galton, když vyšetřoval závislost průměrné výšky synů na výšce rodičů (Galton (1886a), Galton (1886b)). Pro zajímavost, pro výpočet průměrné výšky rodičů zvětšil Galton výšku každé matky o 8 %.

Představme si dvě skupiny synů. První je charakterizována tím, že rodiče mají průměrnou výšku řekněme 170 cm, která je současně také průměrnou výškou v populaci rodičů. Druhá skupina synů je charakterizována tím, že výška jejich rodičů je rovna 180 cm, tedy o 10 cm více, než je průměrná výška všech rodičů. Ukazuje se, že průměrná výška synů z druhé skupiny je jen o 5 cm větší, než průměrná výška synů první skupiny. Odchylka výšky synů tedy sleduje odchylku výšky rodičů, ale nereprodukuje ji celou, redukuje ji na polovinu. Jde „o zpětný pochod, postup“ k průměru (Petráčková et al., 1995, heslo regrese). Jak by se asi jmenovala tato kniha, kdyby se Galton zabýval jinou problematikou, např. exponenciálně rostoucími populacemi. Progrese?

Příklad 1.1 (hmotnost hochů) Jako první ukázku použijeme data, která obsahují porodní hmotnost a porodní délku celkem 4838 chlapců. V horní části obrázku 1.1 je patrné, že s rostoucí porodní délkou celkem pravidelně roste také *průměrná* porodní hmotnost. Na spodním obrázku jsou histogramy porodní hmotnosti podmíněné konkrétní hodnotou porodní délky. Je zde patrné, že pro každou porodní délku má porodní hmotnost přibližně stejné rozdělení, ovšem až na průměr, který vcelku pravidelně s hodnotou porodní délky roste.

```
> attach(Hosi0)
> print(tapply(por.hmot,por.del,mean),digit=5)
    46     47     48     49     50     51     52     53     54
2528.1 2801.3 2979.1 3172.5 3396.1 3577.5 3763.9 3935.8 4072.5
> print(diff(tapply(por.hmot,por.del,mean)),digit=4)
   47    48    49    50    51    52    53    54
273.2 177.9 193.3 223.6 181.4 186.4 171.9 136.7
> print(mean(diff(tapply(por.hmot,por.del,mean))),digit=4)
[1] 193.1
> library(lattice)
> histogram(~por.hmot|as.factor(por.del))
```

S každým centimetrem porodní délky se tedy průměrná porodní hmotnost zvětšuje o necelých 200 gramů. ○



Obrázek 1.1: Závislost porodní hmotnosti chlapců na jejich porodní délce (u histogramů uvedena v záhlaví)

2. Model

Co nového si o regresi (a lineárních modelech) můžeme říci, když je těmto tématům věnováno v každé praktičtější knížce o statistice tolik místa? Pokusíme se o jiný pohled. Uvidíme, že vlastní odhad parametrů v regresi je jen jednou dílčí úlohou, že v mnoha ohledech důležitější (a zajímavější) úlohou je odhad vektoru středních hodnot závisle proměnné. Na tomto odhadu je založena například téměř celá diagnostika. Samotný výklad bude do značné míry vycházet z geometrického pohledu.

Cílem našeho snažení bude vysvětlit variabilitu náhodné veličiny Y (*závisle proměnná, vysvětlovaná proměnná*) závislostí její střední hodnoty na jedné nebo několika nenáhodných *nezávisle proměnných* či *regresorech*, zpravidla označovaných písmenem x. Pokud by nezávisle proměnné byly náhodnými veličinami, pak se zajímáme o podmíněnou střední hodnotu Y při daných hodnotách $\mathbf{X} = \mathsf{x}$.

2.1. Lineární model

Předpokládejme, že střední hodnoty nekorelovaných náhodných veličin $Y_1, \ldots, Y_n$ lze popsat jako lineární funkci $k+1$ neznámých parametrů

$$\mathsf{E}\, Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \ldots + \beta_k x_{ik}, \tag{2.1}$$

kde x_{ij} jsou známé konstanty. Až na výjimky budeme dál předpokládat $\mathsf{var}\, Y_i = \sigma^2$, kde $\sigma > 0$ je další zpravidla neznámý parametr. Známé konstanty x_{ij} uspořádáme do matice konstant o n řádcích a $k+1$ sloupcích

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \ldots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & \ldots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \ldots & x_{nk} \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

takové, že $\mathsf{h}(\mathbf{X}) = r > 0$ a $n > r$. Náhodný vektor $\mathbf{Y}$ má pak střední hodnotu $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ a varianční matici $\sigma^2\mathbf{I}$. Požadavek na střední hodnotu je vlastně požadavkem

$\mathsf{E}\,\mathbf{Y} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$, neboť lineární prostor $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ je tvořen právě všemi lineárními kombinacemi sloupců matice $\mathbf{X}$ (viz Appendix). Předpokládaná varianční matice znamená stejný rozptyl a nekorelovanost jednotlivých složek náhodného vektoru $\mathbf{Y}$. Uvedené předpoklady budeme stručně zapisovat jako $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$. Ekvivalentně můžeme lineární model zapsat pomocí jeho náhodné složky $\mathbf{e} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I})$ jako $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}$.

V dalším budeme používat speciální označení. Nechť sloupce matice $\mathbf{Q}$ tvoří nějakou ortonormální bázi *regresního prostoru* $\mathcal{M}(\mathbf{X})$, nechť sloupce matice $\mathbf{N}$ doplní tuto bázi na ortonormální bázi prostoru $\mathbb{R}^n$. Dostaneme tak ortonormální matici $\mathbf{P} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N})$ takovou, že $\mathcal{M}(\mathbf{X}) = \mathcal{M}(\mathbf{Q})$, $\mathbf{P}\mathbf{P}' = \mathbf{I}_n$ a $\mathbf{P}'\mathbf{P} = \mathbf{I}_n$. Z toho, že sloupce matice $\mathbf{P}$ jsou ortonormální, plynou vztahy

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}' + \mathbf{N}\mathbf{N}' = \mathbf{I}_n, \qquad \mathbf{Q}'\mathbf{Q} = \mathbf{I}_r, \qquad \mathbf{N}'\mathbf{N} = \mathbf{I}_{n-r}, \qquad \mathbf{Q}'\mathbf{N} = \mathbf{O}.$$

Označme $\mathbf{H} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}'$ a $\mathbf{M} = \mathbf{N}\mathbf{N}'$. Obě nově zavedené matice jsou symetrické a idempotentní. Protože platí $\mathbf{H}\mathbf{M} = \mathbf{O}$, jsou vektory na pravé straně vztahu

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{y} + \mathbf{M}\mathbf{y}$$

navzájem ortogonální, takže jde o průměty obecného vektoru $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ do regresního prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ a *reziduálního prostoru* $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$. Ze známých vlastností projekce jsou tyto průměty a tedy také projekční matice $\mathbf{H}, \mathbf{M}$ dány jednoznačně. Navíc je vektor $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ nejbližším prvkem regresního prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ k danému vektoru $\mathbf{y}$. V dalším bude užitečné znát explicitní vyjádření projekční matice $\mathbf{H}$ pomocí regresní matice $\mathbf{X}$, která regresní prostor generuje. Ze známého *pravidla pěti matic* (např. (Anděl, 1978, věta IV.15 b)) nebo (Anděl, 2005, věta A.19)) $\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{X} = \mathbf{X}$ plyne, že je $(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}')\mathbf{X} = \mathbf{O}$, takže jsou sloupce matice $\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'$ ortogonální na $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ a

$$\mathbf{I} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}' + (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}')$$

je hledaný rozklad $\mathbf{I} = \mathbf{H} + \mathbf{M}$. Je tedy

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}', \tag{2.3}$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'. \tag{2.4}$$

2.2. Odhad vektoru středních hodnot

Nejprve se budeme zabývat odhadem vektoru $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$. K náhodnému vektoru $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ najdeme v podprostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ nejbližší prvek, který opět označíme stříškou, tedy $\hat{\mathbf{Y}}$.

K porovnání nestranných odhadů vektorového parametru použijeme jejich varianční matice. Jsou-li $\hat{\mathbf{Y}}, \tilde{\mathbf{Y}}$ dva odhady vektoru $\boldsymbol{\mu}$, pak je odhad $\hat{\mathbf{Y}}$ lepší, když je matice $\mathsf{var}\,\tilde{\mathbf{Y}} - \mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}}$ pozitivně semidefinitní. Znamená to, že také pro každý vektor $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ je $\mathsf{var}\,(\mathbf{q}'\hat{\mathbf{Y}}) \leq \mathsf{var}\,(\mathbf{q}'\tilde{\mathbf{Y}})$.

Věta 2.1. (Gaussova-Markovova) V modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ je $\hat{\mathbf{Y}}$ *nejlepším nestranným lineárním odhadem* (NNLO) vektoru $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$, přičemž platí $\mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}} = \sigma^2\mathbf{H}$.

D ů k a z: Nestrannost odhadu plyne ze známé vlastnosti projekce do podprostoru. Prvek podprostoru se promítne sám na sebe (je sám sobě nejbližším prvkem podprostoru), což má za následek mimo jiné, že platí nutně

$$\mathbf{HX} = \mathbf{X}. \tag{2.5}$$

Proto pro každé $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{k+1}$ platí

$$\mathsf{E}\,\hat{\mathbf{Y}} = \mathsf{E}\,\mathbf{HY} = \mathbf{HX}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}.$$

Vezměme nyní nějaký lineární odhad vektoru $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ tvaru $\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{a} + \mathbf{BY}$. Požadavek nestrannosti vede k požadavku $\mathbf{a} + \mathbf{BX}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ pro všechna $\boldsymbol{\beta}$, což je ekvivalentní s dvojicí identit $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ a $\mathbf{BX} = \mathbf{X}$. Z druhé identity postupným násobením zprava maticemi $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}', \mathbf{X}$ dostaneme

$$\mathbf{BX} = \mathbf{X} \Rightarrow \mathbf{BH} = \mathbf{H} \Rightarrow \mathbf{BX} = \mathbf{X},$$

což znamená, že nestrannost dohadu $\tilde{\mathbf{Y}}$ je ekvivalentní s dvojicí identit $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ a $\mathbf{BH} = \mathbf{H}$.

Spočítejme varianční matici statistiky $\tilde{\mathbf{Y}}$. S ohledem na požadavek $\mathbf{BH} = \mathbf{H}$ platí

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\,\tilde{\mathbf{Y}} &= \mathbf{B}\sigma^2\mathbf{I}\mathbf{B}' = \sigma^2\left[\mathbf{H} + (\mathbf{B} - \mathbf{H})\right]\left[\mathbf{H} + (\mathbf{B} - \mathbf{H})\right]' \\ &= \sigma^2\mathbf{HH}' + \sigma^2(\mathbf{B} - \mathbf{H})(\mathbf{B} - \mathbf{H})' \geq \sigma^2\mathbf{HH}' = \mathsf{var}\,\widehat{\mathbf{Y}},\end{aligned}$$

neboť je opravdu $\mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}} = \mathsf{var}\,\mathbf{HY} = \sigma^2\mathbf{HH}' = \sigma^2\mathbf{H}$. □

Vztah (2.5) je ekvivalentní s tvrzením

$$\mathbf{MX} = \mathbf{O}, \tag{2.6}$$

které budeme v dalším často používat. Speciálně znamená, že řádky (sloupce) matice $\mathbf{M}$ jsou nutně kolmé na všechny sloupce matice $\mathbf{X}$.

2.3. Rezidua

Nyní se budeme zabývat průmětem vektoru $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ do prostoru reziduí $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$ a zavedeme nestranný odhad rozptylu σ^2. *Vektor reziduí* zavedený vztahem $\mathbf{u} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$ porovnává napozorované hodnoty vysvětlované proměnné s odhadem jejích středních hodnot. *Reziduální součet čtverců* $RSS = \|\mathbf{u}\|^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$ udává čtverec vzdálenosti vektorů $\mathbf{Y}$ a $\hat{\mathbf{Y}}$, měří tedy jediným číslem jejich nepodobnost, neshodu. *Reziduální rozptyl* zavedeme jako $S^2 = RSS/(n-r)$.

Věta 2.2. (O reziduích) V lineárním modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ platí

$$\mathbf{u} = \mathbf{M}\mathbf{Y} = \mathbf{M}\mathbf{e}, \tag{2.7}$$

$$\mathbf{u} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{M}), \tag{2.8}$$

$$RSS = \mathbf{e}'\mathbf{M}\mathbf{e}, \tag{2.9}$$

$$\mathsf{E}\, RSS = (n-r)\sigma^2, \tag{2.10}$$

$$\mathsf{E}\, S^2 = \sigma^2, \tag{2.11}$$

$$\mathbf{X}'\mathbf{u} = \mathbf{0}. \tag{2.12}$$

D ů k a z: První a poslední tvrzení plyne z $\mathbf{M}\mathbf{X} = \mathbf{O}$, druhé je jednoduchým důsledkem prvního. Vztah (2.9) je prostým přepisem čtverce délky vektoru reziduí. Při důkazu tvrzení (2.10) lze použít tvrzení (A.18) o stopě projekční matice, která je idempotentní a symetrická:

$$\mathsf{E}\, \mathbf{e}'\mathbf{M}\mathbf{e} = \operatorname{tr} \mathsf{E}\, \mathbf{e}'\mathbf{M}\mathbf{e} = \operatorname{tr} \mathbf{M}\mathsf{E}\, \mathbf{e}\mathbf{e}' = \operatorname{tr} \mathbf{M}\sigma^2\mathbf{I} = \sigma^2 \operatorname{tr} \mathbf{M} = \sigma^2(n - \mathsf{h}(\mathbf{X})).$$

Vztah (2.11) je triviálním důsledkem předchozího. □

Vektor reziduí $\mathbf{u}$ lze interpretovat jako jakýsi odhad náhodné složky modelu $\mathbf{e} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$. Proto ověřování předpokladů, které má náhodná složka modelu splňovat, založíme v dalších kapitolách na vyšetřování vektoru reziduí. Reziduální rozptyl S^2 je podle (2.11) nestranným odhadem rozptylu σ^2.

2.4. Normální rovnice

Zatím jsme se nezabývali odhadem vektoru $\boldsymbol{\beta}$, který vyjadřuje střední hodnotu náhodného vektoru $\mathbf{Y}$ jako konkrétní lineární kombinaci sloupců matice $\mathbf{X}$. Pokud nemá matice $\mathbf{X}$ lineárně nezávislé sloupce, nebudou koeficienty této lineární kombinace dány jednoznačně, takže lineární odhad neexistuje. (Připomeňme si, že odhad či odhadová statistika má být *funkcí* náhodných veličin.)

Symbolem $\mathbf{b}$ označíme libovolné řešení soustavy $\mathbf{Xb} = \hat{\mathbf{Y}}$. Vektor $\mathbf{b}$ tedy tvoří hledané koeficienty lineární kombinace. Skutečnost, že $\mathbf{Y} = \mathbf{Xb} + \mathbf{u}$ je ortogonální rozklad, je ekvivalentní s požadavkem, aby vektor reziduí $\mathbf{u}$ byl ortogonální vůči regresnímu prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})$, tedy s požadavkem

$$\mathbf{X}'(\mathbf{Y} - \mathbf{Xb}) = \mathbf{0},$$

což je opět ekvivalentní s *normální rovnicí* pro $\mathbf{b}$

$$\mathbf{X}'\mathbf{Xb} = \mathbf{X}'\mathbf{Y}. \tag{2.13}$$

Všimněte si, že tato soustava lineárních rovnic je vždy řešitelná, neboť na obou stranách je nějaká lineární kombinace řádků matice $\mathbf{X}$.

2.5. Odhadnutelné parametry

I v případě, že vektor $\boldsymbol{\beta}$ nelze odhadnout, protože rovnice (2.13) může mít nekonečně mnoho řešení, mohou být odhadnutelné některé lineární funkce tohoto vektoru. Například k vektoru takových lineárních funkcí $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ známe dokonce nejlepší nestranný lineární odhad a každá složka vektoru $\boldsymbol{\mu}$ je lineární funkcí vektoru $\boldsymbol{\beta}$.

Připomeňme si význam Gaussovy-Markovovy věty. Pro každé $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ je statistika $\mathbf{q}'\hat{\mathbf{Y}}$ nejlepším nestranným lineárním odhadem své střední hodnoty, tedy odhadem funkce

$$\mathsf{E}\,\mathbf{q}'\mathbf{Y} = \mathbf{q}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = (\mathbf{X}'\mathbf{q})'\boldsymbol{\beta} = \mathbf{t}'\boldsymbol{\beta},$$

kde jsme označili $\mathbf{t} = \mathbf{X}'\mathbf{q}$. Řekneme, že $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ je *odhadnutelný parametr* v modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$, když pro každé pevné $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$ nezávisí výraz $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ na volbě řešení rovnice $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$. Prakticky tedy požadujeme, aby byl odhadovaný parametr dán jednoznačně.

Věta 2.3. (Odhadnutelný parametr) Parametr $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ je odhadnutelný právě tehdy, když platí

$$\mathbf{t} \in \mathcal{M}(\mathbf{X}') = \mathcal{M}(\mathbf{X}'\mathbf{X}).$$

D ů k a z: Nechť $\boldsymbol{\beta}_0$ je jedno pevně zvolené řešení rovnice $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ pro $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$. Je tedy $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelný parametr právě tehdy, když platí

$$\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}_0 = \mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}_0 + \mathbf{t}'\boldsymbol{\gamma},$$

tedy $\mathbf{t}'\boldsymbol{\gamma} = 0$, pro všechna $\boldsymbol{\gamma}$ splňující $\mathbf{X}\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{0}$, tedy pro všechna $\boldsymbol{\gamma} \in \mathcal{M}(\mathbf{X}')^\perp$. Odhadnutelnost $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ je tudíž ekvivalentní s požadavkem $\mathbf{t} \in (\mathcal{M}(\mathbf{X}')^\perp)^\perp = \mathcal{M}(\mathbf{X}')$.

Zbývá si uvědomit, že platí $\mathcal{M}(\mathbf{X}') = \mathcal{M}(\mathbf{X}'\mathbf{X})$, neboť oba prostory patří do $\mathbb{R}^{k+1}$ a jejich ortogonální doplňky jsou totožné. □

Věta 2.4. (Odhad odhadnutelného parametru) Je-li $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelný parametr, pak je výraz $\mathbf{t}'\mathbf{b}$ nejlepší nestranný lineární odhad tohoto parametru, nezávisí na volbě řešení $\mathbf{b}$ normální rovnice a bez ohledu na volbu pseudoinverzní matice platí

$$\mathbf{t}'\mathbf{b} \sim (\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{t}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{t}). \tag{2.14}$$

Jsou-li $\mathbf{t}_1'\boldsymbol{\beta}, \mathbf{t}_2'\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelné parametry, pak bez ohledu na volbu pseudoinverzní matice platí

$$\mathsf{cov}(\mathbf{t}_1'\mathbf{b}, \mathbf{t}_2'\mathbf{b}) = \sigma^2\mathbf{t}_1'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{t}_2. \tag{2.15}$$

D ů k a z: Nezávislost $\mathbf{t}'\mathbf{b}$ na volbě řešení normální rovnice plyne z odhadnutelnosti parametru $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$. Jde o speciální případ definice, když zvolíme $\boldsymbol{\mu} = \hat{\mathbf{Y}}$. Pak na místě $\boldsymbol{\beta}$ stojí právě $\mathbf{b}$. K důkazu ostatních tvrzení použijeme tvrzení věty 2.3, podle kterého můžeme vektor $\mathbf{t}$ vyjádřit jako $\mathbf{X}'\mathbf{q}$ pro nějaké $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$. Je tedy

$$\mathbf{t}'\mathbf{b} = \mathbf{q}'\mathbf{X}\mathbf{b} = \mathbf{q}'\hat{\mathbf{Y}},$$

takže jde o lineární funkci $\hat{\mathbf{Y}}$. Proto je také $\mathbf{t}'\mathbf{b}$ nejlepším nestranným lineárním odhadem své střední hodnoty

$$\mathsf{E}\,\mathbf{t}'\mathbf{b} = \mathsf{E}\,\mathbf{q}'\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{q}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$$

a podobně

$$\begin{aligned}\mathsf{cov}(\mathbf{t}_1'\mathbf{b}, \mathbf{t}_2'\mathbf{b}) &= \mathsf{cov}(\mathbf{q}_1'\mathbf{X}\mathbf{b}, \mathbf{q}_2'\mathbf{X}\mathbf{b}) = \sigma^2\mathbf{q}_1'\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{q}_2 \\ &= \sigma^2\mathbf{t}_1'(\mathbf{X}(\mathbf{X})^-\mathbf{t}_2.\end{aligned}$$

Rozptyl odhadu $\mathbf{t}'\mathbf{b}$ je speciálním případem právě dokázaného. Nezávislost na volbě pseudoinverze plyne ze stejné nezávislosti pro výraz $\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'$. □

Jednoduchým důsledkem právě dokázané věty je následující tvrzení.

Věta 2.5. (Odhad odhadnutelného vektorového parametru) Vektor $\mathbf{T}'\boldsymbol{\beta}$ je vektorem odhadnutelných parametrů právě tehdy, když platí $\mathcal{M}(\mathbf{T}) \subset \mathcal{M}(\mathbf{X}')$. Potom pro každé řešení normální rovnice je $\mathbf{T}'\mathbf{b}$ nejlepším nestranným odhadem vektoru $\mathbf{T}'\boldsymbol{\beta}$ a platí

$$\mathbf{T}'\mathbf{b} \sim (\mathbf{T}'\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{T}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{T}),$$

přičemž nezávisí na volbě zobecněné inverzní matice.

Příklad 2.1 (jednoduché třídění) Úloha analýzy rozptylu jednoduchého třídění předpokládá, že pro nezávislé náhodné veličiny Y_{it}, kde je $1 \le t \le n_I$, $1 \le i \le I$,

platí $Y_{it} \sim \mathsf{N}(\mu_i, \sigma^2)$. Takto máme vlastně I nezávislých náhodných výběrů z normálních rozdělení, která mají obecně nestejné střední hodnoty, ale stejné rozptyly. V praktických úlohách vlastně třídíme hodnoty spojité veličiny Y podle nějakého *faktoru*, tedy podle znaku (veličiny) měřeného v nominálním měřítku. Jednotlivé hodnoty faktoru se nazývají *úrovně* či *ošetření*.

Častěji se používá parametrické vyjádření středních hodnot ve tvaru

$$\mathsf{E}\, Y_{it} = \mu + \alpha_i, \tag{2.16}$$

kde α_i jsou *efekty* (také někdy hlavní efekty) odpovídající jednotlivým úrovním sledovaného faktoru (jednotlivým ošetřením). Model můžeme maticově zapsat jako

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{Y}_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \boldsymbol{\alpha} \end{pmatrix} + \mathbf{e}, \tag{2.17}$$

kde $\mathbf{e} \sim \mathsf{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$. Snadno zjistíme, že matice modelu $\mathbf{X}$ má hodnost I, kdežto sloupců má $I + 1$, takže celý vektor parametrů není odhadnutelný. Snadno se také zjistí, že každou lineární kombinaci řádků matice $\mathbf{X}$, tedy každý vektor $\mathbf{t}'$ určující odhadnutelný lineární parametr $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$, lze zapsat jako

$$\mathbf{t}' = \left(\sum_{i=1}^{I} c_i, c_1, \dots, c_I \right), \tag{2.18}$$

kde c_i jsou libovolné konstanty. K odhadnutelným funkcím patří například střední hodnoty jednotlivých pozorování $\mathsf{E}\, Y_{it} = \mu + \alpha_i$ (volbou $\mathbf{t}' = (1, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0)$). Volbou $\mathbf{t}' = (0, \dots, 1, 0, \dots, 0, -1, 0, \dots)$ můžeme pro $1 \le i \ne i' \le I$ vyjádřit rozdíly hlavních efektů $\alpha_i - \alpha_{i'}$, které, jak uvidíme, patří mezi *kontrasty*. ◯

Příklad 2.2 (analýza kovariance) Zaveďme nyní poněkud složitější model, než v předchozím příkladě. Nechť platí

$$Y_{it} = \mu + \alpha_i + \beta x_{it} + e_{it}, \qquad 1 \le t \le n_i, 1 \le i \le I, \tag{2.19}$$

kde opět jsou $e_{11}, \dots, e_{In_I}$ nezávislé náhodné veličiny s nulovou střední hodnotou a rozptylem σ^2, $x_{11}, \dots, x_{In_I}$ jsou známé konstanty a $\mu, \alpha_1, \dots, \alpha_I, \beta, \sigma$ jsou neznámé parametry. Tentokrát má regresní matice tvar

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{n_1} & \mathbf{1}_{n_1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{1}_{n_2} & \mathbf{0} & \mathbf{1}_{n_2} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{x}_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ \mathbf{1}_{n_I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1}_{n_I} & \mathbf{x}_I \end{pmatrix}.$$

Zajímá nás, kdy je parametr β odhadnutelný. Abychom mohli vyjádřit vektor $\mathbf{t} = (0, 0, \ldots, 0, 1)'$ ve tvaru $\mathbf{q}'\mathbf{X}$, kde $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1', \mathbf{q}_2', \ldots, \mathbf{q}_I')'$, musí pro všechna $i = 1, \ldots, I$ být $\mathbf{q}_i'\mathbf{1}_{n_i} = 0$. Odtud je ovšem zaručena také první nula vektoru $\mathbf{t}$. Abychom získali jedničku na posledním místě vektoru $\mathbf{t}$, nesmí pro všechna i být $\mathbf{q}_i'\mathbf{x}_i = 0$. Je tedy nutné, aby aspoň pro nějaké i^* bylo $\mathbf{q}_{i^*}'\mathbf{x}_{i^*} \neq 0$. Vezmeme-li v úvahu, požadavek $\mathbf{q}_{i^*}'\mathbf{1}_{n_i} = 0$, je zřejmé, že vektor $\mathbf{x}_{i^*}$ musí mít aspoň dvě nestejné složky.

Prakticky použijeme popisovaný model, když potřebujeme nejprve hodnoty závisle proměnné Y_{it} *adjustovat* vůči nějaké doprovodné veličině x. Model předpokládá lineární závislost střední hodnoty Y na x, přičemž regresní přímky $y = (\mu + \alpha_i) + \beta x$ jsou rovnoběžné (mají stejnou směrnici β). Úloha analýzy kovariance klade otázku, zda jsou tyto přímky dokonce totožné ($\alpha_1 = \ldots = \alpha_I$). ◯

2.6. Normální lineární model

Předpokládejme navíc, že náhodný vektor $\mathbf{Y}$ má normální rozdělení, tedy že platí $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$. V takovém případě hovoříme o *normálním lineárním modelu*. Připomeňme si ortonormální bázi prostoru $\mathbb{R}^n$ určenou maticí $\mathbf{P} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N})$ s předpokladem $\mathsf{h}(\mathbf{X}) = r > 0$ a upřesněme vlastnosti statistik $\hat{\mathbf{Y}}, \mathbf{u}, RSS, S^2$. Pro $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}$ můžeme psát

$$\begin{aligned} \mathbf{Y} &= (\mathbf{H}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{H}\mathbf{e}) + \mathbf{M}\mathbf{e} \\ &= (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Q}(\mathbf{Q}'\mathbf{e})) + \mathbf{N}(\mathbf{N}'\mathbf{e}) \\ &= (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \sigma\mathbf{Q}\mathbf{V}) + \sigma\mathbf{N}\mathbf{U} \\ &= \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{u}, \end{aligned} \tag{2.20}$$

kde náhodný vektor

$$\begin{pmatrix} \mathbf{V} \\ \mathbf{U} \end{pmatrix} = \mathbf{P}'\frac{1}{\sigma}\mathbf{e} = \frac{1}{\sigma}\begin{pmatrix} \mathbf{Q}' \\ \mathbf{N}' \end{pmatrix}\mathbf{e} \tag{2.21}$$

vzniklý ortonormální lineární transformací z vektoru $(1/\sigma)\mathbf{e}$ s rozdělením $\mathsf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ má zřejmě opět rozdělení $\mathsf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$. Tato vlastnost, spolu s rozkladem (2.20), umožní dokázat následující větu.

Věta 2.6. (Normální lineární model) V modelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ platí

a)
$$\hat{\mathbf{Y}} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{H});$$

b)
$$\mathbf{u} \sim \mathsf{N}(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{M});$$

c) náhodné vektory $\hat{\mathbf{Y}}, \mathbf{u}$ jsou nezávislé;

d)
$$\frac{1}{\sigma^2}||\hat{\mathbf{Y}}||^2 \sim \chi^2_{r,||\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}||^2/\sigma^2} \qquad \text{(necentrální chí-kvadrát);}$$

e)
$$\frac{1}{\sigma^2}RSS = \frac{1}{\sigma^2}\|\mathbf{u}\|^2 \sim \chi^2_{n-r};$$

f) je-li $\mathbf{T}'\boldsymbol{\beta}$ vektor odhadnutelných parametrů, pak statistiky $\mathbf{T}'\mathbf{b}$ a S^2 nezávisí na volbě pseudoinverze, jsou to nezávislé náhodné veličiny a platí

$$\mathbf{T}'\mathbf{b} \sim \mathsf{N}\big(\mathbf{T}'\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{T}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{T}\big). \tag{2.22}$$

g) je-li $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelný parametr, pak má statistika

$$\frac{\mathbf{t}'\mathbf{b} - \mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}}{\sqrt{\widehat{\mathsf{var}\,\mathbf{t}'\mathbf{b}}}} = \frac{\mathbf{t}'\mathbf{b} - \mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}}{S\sqrt{\mathbf{t}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{t}}} \tag{2.23}$$

rozdělení t_{n-r}.

D ů k a z: První dvě tvrzení jsou triviální, třetí plyne z $\mathbf{HM} = \mathbf{O}$, což znamená nulovou matici kovariancí vektorů $\hat{\mathbf{Y}}$ a $\mathbf{u}$. Tvrzení d) plyne z vyjádření $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \sigma\mathbf{Q}\mathbf{V}$, což je součet vektoru konstant a náhodného vektoru, pro který platí $||\mathbf{Q}\mathbf{V}||^2 \sim \chi^2_r$. Výraz uvedený v d) má tedy necentrální rozdělení χ^2, viz např. (Anděl, 2005, Věta 4.17). Další vztah plyne ze souvislosti mnohorozměrného normálního a χ^2-rozdělení. Tvrzení f) je jen upřesněním tvrzení věty 2.5 pro normální lineární model a bere v úvahu tvrzení c). Poslední tvrzení je přímým důsledkem tvrzení f), e) a definice t-rozdělení. □

Poznámka Náhodný vektor $\mathbf{Y}$ má v normálním lineárním modelu hustotu

$$(2\pi\sigma^2)^{-n/2}\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}||\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}||^2\right),$$

takže je zřejmě odhad vektoru $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ metodou maximální věrohodnosti totožný s odhadem metodou nejmenších čtverců $\hat{\mathbf{Y}}$. Naproti tomu odhad rozptylu σ^2 metodou maximální věrohodnosti je dán vztahem

$$\widehat{\sigma^2} = \frac{RSS}{n} = \frac{n-r}{n}S^2,$$

je tedy vychýlený, byť toto vychýlení s rostoucím n konverguje k nule.

2.7. Normální model s plnou hodností

Když má matice $\mathbf{X}$ lineárně nezávislé sloupce (platí $r = \mathsf{h}(\mathbf{X}) = k+1$), pak má normální rovnice (2.13) jediné řešení.

Věta 2.7. (Klasický model regrese) Má-li matice $\mathbf{X}$ v normálním modelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ hodnost rovnou počtu jejích sloupců, potom

a) řešením normální rovnice je statistika

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}; \tag{2.24}$$

b) $\mathbf{b}$ je nejlepší nestranný lineární odhad vektoru $\boldsymbol{\beta}$;

c) platí (označme $\mathbf{V} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ s indexy $0 \le i, j \le k$)

$$\mathbf{b} \sim \mathsf{N}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{V});$$

d) náhodné vektory $\mathbf{b}$ a $\mathbf{u}$ jsou nezávislé;

e) statistiky $\mathbf{b}$ a S^2 jsou nezávislé;

f) pro $j = 0, 1, \ldots, k$ platí

$$T_j = \frac{b_j - \beta_j}{S\sqrt{v_{jj}}} \sim \mathsf{t}_{n-k-1}; \tag{2.25}$$

g) množina

$$\mathcal{K}_2 = \left\{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{k+1} : (\boldsymbol{\beta} - \mathbf{b})'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\boldsymbol{\beta} - \mathbf{b}) \le (k+1)S^2 F_{k+1,n-k-1}(\alpha)\right\} \tag{2.26}$$

tvoří konfidenční množinu pro $\boldsymbol{\beta}$ se spolehlivostí $1 - \alpha$.

D ů k a z: První tvrzení plyne z regularity matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$. Odhad $\mathbf{b}$ lze napsat ve tvaru $\mathbf{b} = \mathbf{V}\mathbf{X}'\hat{\mathbf{Y}}$, odkud je zřejmé, že tento vektor je lineární funkcí $\hat{\mathbf{Y}}$. Proto podle Gaussovy-Markovovy věty je nejlepším nestranným lineárním odhadem své střední hodnoty, tedy vektoru $\boldsymbol{\beta}$. Z věty 2.6 plyne nezávislost uvedená v bodech d) a e). K důkazu vztahu f) je třeba si uvědomit nezávislost uvedenou v e). Upravíme-li statistiku T_j na tvar

$$T_j = \frac{\dfrac{b_j - \beta_j}{\sqrt{\sigma^2 v_{jj}}}}{\sqrt{\dfrac{(n-k-1)S^2}{\sigma^2}\dfrac{1}{n-k-1}}},$$

je patrné, že symbolicky jde o zlomek

$$\frac{\mathsf{N}(0,1)}{\sqrt{\dfrac{\chi^2_{n-k-1}}{n-k-1}}}.$$

To, spolu se zmíněnou nezávislostí, k důkazu rozdělení statistiky T_j stačí. Podobně, s využitím c), dostaneme také konfidenční množinu popsanou v g). □

2.8. Aitkenův model

Někdy je vhodné umět řešit poněkud obecnější úlohu, než jsme dělali až doposud. Nechť platí lineární model s obecnější varianční maticí

$$\mathbf{Y} \sim \left(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1}\right). \tag{2.27}$$

Také tentokrát jsou $\boldsymbol{\beta}$ a $\sigma > 0$ neznámé parametry a $\mathbf{W}$ je (zpravidla známá) pozitivně definitní matice. Příkladem takového modelu je situace, kdy i-tá složka vektoru $\mathbf{Y}$ je průměrem n_i nezávislých pozorování se stejnou střední hodnotou a stejným rozptylem σ^2. Potom je $\mathsf{var}\, Y_i = \sigma^2/n_i$ pro každé i a matice $\mathbf{W}$ je diagonální s četnostmi $n_1, \ldots, n_n$ na diagonále.

Abychom našli v modelu (2.27) protějšky $\hat{\mathbf{Y}}_W$ a S^2_W statistik $\hat{\mathbf{Y}}$ a S^2 (případně $\mathbf{b}_W$ jako protějšek $\mathbf{b}$), převedeme nejprve model s obecnější varianční maticí na standardní model.

Protože matice $\mathbf{W}$ je pozitivně definitní, existuje regulární matice $\mathbf{C}$, která splňuje požadavek $\mathbf{C}'\mathbf{C} = \mathbf{W}$ (tuto odmocninovou matici lze zkonstruovat například pomocí spektrálního rozkladu matice $\mathbf{W}$). Zřejmě platí $\mathbf{C}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}' = \mathbf{I}$.

Zaveďme matici $\mathbf{X}^* = \mathbf{C}\mathbf{X}$ a uvažujme náhodný vektor $\mathbf{Y}^* = \mathbf{C}\mathbf{Y}$, který již vyhovuje běžnému lineárnímu modelu

$$\mathbf{Y}^* \sim \left(\mathbf{C}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{C}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}'\right) = \left(\mathbf{X}^*\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I}\right).$$

Spočítejme v novém (hvězdičkovém) modelu běžný odhad vektoru středních hodnot

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{Y}}^* &= \mathbf{H}^*\mathbf{Y}^* \\ &= \mathbf{C}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{C}'\mathbf{C}\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{C}'\mathbf{C}\mathbf{Y} \\ &= \mathbf{C}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{Y}.\end{aligned}$$

Protože střední hodnota $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{C}^{-1}\mathsf{E}\,\mathbf{Y}^*$ je lineární funkcí střední hodnoty $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}^*$, platí stejný vztah i pro odhady. Je tedy odhad vektoru $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ v původním modelu roven

$$\hat{\mathbf{Y}}_W = \mathbf{C}^{-1}\hat{\mathbf{Y}}^* = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{Y}.$$

Reziduální součet čtverců v modelu s hvězdičkami (jen tam má smysl, sčítáme srovnatelné hodnoty a můžeme tak najít běžný odhad σ^2) je roven

$$\begin{aligned}RSS_W = RSS^* &= \|\mathbf{Y}^* - \hat{\mathbf{Y}}^*\|^2 = \|\mathbf{C}\mathbf{Y} - \mathbf{C}\hat{\mathbf{Y}}_W\|^2 \\ &= (\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}_W)'\mathbf{W}(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}_W),\end{aligned}$$

což v nejčastějším případě diagonální matice $\mathbf{W}$ vede ke statistice

$$RSS_W = \sum_{i=1}^{n} w_{ii}\left(Y_i - \hat{Y}_{Wi}\right)^2. \tag{2.28}$$

Nyní odhadneme rozptyl σ^2. Statistika

$$S_W^2 = S^{*2} = \frac{RSS^*}{n-r}$$

je zřejmě nestranným odhadem parametru σ^2. V normálním lineárním modelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1})$ má S_W^2 stejné rozdělení, jako statistika S^2 v běžném lineárním modelu $\mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$.

Má-li matice $\mathbf{X}$ lineárně nezávislé sloupce, je celý vektor $\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelný. Řešením normální rovnice je pak (*Aitkenův odhad*)

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_W = \mathbf{b}^* &= (\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{Y}^* = (\mathbf{X}'\mathbf{C}'\mathbf{C}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{C}'\mathbf{C}\mathbf{Y} \\ &= (\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{Y}. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Odhad vektoru středních hodnot $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ můžeme zřejmě psát jako

$$\hat{\mathbf{Y}}_W = \mathbf{X}\mathbf{b}_W. \tag{2.30}$$

Snadno se spočítá, že v modelu s úplnou hodností je $\mathbf{b}_W \sim \big(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1}\big)$.

V případě, že matice $\mathbf{W}$ je diagonální a matice $\mathbf{X}$ má lineárně nezávislé sloupce, hovoříme o *vážené regresi*. Vztah (2.28) pak ukazuje, jak je zobecněna metoda nejmenších čtverců. V programu R má procedura `lm` parametr `weights`, kterým se volí diagonální matice $\mathbf{W}$. Podobně v NCSS, modul Multiple Regression, lze volit tuto diagonálu jako Weight Variable. S výhodou lze vztah (2.28) použít v programu STATISTICA, modul Nonlinear Estimation, při hledání odhadu $\mathbf{b}_W$.

Shrňme dosažená zjištění.

Věta 2.8. (Zobecněná regrese) Nechť platí $\mathbf{Y} \sim \big(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1}\big)$, kde $\mathbf{W} > 0$ je daná matice. Potom je vektor

$$\hat{\mathbf{Y}}_W = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{Y} \sim \big(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'\big)$$

nejlepším nestranným lineárním odhadem vektoru $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$. Statistika S_W^2 je nestranným odhadem rozptylu σ^2. Má-li matice $\mathbf{X}$ lineárně nezávislé sloupce, potom je také

$$\mathbf{b}_W \sim \big(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-1}\big)$$

nejlepším nestranným lineárním odhadem vektoru $\boldsymbol{\beta}$. Jestliže má $\mathbf{Y}$ mnohorozměrné normální rozdělení, pak také $\hat{\mathbf{Y}}_W$, případně $\mathbf{b}_W$, má mnohorozměrné normální rozdělení a platí $RSS_W/\sigma^2 \sim \chi^2_{n-r}$. Statistika RSS_W je v takovém případě nezávislá s $\hat{\mathbf{Y}}_W$, případně s $\mathbf{b}_W$.

Poznámka V praxi se vyskytují úlohy, kdy matice $\mathbf{W}$ obsahuje neznámé parametry. Takovou úlohu řeší pro některé matice $\mathbf{W}$ procedura `gls` knihovny `nlme`, nejde už však o lineární úlohu.

3. Podmodel

Regresní metody slouží k vyhledávání a prokazování způsobu závislosti střední hodnoty nějaké náhodné veličiny na jiných veličinách. Snažíme se přitom najít model co možná nejjednodušší. Zde je klíčový pojem podmodelu, který v porovnání s modelem zmenšuje prostor pro možné střední hodnoty náhodného vektoru $\mathbf{Y}$.

3.1. Podmodel

Řekneme, že platí podmodel modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$, když pro nějaký vektor $\boldsymbol{\beta}_0$ platí $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0$, kde $\mathbf{X}_0$ je matice konstant splňující požadavky $\mathcal{M}(\mathbf{X}_0) \subset \mathcal{M}(\mathbf{X})$, $0 < \mathsf{h}(\mathbf{X}_0) = r_0 < r$. Uvedené požadavky zaručují, že i za platnosti podmodelu je prostor možných středních hodnot netriviální, že je vlastním podprostorem původního prostoru středních hodnot modelu. Je tedy jakýmsi jeho speciálním případem.

Navážeme na úvahy o ortonormálních bázích. Vytvořme matici $\mathbf{Q}$ ze dvou podmatic, které mají po řadě r_0 a $r - r_0$ sloupců tak, aby sloupce matic $\mathbf{Q}_0$ a $(\mathbf{Q}_0, \mathbf{Q}_1)$ generovaly prostory $\mathcal{M}(\mathbf{X}_0)$ a $\mathcal{M}(\mathbf{X})$. Ortonormální matici $\mathbf{P}$, která generuje $\mathbb{R}^n$, lze pak zapsat ve tvaru

$$\mathbf{P} = (\mathbf{Q}_0, \mathbf{Q}_1, \mathbf{N}). \tag{3.1}$$

Pozorovaný vektor $\mathbf{Y}$ můžeme tedy rozložit na součet tří navzájem ortogonálních vektorů, na které se můžeme dvěma způsoby dívat jako na součet dvou vektorů:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Y} &= \mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_0'\mathbf{Y} + \mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'\mathbf{Y} + \mathbf{N}\mathbf{N}'\mathbf{Y} && (3.2)\\
&= (\mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_0'\mathbf{Y} + \mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'\mathbf{Y}) + \mathbf{N}\mathbf{N}'\mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{u} && (3.3)\\
&= \mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_0'\mathbf{Y} + (\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'\mathbf{Y} + \mathbf{N}\mathbf{N}'\mathbf{Y}) = \hat{\mathbf{Y}}_0 + \mathbf{u}_0. && (3.4)
\end{aligned}$$

Při tom $\hat{\mathbf{Y}}_0, \mathbf{u}_0$ jsou po řadě odhad $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ a vektor reziduí spočítané v podmodelu. Dva odhady vektoru středních hodnot i dva vektory reziduí se liší o vektor

$$\mathbf{d} = \mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'\mathbf{Y}. \tag{3.5}$$

Za platnosti podmodelu pak speciálně platí (s použitím označení z (3.8))

$$\begin{aligned}\mathbf{Y} &= \mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0 + \mathbf{Q}_0(\mathbf{Q}_0'\mathbf{e}) + \mathbf{Q}_1(\mathbf{Q}_1'\mathbf{e}) + \mathbf{N}(\mathbf{N}'\mathbf{e}) \\ &= (\mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0 + \sigma\mathbf{Q}_0\mathbf{V}_0 + \sigma\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1) + \sigma(\mathbf{N}\mathbf{U}) = \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{u} \qquad (3.6) \\ &= (\mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0 + \sigma\mathbf{Q}_0\mathbf{V}_0) + (\sigma\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1 + \sigma\mathbf{N}\mathbf{U}) = \hat{\mathbf{Y}}_0 + \mathbf{u}_0 \qquad (3.7)\end{aligned}$$

Máme tedy dva rozklady, které se liší podle toho, kam umístíme vektor $\mathbf{d} = \sigma\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1$, získaný jako průmět $\mathbf{e}$ (za platnosti podmodelu také jako průmět $\mathbf{Y}$) do podprostoru $\mathcal{M}(\mathbf{Q}_1)$, o který jsme zmenšili původní prostor možných středních hodnot vektoru $\mathbf{Y}$. Všimněme si dále, jak se chová lineární transformace náhodného vektoru $\mathbf{e}$ (ať už platí model či podmodel):

$$\begin{pmatrix}\mathbf{V}_0 \\ \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{U}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathbf{Q}_0' \\ \mathbf{Q}_1' \\ \mathbf{N}'\end{pmatrix}\frac{1}{\sigma}\mathbf{e} = \mathbf{P}'\frac{1}{\sigma}\mathbf{e} \sim (\mathbf{0}, \mathbf{I}). \qquad (3.8)$$

Tento rozklad použijeme k důkazu následující věty. Dříve však ještě označíme reziduální součet čtverců v podmodelu $RSS_0 = \|\mathbf{u}_0\|^2$ a reziduální rozptyl v podmodelu $S_0^2 = RSS_0/(n - r_0)$.

Věta 3.1. (O podmodelu) Platí-li v lineárním modelu podmodel, potom

a) $\hat{\mathbf{Y}}_0$ je NNLO vektoru $\mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0$;

b) statistika S_0^2 je nestranným odhadem rozptylu σ^2;

c) pro vektor $\mathbf{d} = \hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_0 = \mathbf{u}_0 - \mathbf{u}$ platí

$$\|\mathbf{d}\|^2 = RSS_0 - RSS; \qquad (3.9)$$

d) má-li $\mathbf{Y}$ v modelu normální rozdělení, je

$$F_0 = \frac{(RSS_0 - RSS)/(r - r_0)}{RSS/(n - r)} \sim \mathsf{F}_{r-r_0,n-r}. \qquad (3.10)$$

D ů k a z: První dvě tvrzení jsou triviálním důsledkem vět 2.1 a 2.2. Vztah c) je důsledkem ortogonality sloupců matice $\mathbf{P} = (\mathbf{Q}_0, \mathbf{Q}_1, \mathbf{N})$ a toho, že je $\mathbf{u}_0 = \mathbf{u} + \mathbf{d}$. Protože v normálním modelu platí

$$\frac{1}{\sigma^2}RSS = \frac{1}{\sigma^2}\|\mathbf{N}\mathbf{N}'\mathbf{e}\|^2 = \frac{1}{\sigma^2}\|\mathbf{N}'\mathbf{e}\|^2 = \|\mathbf{U}\|^2 \sim \chi^2_{n-r}$$

a za platnosti podmodelu navíc

$$\frac{1}{\sigma^2}\|\mathbf{d}\|^2 = \frac{1}{\sigma^2}\|\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'\mathbf{e}\|^2 = \frac{1}{\sigma^2}\|\mathbf{Q}_1'\mathbf{e}\|^2 = \|\mathbf{V}_1\|^2 \sim \chi^2_{r-r_0},$$

přičemž náhodné veličiny jsou nezávislé, plyne z rozkladu (3.8) také tvrzení d). □

Můžeme uvažovat posloupnost podmodelů, které jsou do sebe postupně vloženy, které ponechávají vektoru $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ stále méně stupňů volnosti. Podstatné stačí ukázat u dvojice podmodelů. Mějme tedy n-řádkové matice $\mathbf{X}_{00}, \mathbf{X}_0, \mathbf{X}$ splňující $\mathcal{M}(\mathbf{X}_{00}) \subset \mathcal{M}(\mathbf{X}_0) \subset \mathcal{M}(\mathbf{X})$, pro které platí $0 < r_{00} = \mathsf{h}(\mathbf{X}_{00}) < r_0 = \mathsf{h}(\mathbf{X}_0) < r = \mathsf{h}(\mathbf{X}) < n$. Ortonormální matici $\mathbf{Q}$ pak můžeme vyjádřit jako $(\mathbf{Q}_{00}, \mathbf{Q}_{01}, \mathbf{Q}_1, \mathbf{N})$ s tím, že platí $\mathbf{Q}_0 = (\mathbf{Q}_{00}, \mathbf{Q}_{01})$. Označme ještě jako $\hat{\mathbf{Y}}_{00}$ odhad $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ metodou nejmenších čtverců v podmodelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}_{00}\boldsymbol{\beta}_{00}, \sigma^2\mathbf{I})$ a jako RSS_{00} reziduální součet čtverců v tomto podmodelu. Podobně jako nahoře dojdeme k následujícím tvrzením.

Věta 3.2. (O podmodelech) Uvažujme model $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$. Platí-li podmodel $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}_{00}\boldsymbol{\beta}_{00}, \sigma^2\mathbf{I})$ podmodelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0, \sigma^2\mathbf{I})$, pak

$$F_{00} = \frac{(RSS_{00} - RSS_0)/(r_0 - r_{00})}{S^2} \sim \mathsf{F}_{r_0 - r_{00}, n-r}. \tag{3.11}$$

D ů k a z: V důkazu se využije především skutečnost, že platí $RSS_{00} - RSS_0 = ||\hat{\mathbf{Y}}_0 - \hat{\mathbf{Y}}_{00}||^2$, přičemž je tento vektor ortonormální vůči vektoru $\mathbf{u}$. □

Poznámka Nepřehlédněte, prosím, že ve vzorcích (3.10) a (3.11) je ve jmenovateli stejný odhad rozptylu σ^2. Ve vztahu (3.11) jsme ve jmenovateli mohli použít také odhad rozptylu S_0^2. Tím bychom jen přepsali tvrzení (3.10) s jiným označením. Ukázku použití této věty lze nalézt na konci příkladu 4.2.

K podmodelu můžeme dojít několika způsoby, zde uvedeme dva. Budeme se zajímat především o možnost výpočtu přímo vektoru $\mathbf{d}$ nebo čtverce jeho délky.

3.2. Vypuštění sloupců

Podmodel může být dán požadavkem vynechat z regresní matice $\mathbf{X}$ některé sloupce. Bez újmy na obecnosti předpokládejme, že matice, které určují model a podmodel, se liší právě posledními sloupci matice $\mathbf{X}$, totiž $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1)$. Aby šlo o podmodel, musí být $0 < \mathsf{h}(\mathbf{X}_0) = r_0 < \mathsf{h}(\mathbf{X}) = r$. Označíme-li $\mathbf{H}_0 = \mathbf{X}_0(\mathbf{X}_0'\mathbf{X}_0)^-\mathbf{X}_0'$ a $\mathbf{M}_0 = \mathbf{I} - \mathbf{H}_0$, bude zřejmě $\hat{\mathbf{Y}}_0 = \mathbf{H}_0\mathbf{Y}$ a $\mathbf{u}_0 = \mathbf{M}_0\mathbf{Y}$. Dále platí

$$\mathcal{M}(\mathbf{X}) = \mathcal{M}((\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1)) = \mathcal{M}((\mathbf{X}_0, \mathbf{M}_0\mathbf{X}_1)), \tag{3.12}$$

neboť oba poslední lineární obaly jsou totožné. Protože poslední matice $\mathbf{X}_0$ a $\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1$ mají navzájem ortogonální sloupce, musí platit $\mathcal{M}(\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1) = \mathcal{M}(\mathbf{Q}_1)$. Odtud s použitím (A.15) je projekční matice, která počítá vektor $\mathbf{d}$, dána vztahem (viz (2.3))

$$\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1' = \mathbf{M}_0\mathbf{X}_1(\mathbf{X}_1'\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1)^-\mathbf{X}_1'\mathbf{M}_0,$$

takže vektor $\mathbf{d}$ dostaneme jako

$$\begin{aligned}\mathbf{d} &= \mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'\mathbf{Y} = \mathbf{M}_0\mathbf{X}_1(\mathbf{X}_1'\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1)^-\mathbf{X}_1'\mathbf{M}_0\mathbf{Y} \\ &= \mathbf{M}_0\mathbf{X}_1(\mathbf{X}_1'\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1)^-\mathbf{X}_1'\mathbf{u}_0. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Podobně vyjde

$$\|\mathbf{d}\|^2 = \mathbf{u}_0'\mathbf{X}_1(\mathbf{X}_1'\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1)^-\mathbf{X}_1'\mathbf{u}_0. \tag{3.14}$$

Poznámka Vektor $\mathbf{d}$ zde ukazuje, oč se liší odhad $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ v modelu a podmodelu. Rozdíl reziduálních součtů čtverců záleží na tom, nakolik lze rezidua z podmodelu vysvětlit pomocí sloupců matice $\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1$. Náhodný vektor $\mathbf{d}$ by byl identicky roven nulovému vektoru, jen když by bylo $\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1 = \mathbf{O}$, tedy když všechny sloupce matice $\mathbf{X}_1$ by byly lineárními kombinacemi sloupců matice $\mathbf{X}_0$ (tj. matice $\mathbf{X}_1$ by nerozšiřovala regresní prostor $\mathcal{M}(\mathbf{X}_0)$). To je však zakázáno požadavkem $r_0 < r$. Opačný extrém nastane, když jsou sloupce $\mathbf{X}_1$ ortogonální na $\mathcal{M}(\mathbf{X}_0)$. Pak je $\mathbf{M}_0\mathbf{X}_1 = \mathbf{X}_1$ a $\mathbf{X}_1'\mathbf{u}_0 = \mathbf{X}_1'\mathbf{Y}$, takže náhodný vektor $\mathbf{d} = \mathbf{X}_1(\mathbf{X}_1'\mathbf{X}_1)^-\mathbf{X}_1'\mathbf{Y}$ je nekorelovaný (v normálním lineárním modelu nezávislý) s $\hat{\mathbf{Y}}$.

3.3. Lineární omezení na parametry

Tentokrát dovolíme pouze některé hodnoty vektoru parametrů $\boldsymbol{\beta}$, totiž takové, které vyhovují zvolenému lineárnímu omezení. Například složky vektoru $\boldsymbol{\beta}$ mohou znamenat dělení celku do několika částí, takže součet složek musí být roven jedničce.

Nechť $\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{c}$ je konzistentní soustava takových lineárních rovnic, že platí $\mathcal{M}(\mathbf{A}') \subset \mathcal{M}(\mathbf{X}')$ (každý řádek matice $\mathbf{A}$ je nějakou lineární kombinací řádků matice $\mathbf{X}$). V tomto případě je každá složka vektoru $\mathbf{A}\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelný parametr. Hledejme v $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ bod $\hat{\mathbf{Y}}_0 = \mathbf{X}\mathbf{b}_0$, který je k danému $\mathbf{Y}$ nejbližší, ale navíc splňuje požadavek $\mathbf{A}\mathbf{b}_0 = \mathbf{c}$. Pomůžeme si známou metodou Lagrangeových multiplikátorů. Označme

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\lambda}) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})\|^2 + 2\boldsymbol{\lambda}'(\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{c}).$$

Derivováním podle složek sloupcového vektoru $\boldsymbol{\beta}$ dojdeme k soustavě rovnic

$$\mathbf{X}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}'\mathbf{Y} - \mathbf{A}'\boldsymbol{\lambda},$$

která je v důsledku předpokladu $\mathcal{M}(\mathbf{A}') \subset \mathcal{M}(\mathbf{X}')$ konzistentní. Odtud máme nějaké řešení soustavy rovnic (záleží na volbě pseudoinverze)

$$\mathbf{b}_0 = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{Y} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{A}'\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{b} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{A}'\boldsymbol{\lambda}.$$

Vezmeme-li v úvahu omezení $\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{c}$ (nebo derivaci funkce φ podle $\boldsymbol{\lambda}$), po dosazení za $\boldsymbol{\beta}$ dostaneme konzistentní soustavu pro $\boldsymbol{\lambda}$ (proč je konzistentní?)

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{A}'\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c}.$$

Vektor $\mathbf{b}_0$, který splňuje požadovaná lineární omezení a který určuje hledaný nejbližší bod v $\mathcal{M}(\mathbf{X})$, má po dosazení za $\boldsymbol{\lambda}$ tvar

$$\mathbf{b}_0 = \mathbf{b} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{A}'\left(\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{A}'\right)^{-}(\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c}).$$

Samotný nejbližší bod (a odhad vektoru $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ za platnosti hypotézy $\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{c}$) je pak dán jednoznačně vztahem

$$\hat{\mathbf{Y}}_0 = \mathbf{X}\mathbf{b}_0.$$

Odtud je

$$\begin{aligned}\mathbf{d} = \hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_0 &= \mathbf{X}(\mathbf{b} - \mathbf{b}_0)\\ &= \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{A}'\left(\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{A}'\right)^{-}(\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c}),\end{aligned}$$

takže pro testování podmodelu nejzajímavější vztah je

$$\|\mathbf{d}\|^2 = (\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c})'\left(\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{A}'\right)^{-}(\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c}).$$

Rozdíl reziduálních součtů čtverců v modelu a za hypotézy tedy měří, nakolik klasické řešení normální rovnice (bez omezení) splňuje hypotézu.

Pokud speciálně má matice $\mathbf{X}$ lineárně nezávislé sloupce a matice $\mathbf{A}$ nemá žádné zbytečné řádky (které by byly lineární kombinací ostatních řádků), potom v posledních dvou vztazích můžeme pseudoinverzní matice nahradit klasickými inverzními maticemi:

$$\mathbf{b}_0 = \mathbf{b} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{A}'\left(\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{A}'\right)^{-1}(\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c}), \tag{3.15}$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{A}'\left(\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{A}'\right)^{-1}(\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c}), \tag{3.16}$$

$$\|\mathbf{d}\|^2 = (\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c})'\left(\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{A}'\right)^{-1}(\mathbf{A}\mathbf{b} - \mathbf{c}). \tag{3.17}$$

3.4. Předem daná hodnota regresního koeficientu

Jako ukázku lineárního omezení si popišme situaci, kdy požadujeme, aby platilo $\beta_k = \beta_k^0$, kde β_k^0 je zvolená konstanta. Zvolíme-li speciálně $\beta_k^0 = 0$, znamená to, že chceme vynechat z modelu poslední sloupec matice $\mathbf{X}$.

Pro jednoduchost předpokládejme lineární nezávislost sloupců matice $\mathbf{X}$. Příslušné omezení na $\boldsymbol{\beta}$ můžeme zapsat pomocí $\mathbf{A} = (0, \dots, 0, 1) = \mathbf{j}_k'$ a $\mathbf{c} = \beta_k^0$. Použijeme-li dříve zavedené označení $\mathbf{V} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$, máme pak postupně (označení $\mathbf{v}_{\bullet k}$ pro k-tý sloupec matice $\mathbf{V}$ je zavedeno v Appendixu)

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{A}' &= \mathbf{V}\mathbf{j}_k = \mathbf{v}_{\bullet k}, \\
\mathbf{A}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{A}' &= \mathbf{j}_k'\mathbf{V}\mathbf{j}_k = v_{kk}, \\
||\mathbf{d}||^2 &= \frac{(b_k - \beta_k^0)^2}{v_{kk}}, \qquad (3.18) \\
\mathbf{b}_0 &= \mathbf{b} - \frac{b_k - \beta_k^0}{v_{kk}}\mathbf{v}_{\bullet k}. \qquad (3.19)
\end{aligned}
$$

S uvážením, jaká je varianční matice odhadu $\mathbf{b}$, lze poslední vztah (po rozšíření konstantou σ^2) psát ve tvaru

$$
\mathbf{b}_0 = \mathbf{b} - \frac{b_k - \beta_k^0}{\mathsf{var}\, b_k}\mathsf{cov}(\mathbf{b}, b_k).
$$

Poslední vyjádření lze interpretovat tak, že pokud je některá složka odhadu $\mathbf{b}$ nekorelovaná s k-tou složkou tohoto odhadu b_k, pak se odhad této složky vektoru $\boldsymbol{\beta}$ po fixování regresního koeficientu (tedy také po vyloučení k-té nezávisle proměnné, tj. po vyloučení k-tého sloupce matice $\mathbf{X}$) nezmění.

Poznámka K obdobě vztahu (3.18) se dostaneme v kapitole o parametrizaci v nelineární regresi při zavádění pojmu profilový diagram. V lineárním regresním modelu je zvýšení reziduálního součtu čtverců způsobené požadavkem na konkrétní hodnotu β_k^0 parametru β_k úměrné čtverci rozdílu $b_k - \beta_k^0$.

3.5. Koeficient determinace

Důležitý speciální případ podmodelu dostaneme, když využijeme náš předpoklad, že první sloupec matice $\mathbf{X}$ je tvořen jedničkami, neboť v modelu je absolutní člen. V dalším by stačilo předpokládat, že platí $\mathbf{1} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$). V takovém případě požadavek $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{1}\beta_0$ určuje podmodel modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$.

Snadno spočítáme, že v tomto podmodelu je $b_0 = \bar{Y}$ a $\hat{\mathbf{Y}}_0 = \bar{Y}\mathbf{1}$. Odtud je $\mathbf{d} = \hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_0 = \hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}$, takže podle (3.9) je

$$
RSS_0 = RSS + \|\hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}\|^2.
$$

Spočítejme *výběrový* korelační koeficient mezi $\mathbf{Y}$ a $\hat{\mathbf{Y}}$. Z předpokladu $\mathbf{1} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$ plyne, že platí

$$0 = \mathbf{1}'\mathbf{u} = \mathbf{1}'(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}),$$

takže aritmetické průměry složek vektorů $\mathbf{Y}, \hat{\mathbf{Y}}$ jsou shodné. Proto lze psát

$$\begin{aligned} r^2_{Y,\hat{Y}} &= \frac{(\sum(Y_i - \bar{Y})(\hat{Y}_i - \bar{Y}))^2}{\sum(Y_i - \bar{Y})^2 \sum(\hat{Y}_i - \bar{Y})^2} = \frac{((\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1})'(\hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}))^2}{\|\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}\|^2 \|\hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}\|^2} \\ &= \frac{((\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}_0)'(\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_0))^2}{||\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}_0||^2 ||\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_0||^2} = \frac{((\mathbf{d} + \mathbf{u})'\mathbf{d})^2}{||\mathbf{u}_0||^2 ||\mathbf{d}||^2} \\ &= \frac{||\mathbf{d}||^2}{||\mathbf{u}_0||^2} = \frac{RSS_0 - RSS}{RSS_0} \\ &= 1 - \frac{RSS}{\sum(Y_i - \bar{Y})^2} \;=\; R^2. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Identita v posledním řádku je nejčastější definicí *koeficientu determinace* R^2, který je v případě lineárního modelu shodný se čtvercem výběrového koeficientu mnohonásobné korelace spočítaného z vektoru $\mathbf{Y}$ a odpovídajících netriviálních (nekonstantních) sloupců matice $\mathbf{X}$.

Koeficient determinace ukazuje, jak velký díl výchozí variability hodnot závisle proměnné charakterizované výrazem

$$SST = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 = \|\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}\|^2 = \|\mathbf{u}_0\|^2$$

se nám podařilo uvažovanou závislostí vysvětlit. Nevysvětlená variabilita je dána reziduálním součtem čtverců RSS, v této souvislosti označovaným také jako SSE. Variabilita hodnot $\hat{\mathbf{Y}}_i$, tedy variabilita vysvětlená modelem (uvažovanou závislostí), je dána výrazem

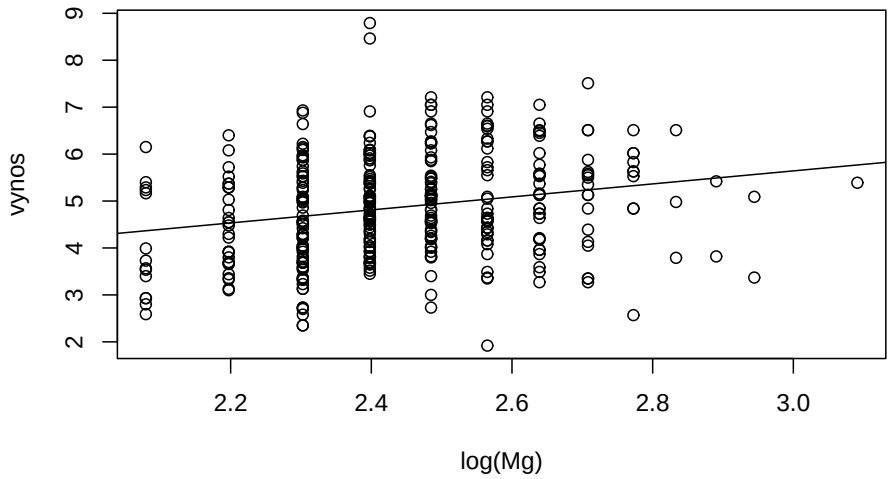
$$SSR = \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2 = \|\hat{\mathbf{Y}} - \bar{Y}\mathbf{1}\|^2 = \|\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_0\|^2 = \|\mathbf{d}\|^2.$$

V normálním modelu můžeme testovou statistiku F pro testování podmodelu určeného požadavkem $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{1}\beta_0$ vyjádřit pomocí koeficientu determinace R^2:

$$\begin{aligned} F &= \frac{SSR}{RSS} \frac{n-r}{r-1} = \frac{1 - RSS/RSS_0}{RSS/RSS_0} \frac{n-r}{r-1} \\ &= \frac{R^2}{1-R^2} \frac{n-r}{r-1}. \end{aligned}$$

Na tomto místě je snad užitečné připomenout, že při testování nulové hypotézy o nezávislosti složek dvourozměrného normálního rozdělení se používá statistika

$$T = \frac{r}{\sqrt{1-r^2}} \sqrt{n-2}$$



Obrázek 3.1: Závislost výnosů na logaritmu koncentrace hořčíku v sušině

přičemž za platnosti nulové hypotézy platí $T^2 \sim \mathsf{F}_{1,n-2}$.

Příklad 3.1 (DRIS) Na základě dat z velkého polního pokusu, který zkoumal předpovědi výnosu podle známého obsahu hořčíku v sušině rostliny během vegetace, vyšla ve zvolených jednotkách předpověď ve tvaru

$$\widehat{\mathsf{výnos}} = 1{,}4851 + 1{,}3857 \cdot \log(\mathsf{Mg}),$$

přičemž směrnice přímky byla odhadnuta se střední chybou 0,3186. Odtud je hodnota t-statistiky rovna $t = 4{,}349$ s dosaženou hladinou $p < 0{,}0001$. O tom, že střední hodnota výnosů závisí na obsahu hořčíku tedy není pochyb. Reziduální součet čtverců je roven $SSE = 418{,}83$, kdežto v podmodelu požadujícím, aby výnos byl konstantní, je reziduální součet čtverců roven $SST = 440{,}48$, tedy jen nepatrně větší. Odtud vyjde $R^2 = 0{,}049$. Tedy pouze 4,9 % variability výnosů lze vysvětlit závislostí na logaritmu koncentrace hořčíku. Tak slabou závislost asi prakticky nedokážeme využít, přestože je směrnice regresní přímky průkazně nenulová.

Následuje výpočet v prostředí R:

```
> summary(vynos.logMg<-lm(vynos~log(Mg),data=Dris))

Call:
lm(formula = vynos ~ log(Mg), data = Dris)
```

```
Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-3.11941 -0.74122 -0.07413  0.74510  3.98408

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   1.4851     0.7790   1.907   0.0574 .
log(Mg)       1.3857     0.3186   4.349 1.77e-05 ***

Residual standard error: 1.07 on 366 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.04915,    Adjusted R-squared: 0.04655
F-statistic: 18.92 on 1 and 366 DF,  p-value: 1.772e-05

> anova(vynos.logMg)
Analysis of Variance Table

Response: vynos
           Df Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
log(Mg)     1  21.65   21.65  18.917 1.772e-05 ***
Residuals 366 418.83    1.14

> anova(vynos.1<-lm(vynos~1,data=Dris))
Analysis of Variance Table

Response: vynos
           Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
Residuals 367 440.48    1.20

> 1-deviance(vynos.logMg)/deviance(vynos.1)
[1] 0.0491461

> plot(vynos~log(Mg),data=Dris)
> abline(vynos.logMg)
```

Jistě nebude obtížné vysvětlit, proč jsou dosažené hladiny (p-hodnoty) v řádku `log(Mg)` v `summary()` a v `anova()` stejné, když testová statistika v `anova()` je druhou mocninou statistiky v `summary()`. ◯

Příklad 3.2 (hmotnost hochů) Snadno se přesvědčíme, že o správnosti závěru příkladu 1.1 (viz též obrázek 1.1), že s každým centimetrem porodní délky chlapce roste jeho porodní hmotnost v průměru o necelých 200 gramů. Lineární regresní model odhaduje, že s každým centimetrem porodní délky roste porodní hmotnost v průměru přibližně o 192 gramů. Tento regresní koeficient je průkazně nenulový. Nestejné porodní hmotnosti hochů vyvětlíme jejich porodními délkami téměř z 57 %:

```
> summary(lm(por.hmot~por.del,data=Hosi0))
```

```
Call:
lm(formula = por.hmot ~ por.del, data = Hosi0)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-1520.33  -188.20   -10.33   189.67  1531.80

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -6230.146    121.095  -51.45   <2e-16
por.del       192.124      2.407   79.81   <2e-16

Residual standard error: 291.7 on 4836 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.5685,     Adjusted R-squared: 0.5684
F-statistic:  6370 on 1 and 4836 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

○

Pokud pracujeme s modelem $\mathbf{Y} \sim \left(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1}\right)$, pak koeficient determinace převezmeme z modelu pro transformovaný vektor $\mathbf{Y}^*$ s varianční maticí $\sigma^2\mathbf{I}$. Odhadem parametru β_0 z podmodelu $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}^* = \mathbf{1}\beta_0$ je pak

$$\bar{Y}_W = \bar{Y}^* = (\mathbf{1}'\mathbf{W}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}'\mathbf{W}\mathbf{Y},$$

takže v podmodelu je reziduální součet čtverců roven

$$RSS_{W0} = RSS_0^* = (\mathbf{Y} - \bar{Y}_W\mathbf{1})'\mathbf{W}(\mathbf{Y} - \bar{Y}_W\mathbf{1}).$$

Je to zřejmě vážený průměr hodnot Y_i. Koeficient determinace bude tedy

$$R_W^2 = 1 - \frac{RSS_W}{RSS_{W0}}.$$

V případě vážené regrese s diagonální maticí $\mathbf{W}$ dostaneme

$$R_W^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n w_{ii}(Y_i - \hat{Y}_{Wi})^2}{\sum_{i=1}^n w_{ii}(Y_i - \bar{Y}_W)^2}.$$

Testy hypotéz o nulovosti jednotlivých složek vektoru $\boldsymbol{\beta}$ ve váženém lineárním modelu jsou totožné s testy stejných hypotéz v modelu pro transformovaný vektor $\mathbf{Y}^*$.

4. Regresní funkce s jedinou nezávisle proměnnou

Nejčastěji se v regresi vyšetřuje regresní přímka. V této kapitole se budeme zabývat zejména přímkou a porovnáváním přímek. Všimneme si také závislostí, které lze popsat pomocí funkce, která je v neznámých parametrech lineární, avšak na jediné nezávisle proměnné t může záviset i nelineárně. Příkladem může být polynom v t.

4.1. Jedna přímka

Tuto jednoduchou situaci pouze shrneme. Předpokládá se n nezávislých náhodných veličin $Y_i \sim \mathsf{N}\big(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2\big)$, kde konstanty $x_1, \ldots, x_n$ nejsou všechny stejné, β_0, β_1 a $\sigma > 0$ jsou neznámé parametry.

Odhady regresních koeficientů jsou dány známými vztahy

$$b_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad b_0 = \bar{Y} - b_1 \bar{x}. \tag{4.1}$$

Reziduální součet čtverců lze vyjádřit jako

$$RSS = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 - b_1 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y}),$$

nestranným odhadem rozptylu je zřejmě

$$S^2 = \frac{RSS}{n-2}.$$

Všimněme si dvou modifikací naší úlohy. Odhad b_1 z (4.1) můžeme přepsat na tvar

$$b_1 = \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \bar{x})^2}{\sum_{t=1}^n (x_t - \bar{x})^2} \frac{Y_i - \bar{Y}}{x_i - \bar{x}},$$

když v případě $x_i = \bar{x}$ nebereme nulový sčítanec v úvahu. Směrnice b_1 je tedy váženým průměrem směrnic $(Y_i - \bar{Y})/(x_i - \bar{x})$ přímek spojujících vždy bod $[x_i, Y_i]$ s těžištěm $[\bar{x}, \bar{Y}]$.

Zajímavou modifikaci dostaneme, když přímku zapíšeme ve tvaru $y = \beta_0^* + \beta_1^*(x - \bar{x})$, kde je samozřejmě $\beta_0^* = \beta_0 + \beta_1\bar{x}$ a $\beta_1^* = \beta_1$. Regresní matice $\mathbf{X}^*$ má v tomto případě tvar

$$\mathbf{X}^* = (\mathbf{1} \quad \mathbf{x} - \bar{x}\mathbf{1}),$$

takže vyjde

$$\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^* = \begin{pmatrix} n & 0 \\ 0 & \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}^{*'}\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} n\bar{Y} \\ \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y}). \end{pmatrix}.$$

Odhady parametrů dostaneme snadno. Jako odhad směrnice dostaneme ihned vzorec identický s odhadem (4.1), pro absolutní člen vyjde $b_0^* = \bar{Y}$, takže po dosazení odhadů do vyjádření β_0 pomocí β_0^* a β_1 vyjde také odhad b_0. Je škoda, že se v tomto tvaru nepracuje s regresní přímkou častěji. Snáze by se interpretoval absolutní člen.

Lineární obaly sloupců matic $\mathbf{X}, \mathbf{X}^*$ jsou totožné, takže totožné jsou také odhady $\hat{Y}_i$ včetně jejich rozdělení. Rozptyl statistiky $\hat{Y}_i$ snáze spočítáme z hvězdičkového modelu. Když využijeme skutečnost, že matice $\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*$ je diagonální a tudíž odhady b_0^*, b_1 jsou nekorelované, dostaneme

$$\begin{aligned} \mathsf{var}\,\hat{Y}_i &= \mathsf{var}\,(b_0^* + b_1(x_i - \bar{x})) \\ &= \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})^2}{\sum_{t=1}^n (x_t - \bar{x})^2} \right). \end{aligned} \tag{4.2}$$

Podobně vyjde

$$\begin{aligned} \mathsf{cov}(\hat{Y}_i, \hat{Y}_j) &= \mathsf{cov}\,(b_0^* + b_1(x_i - \bar{x}), b_0^* + b_1(x_j - \bar{x})) \\ &= \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{\sum_{t=1}^n (x_t - \bar{x})^2} \right), \end{aligned}$$

takže projekční matice $\mathbf{H}$ má prvky (s ohledem na $\mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}} = \sigma^2\mathbf{H}$)

$$h_{ij} = \frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{\sum_{t=1}^n (x_t - \bar{x})^2}. \tag{4.3}$$

Matice $\mathbf{M}$ má tedy prvky (δ_{ij} je Kroneckerovo delta)

$$m_{ij} = \delta_{ij} - \frac{1}{n} - \frac{(x_i - \bar{x})(x_j - \bar{x})}{\sum_{t=1}^n (x_t - \bar{x})^2}.$$

Výsledek (matice $\mathbf{H}, \mathbf{M}$) se týká středních hodnot Y_i, nikoliv třeba regresních koeficientů. Nezávisí na zvoleném parametrickém vyjádření, platí tedy pro obojí parametrické vyjádření.

4.2. Obecnější funkce

Uvažujme nyní závislost $y = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x)$, kde $\mathbf{x}(x)$ je vektor známých spojitých funkcí. Předpokládejme dále, že parametr $\boldsymbol{\beta}$ odhadneme z n nezávislých pozorování $Y_i \sim \mathsf{N}\big(\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x_i), \sigma^2\big)$ s takovými hodnotami $x_1, \ldots, x_n$, že matice $\mathbf{X}$ s i-tým řádkem $\mathbf{x}(x_i)'$ má lineárně nezávislé sloupce. Vektor $\boldsymbol{\beta}$ je pak odhadnutelný, odhad $\mathbf{b}$ má varianční matici $\sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$.

Uvažujme nejprve jedinou pevnou hodnotu x_0. Větu 2.7 použijeme pro hledání *intervalu spolehlivosti* (*konfidenčního intervalu*) pro $\mathsf{E}\,Y(x_0) = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x_0)$. Bodovým odhadem bude zřejmě statistika $\mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0)$ s rozptylem $\sigma^2\mathbf{x}(x_0)'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}(x_0) = \sigma^2 d^2(x_0)$, když jsme takto zavedli nezápornou funkci $d(x)$. Při hledání intervalu spolehlivosti můžeme vyjít z testování hypotézy, že $\mathsf{E}\,Y(x_0) = y_0$. Protože jde o odhad lineárního parametru, má zřejmě podle tvrzení g) obecné věty 2.6 statistika

$$\frac{\mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0) - y_0}{S\ d(x_0)}$$

rozdělení t_{n-k-1}. Interval spolehlivosti pro $\mathsf{E}\,Y(x_0)$ dostaneme jako množinu všech y_0, pro která nulovou hypotézu nezamítneme, tedy

$$\big(\mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0) - t_{n-k-1}(\alpha)S\ d(x_0); \mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0) + t_{n-k-1}(\alpha)S\ d(x_0)\big)\,. \tag{4.4}$$

Hledejme nyní *predikční* interval s vlastností, že s předem danou pravděpodobností obsahuje nezávislé budoucí pozorování $Y(x_0)$ (opět pro pevně zvolené jediné x_0). Zajímáme se o $\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x_0) + e$, kde $e \sim \mathsf{N}\big(0, \sigma^2\big)$. Bodovým odhadem bude opět $\mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0)$, ale rozdíl $Y(x_0) - \mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0)$ bude mít tentokrát rozptyl $\sigma^2(1 + d^2(x_0))$, neboť $Y(x_0)$ a $\mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0)$ jsou nezávislé náhodné veličiny. Příslušný interval tedy má tvar

$$\Big(\mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0) - t_{n-k-1}(\alpha)S\sqrt{1 + d^2(x_0)}; \mathbf{b}'\mathbf{x}(x_0) + t_{n-k-1}(\alpha)S\sqrt{1 + d^2(x_0)}\Big)\,. \tag{4.5}$$

V obou případech se vzniklé intervaly graficky znázorňují pro všechna x z nějakého intervalu spolu s funkcí $\mathbf{b}'\mathbf{x}(x)$. Dostaneme tak *pás spolehlivosti* resp. *predikční pás* kolem regresní funkce.

Speciálně pro regresní přímku dostaneme

$$d^2(x) = \frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \tag{4.6}$$

takže na místě (4.4) interval s krajními body (viz pás spolehlivosti kolem regresní přímky (Anděl, 1978, odst. VI. 3) nebo (Anděl, 1998, odst. 12. 2. B))

$$b_0 + b_1 x \pm S \cdot t_{n-2}(\alpha)\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{\sum_{t=1}^n (x_t - \bar{x})^2}}. \tag{4.7}$$

Podobně jsou krajní body predikčního intervalu jsou v případě regresní přímky dány vztahy

$$b_0 + b_1 x \pm S \cdot t_{n-2}(\alpha)\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{\sum_{t=1}^n (x_t - \bar{x})^2}}. \tag{4.8}$$

4.3. Pás spolehlivosti pro regresní funkci

Uvažujme opět stejnou situaci jako v předchozím oddíle. Místo jediného pevného x nás bude tentokrát zajímat průběh regresní funkce $\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x)$ pro $x \in T$, zpravidla pro $x \in \mathbb{R}$. Takto nelze samozřejmě zapsat regresní funkci vždy, ale jde o případ v praxi často se vyskytující (např. polynom). Uvedeme konstrukci, která vede k *pásu spolehlivosti pro regresní funkci*.

Nechť $\mathcal{K}$ je konfidenční množina pro $\boldsymbol{\beta}$. Zvolme funkce

$$L(x) = \sup_{\boldsymbol{\beta}\in\mathcal{K}} \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x), \qquad U(x) = \sup_{\boldsymbol{\beta}\in\mathcal{K}} \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x). \tag{4.9}$$

Pás spolehlivosti pro regresní funkci sestrojíme jako

$$\mathcal{L} = \{(x, y)' : L(x) \le y \le U(x), x \in T\}.$$

Z toho, jak jsme množinu $\mathcal{L}$ zavedli, plyne, že pro každé $\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{K}$ platí $L(x) \le \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x) \le U(x)$ pro všechna $x \in T$. Je-li spolehlivost $\mathcal{K}$ rovna $1-\alpha$, pak pás $\mathcal{L}$ pokryje funkci $\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x)$ současně pro všechna $x \in T$ s pravděpodobností aspoň $1-\alpha$.

Pokud je u pásu $\mathcal{L}$ zaručena rovnost, hovoří se o *přesném* pásu spolehlivosti. Přesnost pásu může být zaručena, pokud je s pravděpodobností 1 výchozí konfidenční množina konvexní a ohraničená (Zvára (1979)).

Hledejme pás spolehlivosti pro lineární regresní funkci $\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x)$. Jako výchozí konfidenční množinu použijeme elipsoid $\mathcal{K}_2$ z věty 2.7

$$\mathcal{K}_2 = \left\{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}_{k+1} : (\boldsymbol{\beta}-\mathbf{b})'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\boldsymbol{\beta}-\mathbf{b}) \le (k+1)S^2 F_{k+1,n-k-1}(\alpha)\right\}.$$

Vzhledem k tvaru konfidenční množiny nastanou extrémy definující funkce $L(x)$ a $U(x)$ v hraničních bodech $\mathcal{K}_2$, takže k jejich nalezení lze použít metodu Lagrangeových multiplikátorů. Hledáme extrém funkce

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}, \lambda) = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}(x) - \frac{\lambda}{2}\left((\boldsymbol{\beta}-\mathbf{b})'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\boldsymbol{\beta}-\mathbf{b}) - c\right),$$

kde jsme pro stručnost označili $c = (k+1)S^2 F_{k+1,n-k-1}(\alpha)$.

Derivace podle $\boldsymbol{\beta}$ jsou nulové pro $\mathbf{x}(x) = \lambda\mathbf{X}'\mathbf{X}(\boldsymbol{\beta}-\mathbf{b})$. Odtud $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$, v němž nastává extrém, splňuje

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{b} + \frac{1}{\lambda}\left(\mathbf{X}'\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{x}(x).$$

Po dosazení do podmínky dostaneme $1/\lambda = \pm\sqrt{c}/d(x)$, což vede k extrému v $\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{b} \pm \sqrt{c}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}(x)/d(x)$. Extrémní funkční hodnota je tedy

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{x}(x) = \mathbf{b}'\mathbf{x}(x) \pm \frac{\sqrt{c}}{d(x)}\mathbf{x}(x)'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}(x) = \mathbf{b}'\mathbf{x}(x) \pm \sqrt{c}d(x).$$

Vzhledem k nezápornosti funkce $d(x)$ máme výsledné meze pásu spolehlivosti

$$L(x) = \mathbf{b}'\mathbf{x}(x) - S\ d(x)\sqrt{(k+1)\ F_{k+1,n-k-1}(\alpha)}, \tag{4.10}$$

$$U(x) = \mathbf{b}'\mathbf{x}(x) + S\ d(x)\sqrt{(k+1)\ F_{k+1,n-k-1}(\alpha)}. \tag{4.11}$$

Ve speciálním případě regresní přímky dosadíme podle (4.6), takže vyjde pás spolehlivosti (viz též Anděl (1978, str. 149))

$$b_0 + b_1 x \pm S\sqrt{2F_{2,n-2}(\alpha)\left(\frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{\sum_{t=1}^{n}(x_t-\bar{x})^2}\right)}. \tag{4.12}$$

4.4. Inverzní predikce

V praxi často narazíme na úlohu odhadnout ze známé hodnoty závisle proměnné odpovídající hodnotu nezávisle proměnné. Podrobně se této a podobným úlohám věnuje Jílkova (1988) kniha. Pokud hledáme postup, jak k nekonečně mnoha budoucím pozorováním závisle proměnné najít odpovídající hodnoty nezávisle proměnné, jedná se o úlohu *kalibrace*.

Zde uvedeme nejprve jednoduché přibližné řešení úlohy pro jedinou realizaci závisle proměnné (Netter, Wasserman, Kutner (1985), oddíl 5.8), které je použitelné v případě, kdy data jsou velmi dobře popsána regresní přímkou, což se projeví ve velké hodnotě koeficientu determinace.

Předpokládejme, že jsme již odhadli parametry regresní přímky. Získali jsme nové stochasticky nezávislé pozorování Y závisle proměnné, které se řídí stejným modelem, tj. $Y \sim \mathsf{N}(\beta_0 + \beta_1 x, \sigma^2)$. Problém je v tom, že neznáme hodnotu x, takže cílem je najít jednoduchý bodový a intervalový odhad pro x.

Vyjdeme z „naivního odhadu“ $\hat{x}$ určeného vztahem $Y = \bar{Y} + b_1(\hat{x} - \bar{x})$. Po úpravě dostaneme

$$\hat{x} = \bar{x} + \frac{Y - \bar{Y}}{b_1}. \tag{4.13}$$

Rozptyl odhadu určíme pomocí tzv. δ-metody (viz např. Rao (1978, str. 431)) z lineární aproximace odhadové statistiky, která je funkcí tří nezávislých náhodných veličin: $Y, \bar{Y}, b_1$ (připomeňte si druhou parametrizaci přímky). Protože je

$$\frac{\partial\hat{x}}{\partial Y} = \frac{1}{b_1}, \quad \frac{\partial\hat{x}}{\partial\bar{Y}} = -\frac{1}{b_1}, \quad \frac{\partial\hat{x}}{\partial b_1} = -\frac{Y-\bar{Y}}{b_1^2},$$

aproximaci rozptylu statistiky $\hat{x}$ lze psát ve tvaru

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\,\hat{x} &\doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{b_1} \\ -\frac{1}{b_1} \\ -\frac{Y-\bar{Y}}{b_1^2} \end{pmatrix}' \sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{n} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{T_{xx}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{b_1} \\ -\frac{1}{b_1} \\ -\frac{Y-\bar{Y}}{b_1^2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\sigma^2}{b_1^2}\left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(Y-\bar{Y})^2}{b_1^2}\frac{1}{T_{xx}}\right),\end{aligned}$$

když jsme zavedli označení $T_{xx} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$. Použijeme-li vztah $Y - \bar{Y} = b_1(\hat{x} - \bar{x})$ a neznámý rozptyl σ^2 nahradíme jeho odhadem S^2, dostaneme nakonec přibližný odhad rozptylu $\hat{x}$

$$\widehat{\mathsf{var}}\,\hat{x} \doteq \frac{S^2}{b_1^2}\left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(\hat{x}-\bar{x})^2}{T_{xx}}\right). \tag{4.14}$$

Přibližný interval spolehlivosti pro hledanou hodnotu x má tedy krajní body

$$\hat{x} \pm \frac{S}{|b_1|}t_{n-2}(\alpha)\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(\hat{x}-\bar{x})^2}{T_{xx}}}. \tag{4.15}$$

Všimněte si nápadné podoby s predikčním intervalem (4.8). Interval (4.15) je totiž vzorem predikčního intervalu (4.8), když ke zobrazení použijeme odhad regresní funkce.

Věnujme se ještě malé modifikaci úlohy. Kdybychom hledali hodnotu nezávisle proměnné k *dané střední hodnotě* $\mu = \mathsf{E}\,Y$ závisle proměnné, dostali bychom přibližný interval s krajními body (srovnej s (4.7))

$$\bar{x} + \frac{\mu - \bar{Y}}{b_1} \pm \frac{S}{|b_1|}t_{n-2}(\alpha)\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(\hat{x}-\bar{x})^2}{T_{xx}}}. \tag{4.16}$$

Příklad 4.1 (listy) V laboratorním pokusu byly zaznamenávány každý den délky prvních pří listů rostlinky pšenice. Zajímá nás nyní okamžik, kdy první list dosáhl délky 20 mm. Bodový odhad je jednoduchý:

```
> attach(Listy)
> d.0 <- 20
> summary(a.1<-lm(delka~den,subset=List==1))

Call:
lm(formula = delka ~ den, subset = List == 1)

Residuals:
       1        2        3        4        5        6        7
-0.04574 -0.34894  0.04787  0.24468  0.34149 -0.06809 -0.17128
```

```
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  -2.5766     0.3869   -6.66  0.00115 **
den           1.2032     0.0354   33.99 4.15e-07 ***

Residual standard error: 0.2595 on 5 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9957,     Adjusted R-squared: 0.9948
F-statistic:  1155 on 1 and 5 DF,  p-value: 4.147e-07

> print(d.1<-(d.0-coef(a.1)[1])/coef(a.1)[2])
(Intercept)
   18.76393
```

Nyní si připravíme a uložíme mezivýsledky, které budeme dál potřebovat.

```
> print(x.bar<-mean(den[List==1]))
[1] 10.57143
> print(y.bar<-mean(delka[List==1]))
[1] 10.14286
> print(Txx<-sum((den[List==1]-x.bar)^2))
[1] 53.71429
> print(b1<-coef(a.1)[2])
     den
1.203191
```

Střední chybu odhadu pro den, kdy bylo dosaženo zvolené délky dostaneme ze střední chyby pro odhad $\mathsf{E}\,Y$ pro $x = \hat{x}$:

```
> SE.d.1<-predict(a.1,newdata=data.frame(den=d.1),
                                        se.fit=T)$se.fit/coef(a.1)[2]
> print(SE.d.1)
      den
0.2544561
```

Hledaný interval pak už najdeme snadno.

```
> print(t.1<-qt(.975,a.1$df.resid))
[1] 2.570582
> int.1<-c(d.1,SE.d.1)%*%matrix(c(1,0,1,-t.1,1,t.1),2,3)
> int.1
         [,1]     [,2]     [,3]
[1,] 18.76393 18.10983 19.41803
```

○

Naznačme ještě jednu metodu, tentokrát přesnou, nikoliv založenou na aproximaci. *Fiellerova metoda* spočítá v tom, že vyjdeme z testování nulové hypotézy, podle které je hledané x rovno danému x_0. Interval spolehlivosti bude pak tvořen

množinou takových x_0, pro která nulovou hypotézu na zvolené hladině nezamítneme. Modifikací predikčního intervalu (4.8) jde o množinu danou nerovností

$$|Y - \bar{Y} - b_1(x_0 - \bar{x})| < S \cdot t_{n-2}(\alpha)\sqrt{\left(1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{T_{xx}}\right)}. \tag{4.17}$$

Této nerovnosti vyhoví všechna x_0 splňující

$$A(x_0 - \bar{x})^2 + B(x_0 - \bar{x}) + C < 0, \tag{4.18}$$

kde koeficient u druhé mocniny je roven

$$A = b_1^2 - \frac{S^2 t_{n-2}^2(\alpha)}{T_{xx}}.$$

Řešením nerovnosti (4.18) je interval, jen když je A kladné, což je právě tehdy, když na hladině α je směrnice β_1 průkazně nenulová. Podobně se řeší úloha najít interval spolehlivosti pro x_0, v němž je regresní funkce rovna dané hodnotě μ, jen z výrazu pod odmocninou v (4.17) odpadne jednička. Jednoduchý program dal v příkladu listy následující 95% intervaly spolehlivosti:

```
        x.Hat   xHat.L   xHat.U
[1,] 18.76393 18.15339 19.46873
[2,] 21.28621 20.91857 21.71346
[3,] 26.89329 26.50909 27.34021
```

4.5. Několik přímek

Vyšetřujme nyní k nezávisle odhadovaných regresních přímek. Máme k disposici nezávislé náhodné veličiny $Y_{ij} \sim \mathsf{N}(\beta_{0i} + \beta_{1i}x_{ij}, \sigma^2)$, přičemž u i-té přímky máme n_i pozorování. Celkem je tedy $n = \sum_{i=1}^{I} n_i$ pozorování. Parametry $\beta_{0i}, \beta_{1i}, \sigma > 0$ odhadujeme.

Všechna data lze zapsat maticově

$$\begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ \vdots \\ Y_{1n_1} \\ \vdots \\ Y_{I1} \\ \vdots \\ Y_{In_I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & x_{12} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1n_1} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & x_{I1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & x_{In_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{01} \\ \beta_{11} \\ \vdots \\ \beta_{0I} \\ \beta_{1I} \end{pmatrix} + \mathbf{e}, \tag{4.19}$$

kde náhodný vektor $\mathbf{e}$ má rozdělení $\mathsf{N}(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I})$.

Z blokově diagonální struktury regresní matice je zřejmé, že odhady přímek jsou nezávislé, že reziduální součet čtverců v modelu je součtem reziduálních součtů čtverců u jednotlivých přímek. Snadno lze z blokové struktury matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ odvodit, že její determinant je roven součinu determinantů jednotlivých diagonálních bloků

$$\det(\mathbf{X}'\mathbf{X}) = \prod_{i=1}^{I} n_i \sum_{t=1}^{n_i} (x_{it} - \bar{x}_i)^2.$$

Odtud plyne, že matice modelu bude mít lineárně nezávislé sloupce právě tehdy, když pro každou přímku máme pozorování aspoň ve dvou různých bodech x_{ij}.

Testujme podmodel, který vyjadřuje předpoklad, že směrnice všech přímek jsou shodné, tedy přímky jsou rovnoběžné. Podmodel znamená, že platí

$$\begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ \vdots \\ Y_{1n_1} \\ \vdots \\ Y_{I1} \\ \vdots \\ Y_{In_I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & x_{11} \\ 1 & \cdots & 0 & x_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cdots & 0 & x_{1n_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & x_{I1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & x_{In_I} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{01} \\ \vdots \\ \beta_{0I} \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \mathbf{e}, \tag{4.20}$$

Že jde o podmodel je zřejmé z toho, že sloupce nové regresní matice lze snadno získat z původní: sloupce s jedničkami a nulami ponecháme, ostatní sloupce sečteme. Pokud výchozí matice měla úplnou hodnost, nová matice má stejnou vlastnost. Podrobněji je hodnost této regresní matice vyšetřena v příkladu 2.2.

Příklad 4.2 (listy) Všímejme se nyní opakovaného měření délky prvních tří listů rostlinky pšenice. Na obrázku 4.1 jsou znázorněna data a příslušné regresní přímky. Odhady ve výchozím modelu jsou (`List` je faktor, nechali jsme standardní nastavení kontrastů v R na `contr.treatment` – viz str. 55)

```
> summary(a.obec<-lm(delka~den*List,data=Listy))

Call:
lm(formula = delka ~ den * List, data = Listy)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.91073 -0.17127 -0.05549  0.22735  0.92575

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  -2.57660    0.79354  -3.247    0.007 **
```

```
den           1.20319    0.07261  16.570 1.24e-09 ***
List2       -36.20834    1.92114 -18.847 2.79e-10 ***
List3       -48.81182    2.30132 -21.210 7.02e-11 ***
den:List2     1.55845    0.12236  12.737 2.48e-08 ***
den:List3     1.45131    0.11210  12.947 2.07e-08 ***

Residual standard error: 0.5322 on 12 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9951,     Adjusted R-squared: 0.9931
F-statistic: 488.2 on 5 and 12 degrees of freedom,   p-value: 1.996e-013
```

Jednotlivé přímky mají rovnice (konfrontujte s odhady regresních koeficientů)

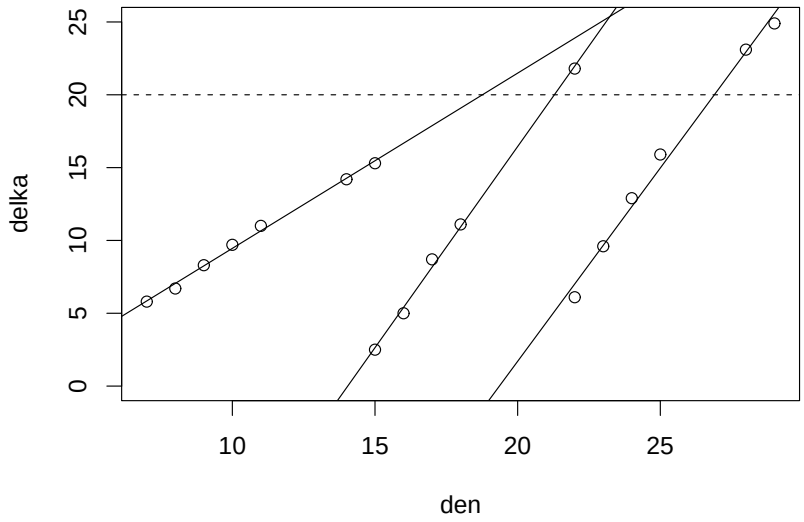
$$y = -2{,}577 + 1{,}203x \qquad \text{1. přímka}$$
$$y = (-2{,}577 - 36{,}208) + (1{,}203 + 1{,}558)x \qquad \text{2. přímka}$$
$$y = (-2{,}577 - 48{,}812) + (1{,}203 + 1{,}451)x \qquad \text{3. přímka}$$

Zkusme vyšetřit podmodel, v němž jsou všechny tři přímky rovnoběžné:

```
> summary(a.rovno<-lm(delka~den+List,data=Listy))

Call:
lm(formula = delka ~ den + List, data = Listy)

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max
-3.877 -1.516  0.284  1.588  3.004

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -11.4217     2.3175  -4.928 0.000222 ***
den           2.0399     0.2039  10.003 9.31e-08 ***
List2       -14.6604     1.9469  -7.530 2.75e-06 ***
List3       -24.4989     3.2289  -7.587 2.52e-06 ***

Residual standard error: 2.25 on 14 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.898,      Adjusted R-squared: 0.8761
F-statistic: 41.08 on 3 and 14 DF,  p-value: 3.449e-07
```

O podmodelu rozhodneme pomocí F testu

```
> anova(a.rovno,a.obec)
Analysis of Variance Table

Model 1: delka ~ den + List
Model 2: delka ~ den + List + den:List
  Res.Df    RSS Df Sum of Sq      F    Pr(>F)
1     14 70.883
2     12  3.399  2    67.484 119.14 1.215e-08 ***
```



Obrázek 4.1: Závislost délky listu na době pro jednotlivé listy

Po shlédnutí obrázku 4.1 nepřekvapí, že jsme hypotézu o rovnoběžnosti zamítli. Jinak by to dopadlo s testem nulové hypotézy, podle které se neliší rychlosti růstu druhého listu a třetího listu. Tato hypotéza má svoje biologické zdůvodnění, navíc souvisí s původní otázkou experimentátora, totiž, zda jsou konstantní časové odstupy mezi okamžiky, kdy jednotlivé listy dosahují předem zvolené pevné délky 20 mm.

```
> summary(a.rovno23<-lm(delka~den+List+(List!=1):den,data=Listy))

Call:
lm(formula = delka ~ den + List + (List != 1):den, data = Listy)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.86854 -0.26686  0.03317  0.23346  0.93341

Coefficients:
                  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)        -2.57660    0.78357  -3.288  0.00588 **
den                 1.20319    0.07170  16.781 3.43e-10 ***
List2             -35.13203    1.38800 -25.311 1.91e-12 ***
```

```
List3             -49.96907    1.79745 -27.800 5.76e-13 ***
den:List != 1TRUE   1.49730    0.09592  15.610 8.43e-10 ***

Residual standard error: 0.5255 on 13 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9948,     Adjusted R-squared: 0.9932
F-statistic: 625.8 on 4 and 13 DF,  p-value: 1.021e-14
```

Za předpokladu, že přímky pro druhý a třetí list jsou rovnoběžné, dostáváme jejich odhady

$$y = -2{,}577 + 1{,}203x \qquad \text{1. přímka}$$
$$y = (-2{,}577 - 35{,}132) + 1{,}497x \qquad \text{2. přímka}$$
$$y = (-2{,}577 - 49{,}969) + 1{,}497x \qquad \text{3. přímka}$$

```
> anova(a.rovno,a.rovno23,a.obec)
Analysis of Variance Table

Model 1: delka ~ den + List
Model 2: delka ~ den + List + (List != 1):den
Model 3: delka ~ den * List
  Res.Df    RSS Df Sum of Sq        F    Pr(>F)
1     14 70.883
2     13  3.590  1    67.293 237.6015 2.845e-09 ***
3     12  3.399  1     0.191   0.6755    0.4272
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1
```

Poslední tabulka je ukázkou testů popsaných ve větách 3.1 a 3.2. Z výsledku je patrné, že se problémům způsobeným nerovnoběžností přímek nevyhneme. Druhou a třetí přímku lze považovat za rovnoběžné, první má však průkazně menší sklon. ○

5. Identifikace

Tato kapitola se týká lineárního modelu, v němž regresní matice $\mathbf{X}$ nemá úplnou hodnost. Budeme se zabývat způsoby, jak z nekonečně mnoha možných řešení normální rovnice zvolit jediné řešení. Je sice pravda, že každý lineární model s neúplnou hodností lze reparametrizovat tak, aby regresní matice měla lineárně nezávislé sloupce (mohli bychom použít již několikrát zmíněnou ortonormální bázi $\mathbf{Q}$), ale mnohdy bychom si zkomplikovali samotný model a především interpretaci zjištěných závěrů. To platí zejména o modelech analýzy rozptylu.

5.1. Nejkratší řešení normální rovnice

Nejprve uvedeme pěkné řešení, které je spíše zajímavé, než aby bylo praktické.

Připomeňme, že Mooreova-Penroseho pseudoinverze $\mathbf{X}^+$ k matici $\mathbf{X}$ vyhovuje vztahům $\mathbf{X}\mathbf{X}^+\mathbf{X} = \mathbf{X}$, $\mathbf{X}^+\mathbf{X}\mathbf{X}^+ = \mathbf{X}^+$, přičemž matice $\mathbf{X}^+\mathbf{X}$ a $\mathbf{X}\mathbf{X}^+$ jsou symetrické (viz například (Rao, 1978, odst. 1b. 5 (VIII))) a že $\mathbf{X}^+$ je dána jednoznačně.

Věta 5.1. Vektor $\mathbf{b}^+ = \mathbf{X}^+\mathbf{Y}$ je jediným nejkratším řešením normální rovnice $\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b} = \mathbf{X}'\mathbf{Y}$.

D ů k a z: Nejprve dosadíme $\mathbf{b}^+$ do levé strany normální rovnice:

$$\begin{aligned}\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b}^+ &= \mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{X}^+\mathbf{Y}\\ &= \mathbf{X}'(\mathbf{X}\mathbf{X}^+)'\mathbf{Y} \qquad \text{(ze symetrie } \mathbf{X}\mathbf{X}^+\text{)}\\ &= (\mathbf{X}\mathbf{X}^+\mathbf{X})'\mathbf{Y} \qquad \text{(ale platí } \mathbf{X}\mathbf{X}^+\mathbf{X} = \mathbf{X}\text{)}\\ &= \mathbf{X}'\mathbf{Y},\end{aligned}$$

což dokazuje, že $\mathbf{b}^+$ je řešením normální rovnice.

Z teorie lineárních rovnic je známo, že vektor $\mathbf{b}$ je řešením normální rovnice, právě když platí $\mathbf{b} = \mathbf{b}^+ + \mathbf{a}$, kde je $\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{0}$, což je ale totéž, jako $\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{0}$. Proveďme pomocný výpočet

$$\begin{aligned}\mathbf{a}'\mathbf{b}^+ &= \mathbf{a}'\mathbf{X}^+\mathbf{Y} = \mathbf{a}'(\mathbf{X}^+\mathbf{X})\mathbf{X}^+\mathbf{Y}\\ &= \mathbf{a}'(\mathbf{X}^+\mathbf{X})'\mathbf{X}^+\mathbf{Y} = (\mathbf{a}'\mathbf{X}')\mathbf{X}^{+'}\mathbf{X}^+\mathbf{Y} = \mathbf{0}.\end{aligned}$$

Nyní můžeme zdola omezit čtverec délky vektoru $\mathbf{b}$:

$$\|\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{b}^+ + \mathbf{a}\|^2 = \|\mathbf{b}^+\|^2 + 2\mathbf{a}'\mathbf{b}^+ + \|\mathbf{a}\|^2 \geq \|\mathbf{b}^+\|^2$$

s rovností právě, když je $\mathbf{b} = \mathbf{b}^+$. □

Poznámka Matici $\mathbf{X}^+$ lze zkonstruovat pomocí rozkladu podle singulárních hodnot (A.6) $\mathbf{X} = \mathbf{U}^0\mathbf{D}\mathbf{V}^{0\prime}$ jako $\mathbf{X}^+ = \mathbf{V}^0\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}^{0\prime}$. Snadno se ověří, že jsou splněny všechny čtyři požadavky na Mooreovu-Penroseho matici. V prostředí R lze vektor $\mathbf{X}^+$ počítat pomocí procedury `ginv()` knihovny MASS nebo pomocí následující zjednodušené procedury:

```
mp.inv <- function(X,eps=sqrt(.Machine$double.eps)){
   a <- svd(X)
   nn <- a$d>eps*a$d[1]
   if (any(nn)) a$v[,nn]%*%(t(a$u[,nn])/a$d[nn]) else t(X)*0
}
```

K vysvětlení funkce `mp.inv()` je třeba poznamenat, že funkce `svd()` dá v prostředí R všechny tři matice z rozkladu podle singulárních hodnot (A.8), přičemž diagonála `a$d` matice $\mathbf{D}$ (tedy singulární hodnoty) tvoří nerostoucí posloupnost (a matice $\mathbf{U}^0, \mathbf{V}^0$ mají odpovídajícím způsobem uspořádané sloupce).

Příklad 5.1 (měď) Na pěti místech bylo nepřímo hodnoceno znečištění řeky tak, že vždy nu sedmi vylovených ryb byl zjištěn logaritmus koncentrace mědi. Data jsou uvedena v knížce Zvára (1998). Jedná se o úlohu analýzy rozptylu jednoduchého třídění. Použijeme-li parametrizaci $\mathsf{E}\, Y_{it} = \mu + \alpha_i$ z (2.16), nejsou hlavní efekty $\alpha_1, \ldots, \alpha_5$ odhadnutelné. K výpočtu nejkratšího řešení normální rovnice pro odhady parametrů $\mu, \alpha_1, \ldots, \alpha_5$ použijeme právě zavedenou funkci `mp.inv`.

```
> attach(Med)
> X <- 1; for (m in levels(Misto)) X <- cbind(X,Misto==m)
> print(b.plus <- as.vector(mp.inv(X)%*%lnCu))
[1]  0.30230952  0.26611905  0.18126190  0.19297619 -0.36502381  0.02697619
```

Snadno lze zjistit (např. pomocí `sqrt(crossprod(b.plus))`), že je $||\mathbf{b}^+|| = 0{,}605$, kdežto při standardní parametrizaci R vyjde $||\mathbf{b}|| = 0{,}889$. ◯

5.2. Identifikační omezení

Připomeňme, že pro $\mathcal{M}(\mathbf{A}') \subset \mathcal{M}(\mathbf{X}')$ jsou v modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ složky vektoru $\mathbf{A}\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelné, takže požadavkem na splnění netriviální konzistentní soustavy lineárních rovnic $\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{c}$ jsme v oddílu 3.3 určili podmodel. Lze očekávat, že

k novému účelu (určení jediného řešení normální rovnice) musíme použít nějaká jiná lineární omezení. Jistě, podle věty 2.4 by inkluse $\mathcal{M}(\mathbf{A}') \subset \mathcal{M}(\mathbf{X}')$ znamenala, že vektor $\mathbf{Ab}$ by byl pro všechna řešení normální rovnice $\mathbf{X}'\mathbf{Xb} = \mathbf{X}'\mathbf{Y}$ stejný. K určení jediného řešení normální rovnice takovou matici $\mathbf{A}$ použít nemůžeme.

Uvažujme jako určující (identifikační) omezení vektoru $\boldsymbol{\beta}$ soustavu lineárních rovnic. Řekneme, že omezení (tzv. *reparametrizační* rovnice)

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \tag{5.1}$$

identifikuje vektor $\boldsymbol{\beta}$ v modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$, když ke každému $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$ existuje jediný vektor $\boldsymbol{\beta}$, který splňuje současně

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \quad \mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}.$$

Věta 5.2. (Scheffého) Omezení $\mathbf{A}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$ identifikuje vektor $\boldsymbol{\beta}$ právě tehdy, když platí

$$\mathcal{M}(\mathbf{A}') \cap \mathcal{M}(\mathbf{X}') = \{\mathbf{0}\}, \tag{5.2}$$
$$\mathsf{h}(\mathbf{X}) + \mathsf{h}(\mathbf{A}) = k + 1. \tag{5.3}$$

D ů k a z: První požadavek zajišťuje existenci $\boldsymbol{\beta}$, druhý jeho jednoznačnost. Začneme existencí (omezení na $\boldsymbol{\beta}$ nesmí být příliš silné). Pro každé $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$ musí mít rovnice v $\boldsymbol{\beta}$

$$\begin{pmatrix}\mathbf{X}\\ \mathbf{A}\end{pmatrix}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{D}\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{\mu}\\ \mathbf{0}\end{pmatrix}$$

nějaké řešení. Pro každé $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{k+1}$ tedy musí platit

$$\left\{\begin{pmatrix}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\\ \mathbf{0}\end{pmatrix} : \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{k+1}\right\} \subset \mathcal{M}(\mathbf{D}),$$

což je postupně ekvivalentní se vztahy

$$\begin{aligned}
&\mathcal{M}(\mathbf{D})^\perp \subset \left\{\begin{pmatrix}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\\ \mathbf{0}\end{pmatrix} : \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{k+1}\right\}^\perp && ,\\
&(\mathbf{v}_1', \mathbf{v}_2')\,\mathbf{D} = \mathbf{0} \Rightarrow (\mathbf{v}_1', \mathbf{v}_2')\begin{pmatrix}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\\ \mathbf{0}\end{pmatrix} = \mathbf{0} && \text{pro všechna } \boldsymbol{\beta},\\
&\mathbf{v}_1'\mathbf{X} = -\mathbf{v}_2'\mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{v}_1'\mathbf{X} = \mathbf{0}'. &&
\end{aligned}$$

Poslední implikaci lze interpretovat tak, že každý vektor, který je současně v $\mathcal{M}(\mathbf{X}')$ a $\mathcal{M}(\mathbf{A}')$, musí být nutně nulový, což je přesně požadavek (5.2).

Požadavek na jednoznačnost je požadavkem na hodnost matice $\mathbf{D}$. Protože řádky matice $\mathbf{X}$ hodnosti r jsou také řádky matice $\mathbf{D}$, musí platit $\mathsf{h}(\mathbf{A}) \geq k + 1 - r$.

Protože ale lineární obaly řádků matic $\mathbf{X}', \mathbf{A}'$ mají společný pouze nulový vektor, musí nutně platit (5.3). □

Prakticky si můžeme představit hledání jediného řešení normální rovnice jako řešení soustavy rovnic

$$\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b} = \mathbf{X}'\mathbf{Y}$$
$$\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{0},$$

neboť druhá rovnice je ekvivalentní se vztahem $\mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{0}$. Řešení soustavy musí vyhovovat také rovnici $\mathbf{D}'\mathbf{D}\mathbf{b} = \mathbf{X}'\mathbf{Y}$, takže vyjde

$$\mathbf{b} = (\mathbf{D}'\mathbf{D})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}. \tag{5.4}$$

Uvedený postup lze prakticky zařídit tak, že regresní matici $\mathbf{X}$ rozšíříme o řádky matice $\mathbf{A}$ na matici $\mathbf{D}$ a současně vektor $\mathbf{Y}$ rozšíříme o stejný počet nul.

Příklad 5.2 (jednoduché třídění) Model jednoduchého třídění jsme zavedli již v (2.16). Příslušnou matici plánu $\mathbf{X}$ jsme uvedli v (2.17). Jako reparametrizační podmínku (umožňující určení jediného řešení normální rovnice) lze použít každé omezení

$$a_0\mu + \sum_{i=1}^{I} a_i\alpha_i = 0,$$

jehož levá strana není odhadnutelný parametr, tedy nemá tvar (2.18). Nesmí tedy být
$\sum_{i=1}^{I} a_i = a_0$. Tomu odpovídají například následující matice a odpovídající podmínky:

$$\mathbf{A} = (0, 1, \ldots, 1) \longleftrightarrow \sum_{i=1}^{I} \alpha_i = 0, \tag{5.5}$$

$$\mathbf{A} = (0, n_1, \ldots, n_I) \longleftrightarrow \sum_{i=1}^{I} n_i\alpha_i = 0,$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{j}_j' \longleftrightarrow \alpha_j = 0 \text{ pro zvolené } j. \tag{5.6}$$

Jak uvidíme v příští kapitole, omezení (5.5) a (5.6) lze v prostředí R uplatnit. ◯

Příklad 5.3 (měď) Omezení (5.6) pro $j = 1$ dostaneme pomocí matice $\mathbf{A} = (0, 1, 0, 0, 0, 0)$. Navážeme na příklad 5.1.

```
> attach(Med)
> D <- rbind(X,c(0,1,0,0,0,0))
> print(as.vector(b.1 <- solve(t(D)%*%D)%*%t(X)%*%lnCu))
[1]  5.684286e-01  1.729283e-15 -8.485714e-02 -7.314286e-02 -6.311429e-01
[6] -2.391429e-01
> c(as.vector(crossprod(lnCu-X%*%b.1)),deviance(a<-lm(lnCu~Misto)))
```

```
  [1] 2.284876   2.284876
> summary(a)
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.56843    0.10431   5.449 6.55e-06
MistoB      -0.08486    0.14752  -0.575 0.569416
MistoC      -0.07314    0.14752  -0.496 0.623625
MistoD      -0.63114    0.14752  -4.278 0.000177
MistoE      -0.23914    0.14752  -1.621 0.115452
F-statistic: 5.896 on 4 and 30 DF,  p-value: 0.001265
```

Je zřejmé, že opravdu přehled `summary()` použitý na model analýzy rozptylu jednoduchého třídění dá bodové odhady totožné s odhady určenými identifikační podmínkou s maticí $\mathbf{A} = (0, 1, 0, 0, 0, 0)$. ◯

6. Analýza rozptylu

6.1. Jednoduché třídění

Připomeňme si model analýzy rozptylu jednoduchého třídění, který jsme zavedli již v 2. kapitole. Předpokládáme, že máme nezávislé náhodné veličiny $Y_{11}, \ldots, Y_{1n_1}, \ldots, Y_{I1}, \ldots, Y_{In_I}$, pro které platí $Y_{it} \sim \mathsf{N}(\mu_i, \sigma^2)$. Jde tedy o I nezávislých výběrů z normálního rozdělení, přičemž u každého výběru připouštíme obecně jinou střední hodnotu, rozptyl je ve všech výběrech stejný.

Úlohu můžeme zapsat jako normální lineární model $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$, když zvolíme

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{Y}_I \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{n_1} & \mathbf{0} & \ldots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_{n_2} & \ldots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ldots & \mathbf{1}_{n_I} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_I \end{pmatrix}, \tag{6.1}$$

kde vektor $\mathbf{Y}_i = (Y_{i1}, \ldots, Y_{in_i})'$ obsahuje pozorování z i-tého výběru. Zřejmě vyjde $b_i = \bar{Y}_{i\bullet}$ (průměr v i-tém výběru) a tedy reziduální součet čtverců je roven

$$SS_e = \sum_{i=1}^{I} \sum_{t=1}^{n_i} (Y_{it} - \bar{Y}_{i\bullet})^2.$$

Běžně testovaná hypotéza $\mathsf{H}_0 : \mu_1 = \ldots = \mu_I$ vede k podmodelu, který je dán regresní maticí $\mathbf{X}_0 = \mathbf{1}_n$, kde $n = \sum_{i=1}^{I} n_i$. Tentokrát vyjde $b_0 = \bar{Y}$ (průměr ze všech n pozorování). Odtud je celkový součet čtverců roven

$$SS_T = \sum_{i=1}^{I} \sum_{t=1}^{n_i} (Y_{it} - \bar{Y})^2.$$

Snadno lze spočítat také

$$\mathbf{d} = \hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_0 = \begin{pmatrix} (\bar{Y}_{1\bullet} - \bar{Y})\mathbf{1}_{n_1} \\ \vdots \\ (\bar{Y}_{I\bullet} - \bar{Y})\mathbf{1}_{n_I} \end{pmatrix},$$

odkud snadno vyjde

$$\|\mathbf{d}\|^2 = SS_A = SS_T - SS_e = \sum_{i=1}^{I} n_i(\bar{Y}_{i\bullet} - \bar{Y})^2, \tag{6.2}$$

když jsme zavedli často používané označení SS_A pro součet čtverců vysvětlený (zde jediným) faktorem A.

Uveďme explicitně rozklad součtu čtverců v analýze rozptylu jednoduchého třídění (celková variabilita=variabilita uvnitř výběrů+variabilita mezi výběry), který vznikne úpravou (6.2)

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{I}\sum_{t=1}^{n_i}(Y_{it} - \bar{Y})^2 &= \sum_{i=1}^{I}\sum_{t=1}^{n_i}(Y_{it} - \bar{Y}_{i\bullet})^2 + \sum_{i=1}^{I} n_i(\bar{Y}_{i\bullet} - \bar{Y})^2, \\ SS_T &= SS_e + SS_A. \end{aligned} \tag{6.3}$$

O nulové hypotéze rozhodujeme pomocí statistiky (3.10) z věty 3.1:

$$F = \frac{SS_A/(I-1)}{SS_e/(n-I)} = \frac{MS_A}{MS_e}.$$

Výpočet se často vyjadřuje pomocí *tabulky analýzy rozptylu*, jejíž schéma je uvedeno v tabulce 6.1.

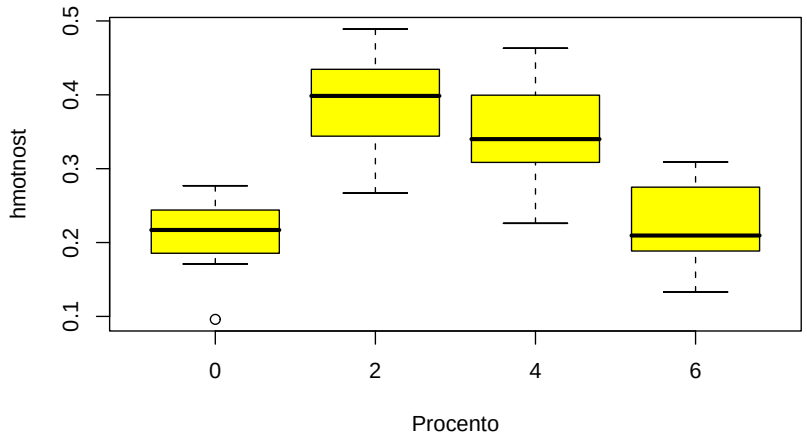
Tabulka 6.1: Tabulka analýzy rozptylu jednoduchého třídění

variabilita	stupně vol.	součet čtverců	průměrné čtverce	F	p
ošetření	$I-1$	SS_A	$MS_A = SS_A/(I-1)$	F	p
reziduální	$n-I$	SS_e	$MS_e = SS_e/(n-I)$	-	-
celková	$n-1$	SS_T	-	-	-

Příklad 6.1 (kořeny) Student zjišťoval hmotnost kořenového systému rostlin pěstovaných v živných roztocích s různými koncentracemi cukru (viz obrázek 6.1 získaný pomocí `plot(hmotnost~Procento,data=Koreny,col="yellow")`). Pomocí funkce `anova()` uplatněné na výsledek procedury `lm()` dostaneme tabulku analýzy rozptylu

```
> anova(lm(hmotnost~Procento,data=Koreny))
Analysis of Variance Table

Response: hmotnost
          Df   Sum Sq  Mean Sq F value    Pr(>F)
Procento   3 0.312687 0.104229  28.568 6.641e-11
Residuals 50 0.182422 0.003648
---
```

z níž je patrné, že rozdíl mezi roztoky je průkazný. Identický výsledek by dala procedura: `summary(aov(hmotnost~Procento,data=Koreny))`. ◯



Obrázek 6.1: Závislost hmotnosti kořenové části na procentu cukru v živném roztoku

6.1.1. Kontrasty

Uvažujme nyní klasickou parametrizaci $\mathsf{E}\, Y_{it} = \mu + \alpha_i$ úlohy jednoduchého třídění. Vektor parametrů má tvar $\boldsymbol{\beta} = (\mu, \boldsymbol{\alpha}')' = (\mu, \alpha_1, \ldots, \alpha_I)'$, regresní matice pak $\mathbf{X} = (\mathbf{1}, \mathbf{F})$, kde $\mathbf{F}$ je jiné označení pro matici $\mathbf{X}$ zavedené v (6.1). Matici $\mathbf{F}$ budeme ještě opakovaně používat. Připomeňme zjištění příkladu 2.1, podle kterého je v tomto modelu parametr $\mathbf{t}'\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelný, když vektor $\mathbf{t}$ má tvar $\mathbf{t} = (\mathbf{1}'\mathbf{c}, \mathbf{c}')$. Speciální případ odhadnutelného parametru, kdy je $t_0 = \mathbf{1}'\mathbf{c} = \sum c_i = 0$, se nazývá *kontrast*. Je zřejmé, že kontrast závisí pouze na efektech α_i jednotlivých ošetření, nikoliv na μ.

Zabývejme se nyní odhadem kontrastu. Označme $\mathbf{D} = \mathbf{F}'\mathbf{F} = \operatorname{diag}\{n_1, \ldots, n_I\}$ a $\mathbf{n} = (n_1, \ldots, n_I)'$. Matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ má nyní tvar

$$\mathbf{X}'\mathbf{X} = \begin{pmatrix} n & \mathbf{n}' \\ \mathbf{n} & \mathbf{D} \end{pmatrix},$$

není sice regulární, ale snadno se ověří, k jejím pseudoinverzím patří také

$$(\mathbf{X}'\mathbf{X})^- = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{0}' \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{-1} \end{pmatrix}.$$

Označme $\mathbf{b} = (m, \mathbf{a}')'$ jakékoliv řešení normální rovnice v modelu analýzy rozptylu jednoduchého třídění. Pro odhad $\mathbf{c}'\mathbf{a}$ kontrastu $(0, \mathbf{c}')'\boldsymbol{\beta} = \mathbf{c}'\boldsymbol{\alpha}$ tedy podle (2.22)

platí

$$\mathbf{c}'\mathbf{a} \sim \mathsf{N}\big(\mathbf{c}'\boldsymbol{\alpha}, \sigma^2\mathbf{c}'\mathbf{D}^{-1}\mathbf{c}\big) = \mathsf{N}\left(\sum_{i=1}^{I} c_i\alpha_i, \sigma^2\sum_{i=1}^{I}\frac{c_i^2}{n_i}\right).$$

Kontrasty dané vektory $\mathbf{c}$ a $\mathbf{d}$ se nazývají *ortogonální kontrasty*, když jsou vektory $\mathbf{c}, \mathbf{d}$ ortogonální. Kovariance jejich odhadů je rovna

$$\sigma^2\mathbf{c}'\mathbf{D}^{-1}\mathbf{d} = \sigma^2\sum_{i=1}^{I}\frac{c_i d_i}{n_i}.$$

V případě, že model analýzy rozptylu je *vyvážený*, tj. platí $n_1 = \ldots = n_I = T$, budou pak odhady $\mathbf{c}'\mathbf{a}$ a $\mathbf{d}'\mathbf{a}$ ortogonálních kontrastů nutně nezávislé (viz tvrzení f) věty 2.6).

6.1.2. Test lineární hypotézy pomocí kontrastů

Věnujme se nyní testování nulové hypotézy $\mathsf{H}_0 : \alpha_1 = \ldots = \alpha_I$. Pomocí $I - 1$ kontrastů

$$\alpha_1 - \alpha_I, \alpha_2 - \alpha_I, \ldots, \alpha_{I-1} - \alpha_I,$$

lze souhrnně zapsat tuto nulovou hypotézu jako požadavek (viz oddíl 3.3)

$$\mathbf{C}'\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0}, \tag{6.4}$$

kde jsme použili označení

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \\ -1 & -1 & \ldots & -1 \end{pmatrix}. \tag{6.5}$$

V prostředí R je tato matice $\mathbf{C}$ označována jako `contr.sum(I)`. Rozhodování o hypotéze H_0 (o nezávislosti Y na sledovaném faktoru) pomocí testování ověřitelné lineární hypotézy (6.4) s maticí $\mathbf{C}$ podle (6.5) spočívá v porovnání jednotlivých efektů α_i s efektem I-tého ošetření α_I.

Jinou možností, jak vyjádřit H_0 ve tvaru lineárního omezení (6.4), je použít matici

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & \ldots & -1 \\ 1 & -1 & \ldots & -1 \\ 0 & 2 & \ldots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & I-1 \end{pmatrix}. \tag{6.6}$$

Tato *Helmertova matice* (v prostředí R nazvaná `contr.helmert(I)`) odpovídá posloupnosti omezení

$$\begin{aligned} -\alpha_1 + \alpha_2 &= 0, \\ -\alpha_1 - \alpha_2 + 2\alpha_3 &= 0, \\ &\dots \\ -\alpha_1 - \dots - \alpha_{I-1} + (I-1)\alpha_I &= 0. \end{aligned}$$

Postupně porovnáváme druhý až I-tý efekt s aritmetickým průměrem efektů s nižšími indexy.

Je ihned zřejmé, že sloupce matice $\mathbf{C}$ z (6.5) tvoří kontrasty, sloupce Helmertovy matice $\mathbf{C}$ z (6.6) tvoří ortogonální kontrasty.

6.1.3. Reparametrizace pomocí kontrastů

Připomeňme zjištění z příkladu 5.2, že v modelu analýzy rozptylu jednoduchého třídění může mít identifikační omezení tvar $(0, \mathbf{c}')(\mu, \boldsymbol{\alpha}')' = 0$, kde ovšem součet $\mathbf{1}'\mathbf{c}$ složek vektoru $\mathbf{c}$ není nulový, nesmí tedy jít o kontrasty. Přesto však využijeme obě až dosud zavedené matice kontrastů. Přejdeme při tom k úloze s menším počtem parametrů. Později naznačíme, jak tento postup lze rozšířit i na složitější modely analýzy rozptylu.

Místo vektoru efektů $\boldsymbol{\alpha}$ zaveďme vektor $\boldsymbol{\alpha}^*$ o $I-1$ složkách předpisem

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^*, \tag{6.7}$$

kde $\mathbf{C}$ je libovolná matice rorměru $I \times (I-1)$ s lineárně nezávislými sloupci. Vzhledem k této poslední vlastnosti lze psát

$$\boldsymbol{\alpha}^* = (\mathbf{C}'\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}'\boldsymbol{\alpha}. \tag{6.8}$$

Takto je vektor α^* lineární funkcí vektoru odhadnutelných parametrů $\mathbf{C}'\boldsymbol{\alpha}$.

Nyní vyjádříme vektor středních hodnot $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ pomocí nových parametrů. Je zřejmé, že při popisu všech možných středních hodnot není třeba pracovat s celou maticí $\mathbf{X}$, že z identických řádků matice $\mathbf{X}$ stačí zachovat vždy pouze jediný. Takto zjednodušenou regresí matici označíme $\mathbf{X}_A$. Skutečnou matici $\mathbf{X}$ bychom tedy z naší skromnější matice $\mathbf{X}_A$ dostali n_1 násobným zopakováním prvního řádku, n_2 násobným zopakováním druhého řádku atd., zkrátka „svislým rozmazáním“ naší zhuštěné matice $\mathbf{X}_A$. Jinak dostaneme matici $\mathbf{X}$, když redukovanou matici $\mathbf{X}_A$ vynásobíme zleva maticí $\mathbf{F}$. (Ta je, jak víme, totožná s maticí $\mathbf{X}$ z (6.1).) Redukované regresní matici $\mathbf{X}_A$ odpovídá podobný redukovaný vektor středních hodnot $\boldsymbol{\mu} = \mathsf{E}\,(Y_{11}, Y_{21}, \dots, Y_{I1})'$. Tento redukovaný vektor středních hodnot lze postupně

upravit na (nepřehlédněte, prosím, rozdíl mezi vektorem $\boldsymbol{\mu}$ na levé straně a skalárem μ)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu} &= \mathbf{1}\mu + \boldsymbol{\alpha} \qquad \text{(připomeňme } \mathbf{X}_A = (\mathbf{1}, \mathbf{I}_I)\text{)} \\ &= \mathbf{1}\mu + \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^* \\ &= (\mathbf{1}, \mathbf{C}) \begin{pmatrix} \mu \\ \boldsymbol{\alpha}^* \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{6.9}$$

Abychom zachovali původní prostor středních hodnot, musí být matice $(\mathbf{1}, \mathbf{C})$ regulární s hodností I. Obě až dosud zavedené matice kontrastů tomuto požadavku vyhovují, navíc obě splňují $\mathbf{C}'\mathbf{1} = \mathbf{0}$, takže každý řádek matice $\mathbf{C}'$ určuje jeden kontrast. Přitom efekty $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^*$ vyhovují omezení $\mathbf{1}'\boldsymbol{\alpha} = 0$ pro odhadnutelnost parametru $(0, \mathbf{c}')(\mu, \boldsymbol{\alpha}')'$, tedy (5.5).

Podobně je matice $(\mathbf{1}, \mathbf{C})$ regulární i pro matici

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \tag{6.10}$$

kterou prostředí R nabízí pod názvem `contr.treatment(I)`. Tentokrát nejsou součty jednotlivých sloupců nulové, takže složky vektoru $\mathbf{C}'\boldsymbol{\alpha}$ už nejsou kontrasty, nejsou to ani odhadnutelné parametry. Reparametrizace pomocí poslední matice $\mathbf{C}$ vede stále na lineární model, který má všechny regresní koeficienty odhadnutelné. Uvedená matice $\mathbf{C}$ odpovídá identifikačnímu omezeni $\alpha_j = 0$ (viz (5.6)) použitému na $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^*$ pro $j = 1$.

Všimněme si ještě varianční matice odhadu vektoru $(\mu, \boldsymbol{\alpha}^{*'})'$:

$$\begin{aligned}\mathsf{var} \begin{pmatrix} m \\ \mathbf{a}^* \end{pmatrix} &= \sigma^2 \left(\begin{pmatrix} \mathbf{1}' \\ \mathbf{C}' \end{pmatrix} \mathbf{F}'\mathbf{F} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{C} \end{pmatrix} \right)^{-1} = \sigma^2 \left(\begin{pmatrix} \mathbf{1}' \\ \mathbf{C}' \end{pmatrix} \mathbf{D} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{C} \end{pmatrix} \right)^{-1} \\ &= \sigma^2 \begin{pmatrix} n & \mathbf{1}'\mathbf{D}\mathbf{C} \\ \mathbf{C}'\mathbf{D}\mathbf{1} & \mathbf{C}'\mathbf{D}\mathbf{C} \end{pmatrix}^{-1} = \sigma^2 \begin{pmatrix} n & \mathbf{n}'\mathbf{C} \\ \mathbf{C}'\mathbf{n} & \mathbf{C}'\mathbf{D}\mathbf{C} \end{pmatrix}^{-1} \end{aligned}$$

Existuje situace, kdy je tato varianční matice diagonální, takže v normálním modelu jsou složky odhadu $\mathbf{a}^*$ vektoru $\boldsymbol{\alpha}^*$ nezávislé. Je to v případě, kdy jde opravdu o ortogonální kontrasty (platí $\mathbf{C}'\mathbf{1} = \mathbf{0}$ a matice $\mathbf{C}'\mathbf{C}$ je diagonální) a kdy je současně model *vyvážený*, ($n_1 = \dots = n_I (= T)$, tj. $\mathbf{n} = T\mathbf{1}$ a $\mathbf{D} = T\mathbf{I}$).

6.1.4. Interpretace kontrastů v R

V prostředí R se právě popsaná reparametrizace standardně použije, kdykoliv pomocí funkce `lm()` hledáme závislost na nějakém faktoru. Odhady složek vektoru $(\mu, \boldsymbol{\alpha}^{*'})'$ získáme v R, když na výsledek procedury `lm()` použijeme `summary()`. Proberme nyní podrobněji jednotlivé možné volby kontrastů, jak jsou dostupné v R.

`contr.treatment`

Jedna z úrovní faktoru se zvolí jako základní a ostatní se s touto úrovní porovnávaji. Identifikační omezení spočívá v tom, že složka vektoru $\boldsymbol{\alpha}$ odpovídající základní úrovni faktoru je nulová. Standardně je základní úrovní faktoru jeho první hodnota. Potom můžeme střední hodnoty v jednotlivých výběrech zapsat jako

$$\begin{aligned} \mathsf{E}\, Y_{1t} &= \mu, & 1 \le t \le n_1, \\ \mathsf{E}\, Y_{it} &= \mu + \alpha^*_{i-1}, & 1 \le t \le n_i, 2 \le i \le I. \end{aligned}$$

Snadno tedy můžeme porovnat vliv jednotlivých úrovní faktoru s vlivem jeho základní úrovně.

Příklad 6.2 (kořeny) Pokračujme v naší úloze jednoduchého třídění.

```
> a <- lm(hmotnost~Procento,data=Koreny,
             contr=list(Procento = contr.treatment))
> summary(a)

Call:
lm(formula = hmotnost ~ Procento, data = Koreny,
                        contrasts = list(Procento = contr.treatment))

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-0.123667 -0.037121 -0.002733  0.041271  0.114867

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.21180    0.01560  13.581  < 2e-16
Procento2    0.17887    0.02339   7.646 5.89e-10
Procento3    0.13633    0.02206   6.181 1.14e-07
Procento4    0.01428    0.02339   0.611    0.544

Residual standard error: 0.0604 on 50 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.6316,     Adjusted R-squared: 0.6094
F-statistic: 28.57 on 3 and 50 DF,  p-value: 6.641e-11
```

Odhad uvedený v řádku `(Intercept)` je odhadem střední hodnoty v prvním výběru, součet zmíněného odhadu s odhadem `Procento2` dá odhad střední hodnoty ve druhém výběru atd. Snadno si to ověříme, když si tyto odhady (tj. výběrové průměry) necháme spočítat přímo:

```
> tapply(Koreny$hmotnost,Koreny$Procento,mean)
        1         2         3         4
0.2118000 0.3906667 0.3481333 0.2260833
> coef(a)[1]+c(0,coef(a)[-1])
          Procento2 Procento3 Procento4
0.2118000 0.3906667 0.3481333 0.2260833
```

Samozřejmě, odhady středních hodnot v jednotlivých výběrech můžeme s pomocí vztahu $\alpha = \mathbf{C}\alpha^*$ získat také jako

```
> coef(a)[1]+contr.treatment(4)%*%coef(a)[-1]
```

◯

Kontrast `contr.treatment` je standardním nastavením v R. Pokud jsme nastavení kontrastů nezměnili, nebylo třeba parametr `contrasts` uvádět.

`contr.helmert`

(Standardní nastavení v S+) Pro Helmertovu matici platí $\mathbf{C}'\mathbf{1} = \mathbf{0}$, takže jednotlivé složky vektoru $\mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}$ jsou skutečně kontrasty. Dalším důsledkem tohoto vztahu je

$$\sum_i^I \alpha_i = \mathbf{1}'\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{1}'\mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^* = \mathbf{0}'\boldsymbol{\alpha}^* = 0,$$

což je, jak víme z příkladu 5.2, identifikační omezení. Důsledkem je vztah $\mu = \sum_i \mu_i/I$, totéž platí pro odhady. Proto je odhadem μ nevážený průměr průměrů $\bar{Y}_{i\bullet}$ jednotlivých výběrů.

Matice $\mathbf{C}'\mathbf{C}$ pro Helmertovu matici $\mathbf{C}$ z (6.6) je zřejmě diagonální s prvky $i+i^2 = i(i+1)$ na diagonále. Proto lze snadno vyjádřit složky $\boldsymbol{\alpha}^*$ pomocí $\boldsymbol{\alpha}$:

$$\boldsymbol{\alpha}^* = (\mathbf{C}'\mathbf{C})^{-1}\mathbf{C}'\boldsymbol{\alpha},$$

odkud je (pro $i = 1, \ldots, I-1$)

$$\begin{aligned}\alpha_i^* &= \frac{1}{i(i+1)}\left(i\alpha_{i+1} - \sum_{t=1}^{i}\alpha_t\right) = \frac{1}{i+1}\left(\alpha_{i+1} - \frac{1}{i}\sum_{t=1}^{i}\alpha_t\right)\\ &= \frac{1}{i+1}\left(\mathsf{E}\,Y_{ij} - \frac{1}{i}\sum_{t=1}^{i}\mathsf{E}\,Y_{tj}\right). \qquad (6.11)\end{aligned}$$

Porovnáváme tedy vždy další efekt s aritmetickým průměrem předchozích, resp. střední hodnotu v dalším výběru s průměrem středních hodnot výběrů s menšími indexy. Abychom zjistili význam parametru μ, jeho souvislost s redukovaným vektorem středních hodnot $\boldsymbol{\mu}$, popíšeme inverzní matici k matici $(\mathbf{1}, \mathbf{C})$. Označme

$$\begin{pmatrix}\mathbf{d}'\\ \mathbf{D}'\end{pmatrix} = (\mathbf{1}, \mathbf{C})^{-1}. \qquad (6.12)$$

Snadno se ověří, že pro `contr.helmert` platí $\mathbf{d} = (1/I)\mathbf{1}$, takže částečné řešení (6.9) lze psát jako

$$\mu_1 = \mathbf{d}'\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\mu_i = \bar{\mu}.$$

To znamená, že první složka odhadu parametrů, který dostaneme pomocí funkce `summary()`, je průměrem z průměrů z jednotlivých výběrů, nikoliv průměrem z hodnot Y_{it}. Interpretace dalších parametrů plyne z (6.11).

Příklad 6.3 (kořeny)

```
> summary(lm(hmotnost~Procento,
                  contrasts=list(Procento=contr.helmert),data=Koreny))

Call:
lm(formula = hmotnost ~ Procento, data = Koreny,
                           contrasts = list(Procento = contr.helmert))

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-0.123667 -0.037121 -0.002733  0.041271  0.114867

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.294171   0.008271  35.567  < 2e-16
Procento1    0.089433   0.011697   7.646 5.89e-10
Procento2    0.015633   0.006498   2.406   0.0199
Procento3   -0.022696   0.004949  -4.586 3.05e-05

Residual standard error: 0.0604 on 50 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.6316,     Adjusted R-squared: 0.6094
F-statistic: 28.57 on 3 and 50 DF,  p-value: 6.641e-11
```

Například v řádku `Procento2` je tedy uvedena třetina rozdílu průměrné hmotnosti ve třetí skupině a (neváženého!) průměru z hmotností v prvních dvou skupinách. ○

`contr.sum`

Také v tomto případě jsou složky vektoru $\mathbf{C}'\boldsymbol{\alpha}$ kontrasty, opět splňují identifikační podmínku $\sum \alpha_i = 0$, takže například odhad μ je identický s odhadem tohoto parametru pro `contr.helmert`. Vzhledem k tvaru matice $\mathbf{C}$ z (6.5) platí

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{C}\boldsymbol{\alpha}^* = \begin{pmatrix} \mathbf{I} \\ -\mathbf{1}' \end{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}^* = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}^* \\ -\mathbf{1}'\boldsymbol{\alpha}^*. \end{pmatrix}$$

Každá ze složek $\boldsymbol{\alpha}^*$ je tedy totožná odpovídající složce $\boldsymbol{\alpha}$ při identifikaci pomocí $\sum \alpha_i = 0$. Poslední složku α_I bychom dostali tak, že sečteme jejích prvních $I-1$ složek a obrátíme znaménko. Podobně jako u `contr.helmert` dostaneme i zde, že $\mu_1 = \bar{\mu}$, takže první složka vektoru regresních koeficientů je rovna průměru z průměrů jednotlivých výběrů. Prostým vynásobením lze ověřit, že platí

$$(\mathbf{1}, \mathbf{C})^{-1} = \frac{1}{I} \begin{pmatrix} \mathbf{1}' & 1 \\ I\mathbf{I} - \mathbf{1}\mathbf{1}' & -\mathbf{1} \end{pmatrix}.$$

Příklad 6.4 (kořeny)

```
> summary(lm(hmotnost~Procento,
                      contrasts=list(Procento=contr.sum),data=Koreny))

Call:
lm(formula = hmotnost ~ Procento, data = Koreny,
                                contrasts = list(Procento = contr.sum))

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-0.123667 -0.037121 -0.002733  0.041271  0.114867

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.294171   0.008271  35.567  < 2e-16
Procento1   -0.082371   0.013785  -5.975 2.39e-07
Procento2    0.096496   0.014847   6.499 3.64e-08
Procento3    0.053962   0.013785   3.915 0.000274

Residual standard error: 0.0604 on 50 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.6316,     Adjusted R-squared: 0.6094
F-statistic: 28.57 on 3 and 50 DF,  p-value: 6.641e-11
```

○

6.1.5. Reparametrizace pro uspořádaný faktor

Hodnoty uspořádaného faktoru (`ordered`) jsou uspořádány. V proceduře `lm()` se uspořádanému faktoru standardně přiřazuje matice kontrastů `contr.poly(I)`, jejíž sloupce jsou dány ortogonálními polynomy. Například pro $I = 4$ je to matice

```
> contr.poly(4)
             .L   .Q         .C
[1,] -0.6708204  0.5 -0.2236068
[2,] -0.2236068 -0.5  0.6708204
[3,]  0.2236068 -0.5 -0.6708204
[4,]  0.6708204  0.5  0.2236068
```

Jak už označení sloupců naznačuje, souvisí jednotlivé sloupce této matice s lineárním, kvadratickým ... trendem. Pokud je model vyvážený (četnosti n_i jsou shodné), jsou odhady složek α_i^* nezávislé. Skutečnost, že sloupce matice $\mathbf{C}$ jsou tentokrát ortonormální a zároveň ortogonální s $\mathbf{1}$ způsobí, že platí

$$(\mathbf{1}, \mathbf{C})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{I}\mathbf{1}' \\ \mathbf{C}' \end{pmatrix}$$

Příklad 6.5 (kořeny) Teprve nyní bereme v úvahu, že úrovně použitého faktoru jsou uspořádány (jsou to procenta cukru v živném roztoku). Jednotlivé složky vektoru $\boldsymbol{\alpha}^*$ se tedy snaží zachytit lineární, kvadratický či kubický trend. Samozřejmě, za předpokladu, že hodnoty uspořádaného faktoru (ordinálního znaku) jsou od sebe ekvidistantně vzdálené (že jde vlastně o intervalové měřítko).

```
> summary(lm(hmotnost~Procento,
                    contrasts=list(Procento=contr.poly),data=Koreny))

Call:
lm(formula = hmotnost ~ Procento, data = Koreny,
                             contrasts = list(Procento = contr.poly))

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-0.123667 -0.037121 -0.002733  0.041271  0.114867

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  2.942e-01  8.271e-03  35.567  < 2e-16
Procento.L   7.081e-05  1.654e-02   0.004   0.9966
Procento.Q  -1.505e-01  1.654e-02  -9.096 3.53e-12
Procento.C   3.173e-02  1.654e-02   1.918   0.0608

Residual standard error: 0.0604 on 50 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.6316,     Adjusted R-squared: 0.6094
F-statistic: 28.57 on 3 and 50 DF,  p-value: 6.641e-11
```

Tabulka analýzy rozptylu je samozřejmě totožná s výpočty při jiných volbách matice kontrastů. Ovšem z právě uvedených výsledků je zřejmé, co způsobilo zamítnutí nulové hypotézy o nezávislosti hmotnosti kořenových částí na procentu tuku v živném roztoku. Závislost bude zřejmě blízká kvadratické závislosti na koncentraci cukru v živném roztoku. ◯

6.2. Analýza rozptylu dvojného třídění

Předpokládáme, že nezávislé náhodné veličiny Y_{ijt} mají normální rozdělení

$$\mathsf{N}\big(\mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij}, \sigma^2\big),$$

přičemž je $1 \le t \le n_{ij}, 1 \le i \le I, 1 \le j \le J$. Vedle (hlavních) efektů se v našem modelu vyskytují také *interakce* γ_{ij}, které se někdy značí jako $(\alpha\beta)_{ij}$. Interakce

ukazují, nakolik není vliv sledovaných dvou faktorů aditivní, nakolik není závislost střední hodnot závisle proměnné Y na faktoru A stejná pro různé úrovně faktoru B. Matice plánu je složena ze tří částí, které odpovídají po řadě koeficientům α, β, γ.

K tomu, aby bylo možno s interakcemi pracovat, musíme mít více pozorování, než kolik činí hodnost skutečné regresní matice $\mathbf{X}$, tedy více než $I \cdot J$. Celkový počet pozorování opět označíme $n = \sum n_{ij}$. Odhadem středních hodnot $\mathsf{E}\, Y_{ijt}$ jsou nepochybně průměry $\bar{Y}_{ij\bullet}$. Odtud je zřejmé, že reziduální součet čtverců je roven

$$SS_T = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} \sum_{t=1}^{n_{ij}} \left(Y_{ijt} - \bar{Y}_{ij\bullet}\right)^2 .$$

K identifikaci lze použít například vztahy

$$\sum_{i=1}^{I} \alpha_i = 0, \qquad \sum_{j=1}^{J} \beta_j = 0,$$

$$\sum_{i=1}^{I} \gamma_{ij} = 0 \qquad \text{pro všechna } j,$$

$$\sum_{j=1}^{J} \gamma_{ij} = 0 \qquad \text{pro všechna } i.$$

6.2.1. Reparametrizace pomocí kontrastů

K reparametrizaci lze znovu použít matic kontrastů $\mathbf{C}_A, \mathbf{C}_B, \mathbf{C}_{AB} = \mathbf{C}_A \otimes \mathbf{C}_B$. Redukovaný vektor středních hodnot (opět vždy jen pro $t = 1$) můžeme zapsat jako

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu} &= (\mathbf{1}_I \otimes \mathbf{1}_J, \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{1}_J, \mathbf{1}_I \otimes \mathbf{I}_J, \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{I}_J) \begin{pmatrix} \mu \\ \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\gamma} \end{pmatrix} \\
&= (\mathbf{1}_I \otimes \mathbf{1}_J, \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{1}_J, \mathbf{1}_I \otimes \mathbf{I}_J, \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{I}_J) \begin{pmatrix} (1 \otimes 1)\mu \\ (\mathbf{C}_A \otimes 1)\boldsymbol{\alpha}^* \\ (1 \otimes \mathbf{C}_B)\boldsymbol{\beta}^* \\ (\mathbf{C}_A \otimes \mathbf{C}_B)\boldsymbol{\gamma}^* \end{pmatrix} \\
&= (\mathbf{1}_I \otimes \mathbf{1}_J, \mathbf{C}_A \otimes \mathbf{1}_J, \mathbf{1}_I \otimes \mathbf{C}_B, \mathbf{C}_A \otimes \mathbf{C}_B) \begin{pmatrix} \mu \\ \boldsymbol{\alpha}^* \\ \boldsymbol{\beta}^* \\ \boldsymbol{\gamma}^* \end{pmatrix} .
\end{aligned}$$

Z posledních dvou vlastností Kroneckerova součinu uvedených ve větě A.9 plyne, že matice uvedená v posledním řádku má hodnost stejnou jako matice

$$(\mathbf{1}_I, \mathbf{C}_A) \otimes (\mathbf{1}_J, \mathbf{C}_B).$$

Bude tedy regulární, pokud obě matice kontrastů $\mathbf{C}_A, \mathbf{C}_B$ dají s vektorem jedniček regulární matici. Matice $\mathbf{C}_A$ a $\mathbf{C}_B$ nemusí mít stejné vlastnosti, lze kombinovat například `contr.treatment` a `contr.sum`. K tomu, aby sloupce matice $\mathbf{C}_{AB}$ tvořily skutečné kontrasty stačí, aby aspoň jedna ze zúčastněných matic měla tuto vlastnost. Pak totiž platí

$$\mathbf{1}'\mathbf{C}_{AB} = \left(\mathbf{1}' \otimes \mathbf{1}'\right)\left(\mathbf{C}_A \otimes \mathbf{C}_B\right) = \left(\mathbf{1}'\mathbf{C}_A\right) \otimes \left(\mathbf{1}'\mathbf{C}_B\right) = \mathbf{0}'.$$

Pokud je pro každou kombinaci úrovní obou faktorů stejný počet pozorování, tj. pokud je $n_{ij} = T$ pro všechna i a j a pokud obsahují matice $\mathbf{C}_A$ a $\mathbf{C}_B$ ortogonální kontrasty, zjistíme stejně jako u jednoduchého třídění, že varianční matice odhadů parametrů $\mu, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ je diagonální.

6.2.2. Tabulka analýzy rozptylu

V tabulce analýzy rozptylu jednoduchého třídění tab. 6.1 je uveden rozklad celkového součtu čtverců SS_T na dva sčítance, z nichž první udává variabilitu vysvětlenou uvažovanou závislostí a druhý udává variabilitu nevysvětlenou. Když však vysvětlujeme variabilitu aspoň dvěma faktory, lze tabulku zobecnit více způsoby. Při dalším výkladu budeme pod *členem* rozumět buď faktor nebo interakci. Každému členu odpovídá v tabulce analýzy rozptylu jeden řádek. Pod řádem členu budeme rozumět řád interakce, pokud je člen interakcí, nebo nulu, pokud jde o samostatný faktor (tzv. *hlavní efekt*).

Procedura `anova()` v R s jediným argumentem třídy `lm` generuje *rozklad typu I*, přičemž jednotlivé řádky postupně od shora dolů udávají, o kolik se přidáním daného členu zmenší reziduální součet čtverců. Obecně tedy závisí na pořadí, v jakém se jednotlivé členy v tabulce objevují. Ve sloupci *Součet čtverců* je uvedeno, nakolik daný člen (faktor, interakce) přispěl k vysvětlení variability vysvětlované proměnné nad to, co už vysvětlily členy výše uvedené. Testová statistika F pak vzniká jako podíl příslušného průměrného čtverce v daném řádku a odhadu rozptylu S^2 (průměrného čtverce v řádku *reziduální*). V každém řádku tedy statistika F (prostřednictvím příslušné dosažené hladiny testu p) vypovídá o tom, zda vysvětlovaná proměnná *po adjustaci* vůči všem výše uvedeným členům závisí na daném členu (faktoru, interakci). Vypovídá o významnosti té části variability závisle proměnné, kterou nelze vysvětlit pomocí všech výše uvedených členů a kterou daný člen vysvětluje. Program R má tu nevýhodu, že o pořadí jednotlivých členů můžeme rozhodnout jen do jisté míry, jen v rámci dané úrovně interakcí. Ve výstupu se vždy objeví nejprve základní efekty (interakce nultého řádu), pak interakce prvního řádu (dvojic faktorů) atd.

Rozklad typu II hodnotí přínos daného členu (faktoru, interakce) po adjustaci vůči ostatním členům, které jej neobsahují. Z původního (úplného) modelu nejprve vyloučíme daný člen a všechny členy, které tento člen obsahují jako součást nějaké interakce. Zjistíme pak, o kolik se zmenší reziduální součet čtverců, když přidáme

testovaný člen. Tento rozdíl přiřadíme jako reziduální součet čtverců k vyšetřovanému členu. Jako odhad rozptylu použijeme úplný výchozí model, který jsme uvedli při volání funkce `lm()`. Výsledné statistiky nezáleží na tom, v jakém pořadí jsme uvedli faktory v definici modelu.

Rozklad typu III podobně hodnotí přínos daného členu po adjustaci vůči všem ostatním členům bez ohledu na jejich řád. Pro tento rozklad je obtížné hledat interpretaci, protože hodnotí vzrůst reziduálního součtu čtverců způsobený vyloučením daného členu, když v modelu zůstanou (je provedena adjustace vůči nim) všechny ostatní členy včetně případných interakcí, v nichž je člen obsažen. Výsledné statistiky opět nezáleží na tom, v jakém pořadí jsme uvedli faktory v definici modelu. Na druhé straně výsledné statistiky obecně záleží na kontrastech použitých k vyjádření faktorů, tedy na zvolené parametrizaci.

Rozklad typu II je určitým kompromisem mezi rozklady typu I a III.

V R lze počítat tabulky analýzy rozptylu typu II a III v knihovně `car` procedurou `Anova()`. S určitou námahou lze k statistikám typu II dojít i pomocí klasické procedury `anova()`, když porovnáme vždy příslušný model a podmodel.

Příklad 6.6 (ICHS) Dlouhodobě byla sledována řada mužů středního věku, u nichž byl před začátkem sledování zjištěn právě jeden rizikový faktor ischemické choroby srdeční (silné kouření, vysoký krevní tlak, obezita, rodinná disposice). Zajímáme se o možnou závislost indexu obezity BMI (body mass index) na dosaženém vzdělání a na kouření. Použijeme jen údaje o silných kuřácích a o nekuřácích. Když připustíme interakce mezi oběma faktory, dostaneme tabulku analýzy typu I, která postupně vysvětluje celkovou variabilitu indexu obezity.

```
> anova(lm(bmi~Vzdel*Kurak,data=IchsN))
Analysis of Variance Table
Response: bmi
             Df  Sum Sq Mean Sq F value  Pr(>F)
Vzdel         2   14.90    7.45  0.9204 0.40044
Kurak         1   61.82   61.82  7.6356 0.00639
Vzdel:Kurak   2   12.17    6.09  0.7516 0.47324
Residuals   161 1303.44    8.10
```

Všimněme si, že změna pořadí faktorů vede k jiné tabulce:

```
> anova(lm(bmi~Kurak*Vzdel,data=IchsN))
Analysis of Variance Table
Response: bmi
             Df  Sum Sq Mean Sq F value  Pr(>F)
Kurak         1   41.01   41.01  5.0651 0.02577
Vzdel         2   35.71   17.86  2.2057 0.11349
Kurak:Vzdel   2   12.17    6.09  0.7516 0.47324
Residuals   161 1303.44    8.10
```

Rozklady typu II a III už nezávisí na pořadí faktorů:

```
> Anova(lm(bmi~Vzdel*Kurak,data=IchsN))
Anova Table (Type II tests)
```

```
Response: bmi
             Sum Sq  Df F value  Pr(>F)
Vzdel         35.71   2  2.2057 0.11349
Kurak         61.82   1  7.6356 0.00639
Vzdel:Kurak   12.17   2  0.7516 0.47324
Residuals   1303.44 161
```

V rozkladu typu II jsou součet čtverců, F statistika i dosažená hladina u proměnné `Kurak` totožné s odpovídajícími statistikami v té tabulce typu I, v níž je tento člen uveden jako poslední z členů daného řádu. Podobně lze shodu ověřit u členu `Vzdel`.

```
> Anova(lm(bmi~Vzdel*Kurak,data=IchsN),type="III")
Anova Table (Type III tests)
Response: bmi
             Sum Sq  Df   F value Pr(>F)
(Intercept) 10012.2   1 1236.7032 <2e-16 ***
Vzdel          28.2   2    1.7436 0.1782
Kurak          19.2   1    2.3713 0.1256
Vzdel:Kurak    12.2   2    0.7516 0.4732
Residuals    1303.4 161
```

Chceme-li ověřit, odkud pochází součet čtverců pro jednotlivé členy (`Vzdel`, `Kurak`, `Vzdel:Kurak`), musíme si trochu pomoci. Vytvoříme matici $\mathbf{X}$ našeho modelu a postupně budeme počítat podmodely, které dostaneme vyloučením sloupců matice $\mathbf{X}$, které odpovídají jednotlivým členům modelu. Reziduální součty čtverců modelu a příslušného podmodelu, jejich rozdíl, testovou statistiku F i s dosaženou hladinou poskytne procedura `anova()`.

```
> attach(IchsN)
> print((X <- model.matrix(~Vzdel*Kurak))[1:4,])
  (Intercept) Vzdel2 Vzdel3 KurakTRUE Vzdel2:KurakTRUE Vzdel3:KurakTRUE
1           1      0      0         0                0                0
2           1      0      0         1                0                0
3           1      0      1         0                0                0
4           1      0      0         1                0                0
> anova(lm(bmi~X[,-(2:3)]-1),lm(bmi~X-1))
Analysis of Variance Table
Model 1: bmi ~ X[, -(2:3)] - 1
Model 2: bmi ~ X - 1
  Res.Df     RSS  Df Sum of Sq      F Pr(>F)
1    163 1331.67
2    161 1303.44   2     28.23 1.7436 0.1782
> anova(lm(bmi~X[,-4]-1),lm(bmi~X-1))
Analysis of Variance Table
Model 1: bmi ~ X[, -4] - 1
Model 2: bmi ~ X - 1
  Res.Df    RSS  Df Sum of Sq      F Pr(>F)
1    162 1322.6
```

```
2    161 1303.4   1      19.2 2.3713 0.1256
> anova(lm(bmi~X[,-(5:6)]-1),lm(bmi~X-1))
Analysis of Variance Table
Model 1: bmi ~ X[, -(5:6)] - 1
Model 2: bmi ~ X - 1
  Res.Df     RSS  Df Sum of Sq      F Pr(>F)
1    163 1315.61
2    161 1303.44   2     12.17 0.7516 0.4732
```

Nakonec si ještě ukážeme, jak záleží na volbě kontrastů u rozkladu součtu čtverců typu III. Místo přednastavených pseudokontrastů `contr.treatment` použijeme `contr.helmert`. Dostaneme

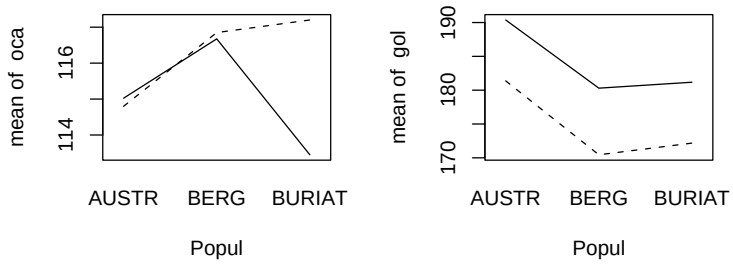
```
> Anova(lm(bmi~Vzdel*Kurak,contr=list(Vzdel="contr.helmert"),
data=IchsN),type="III")
Anova Table (Type III tests)
Response: bmi
             Sum Sq  Df   F value  Pr(>F)
(Intercept)  39879   1 4925.8226 < 2e-16 ***
Vzdel           28   2    1.7436 0.17818
Kurak           54   1    6.6237 0.01096 *
Vzdel:Kurak     12   2    0.7516 0.47324
Residuals     1303 161
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Všimněme si, že se změnil zejména součet čtverců v řádku Kurak. ◯

Příklad 6.7 (Howells) W. W. Howels dal na internetu k disposici rozsáhlý soubor dat zjištěných na exhumovaných lebkách z různých populací Země (Howells (1996)). Nás zajímá jen část údajů, která se týká tří míst (rakouský Berg, Austrálie a Burjati na Sibiři). Experti určili u každé exhumované lebky nejen pohlaví, ale také řadu rozměrů, z nichž si vybereme dva: GOL (Glabell-Occipital Length, tj. největší délka mozkovny) a ACA (Occipital Angle, tj. týlní úhel) (viz též Zvára (1998)). Snadno se přesvědčíme, že tabulka analýzy roztylu (typu I) dá pro obě možná pořadí faktorů identické výsledky. Není to náhoda?

```
> anova(lm(oca~Sex*Popul,data=Howells))
Analysis of Variance Table

Response: oca
           Df Sum Sq Mean Sq F value  Pr(>F)
Sex         1   91.3    91.3  3.6888 0.05599 .
Popul       2  150.9    75.5  3.0497 0.04926 *
Sex:Popul   2  191.6    95.8  3.8722 0.02216 *
Residuals 234 5789.6    24.7
> anova(lm(oca~Popul*Sex,data=Howells))
Analysis of Variance Table

Response: oca
```

```
           Df Sum Sq Mean Sq F value  Pr(>F)
Popul       2  150.9    75.5  3.0497 0.04926 *
Sex         1   91.3    91.3  3.6888 0.05599 .
Popul:Sex   2  191.6    95.8  3.8722 0.02216 *
Residuals 234 5789.6    24.7
> anova(lm(gol~Sex*Popul,data=Howells))
Analysis of Variance Table

Response: gol
           Df Sum Sq Mean Sq  F value Pr(>F)
Sex         1 5170.8  5170.8 128.5753 <2e-16 ***
Popul       2 5242.1  2621.1  65.1743 <2e-16 ***
Sex:Popul   2    9.6     4.8   0.1198 0.8872
Residuals 234 9410.6    40.2
> anova(lm(gol~Popul*Sex,data=Howells))
Analysis of Variance Table

Response: gol
           Df Sum Sq Mean Sq  F value Pr(>F)
Popul       2 5242.1  2621.1  65.1743 <2e-16 ***
Sex         1 5170.8  5170.8 128.5753 <2e-16 ***
Popul:Sex   2    9.6     4.8   0.1198 0.8872
Residuals 234 9410.6    40.2
> split.screen(c(1,2))
[1] 1 2
> screen(1);interaction.plot(Popul,Sex,oca,legend=FALSE)
> screen(2);interaction.plot(Popul,Sex,gol,legend=FALSE)
```



Obrázek 6.2: Znázornění interakcí (ženy čárkovaně)

Na obrázcích je patrné, proč v případě proměnné `gol` vyšly interakce nevýznamné (na všech místech je rozdíl mezi průměrem u mužů a u žen prakticky stejný), kdežto u `oca` jsou interakce průkazné. ◯

7. Následky nesplnění předpokladů

V lineárním modelu jsme předpokládali, že známe prostor možných středních hodnot, že všechna pozorování mají stejný rozptyl, že jsou nekorelovaná (resp. nezávislá) a že mají normální rozdělení. Nyní se pokusíme popsat následky, které má nesplnění některého z uvedených předpokladů.

7.1. Prostor středních hodnot

Předpokládejme, že platí

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{e}, \qquad \mathbf{e} \sim (\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}), \tag{7.1}$$

přestože my předpokládáme platnost modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$.

Označme $\mathbf{G} = (\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ a $\boldsymbol{\delta} = (\boldsymbol{\beta}', \boldsymbol{\gamma}')'$ a veškeré statistiky vztažené k modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{G}\boldsymbol{\delta}, \sigma^2\mathbf{I})$ označíme dolním indexem g. Běžný odhad vektoru $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ je tedy

$$\hat{\mathbf{Y}}_g = \mathbf{G}(\mathbf{G}'\mathbf{G})^-\mathbf{G}'\mathbf{Y}, \tag{7.2}$$

což je, jak víme např. z (3.12), průmět $\mathbf{Y}$ do $\mathcal{M}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) = \mathcal{M}(\mathbf{X}, \mathbf{MZ})$. S použitím druhého vyjádření dostaneme

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{Y}}_g &= (\mathbf{X}, \mathbf{MZ}) \begin{pmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{Z}'\mathbf{MZ} \end{pmatrix}^- \begin{pmatrix} \mathbf{X}' \\ \mathbf{Z}'\mathbf{M} \end{pmatrix} \mathbf{Y} \\
&= \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{Y} + \mathbf{MZ}(\mathbf{Z}'\mathbf{MZ})^-\mathbf{Z}'\mathbf{MY} \\
&= \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{MZ}(\mathbf{Z}'\mathbf{MZ})^-\mathbf{Z}'\mathbf{u} \qquad (7.3) \\
&= \mathbf{X}\mathbf{b}_g + \mathbf{Z}\mathbf{c}_g, \qquad (7.4)
\end{aligned}$$

kde $\mathbf{b}_g$ a $\mathbf{c}_g$ jsou obecně nějaká řešení příslušné normální rovnice.

Když přepíšeme (7.4) tak, aby bylo patrné jakou lineární kombinací sloupců matic $\mathbf{X}, \mathbf{Z}$ je vektor $\hat{\mathbf{Y}}_g$ (co mohou být vektory $\mathbf{b}_g, \mathbf{c}_g$), dostaneme po úpravě (vyjádříme $\mathbf{M}$ pomocí $\mathbf{X}$)

$$\hat{\mathbf{Y}}_g = \mathbf{X}(\mathbf{b} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{Z}\mathbf{c}_g) + \mathbf{Z}\mathbf{c}_g, \tag{7.5}$$

když jsme označili

$$\mathbf{c}_g = (\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'\mathbf{u}. \tag{7.6}$$

Můžeme tedy psát

$$\mathbf{b}_g = \mathbf{b} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\mathbf{Z}\mathbf{c}_g, \tag{7.7}$$

odkud je zřetelný zejména vztah mezi $\mathbf{b}$ a $\mathbf{b}_g$.

Z (7.3) plyne, že rozdíl reziduálních součtů čtverců mezi uvažovaným modelem $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ a skutečně platným modelem $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{G}\boldsymbol{\delta}, \sigma^2\mathbf{I})$ je

$$\begin{aligned} RSS - RSS_g &= \|\mathbf{M}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'\mathbf{u}\|^2 \\ &= \|\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{c}_g\|^2. \end{aligned} \tag{7.8}$$

Porovnejme ještě střední hodnoty obou reziduálních součtů čtverců. Protože platí model (7.1), je zřejmě $\mathsf{E}\, RSS_g = (n - \mathsf{h}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}))\sigma^2$. Jinak to dopadne u reziduálního součtu čtverců RSS z (nesprávně) předpokládaného modelu. Postupnými úpravami dostaneme

$$\mathsf{E}\, RSS = \mathsf{E}\, ||\mathbf{M}\mathbf{Y}||^2 = \mathsf{E}\, ||\mathbf{M}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{e})||^2 = \mathsf{E}\, ||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{M}\mathbf{e}||^2,$$

tedy (s ohledem na $\mathsf{E}\,\mathbf{e} = \mathbf{0}$)

$$\begin{aligned} \mathsf{E}\, RSS &= ||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}||^2 + \mathsf{E}\, ||\mathbf{M}\mathbf{e}||^2 \\ &= ||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}||^2 + (n - \mathsf{h}(\mathbf{X}))\sigma^2. \end{aligned} \tag{7.9}$$

Vraťme se k odhadu $\hat{\mathbf{Y}}$. Jeho střední hodnota je rovna

$$\mathsf{E}\,\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{H}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{H}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}.$$

Obecně tedy není nestranným odhadem pro $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$, má vychýlení

$$\mathsf{bias}\,\hat{\mathbf{Y}} = \mathsf{E}\,\hat{\mathbf{Y}} - \mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{H}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} - (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}) \;=\; -\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}. \tag{7.10}$$

Shrňme vlastnosti odhadů klasického modelu.

Věta 7.1. (Vlastnosti odhadů, platí-li širší model) Nechť platí $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}, \sigma^2\mathbf{I})$. Pro statistiky odvozené z modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ platí

$$\mathsf{bias}\,\hat{\mathbf{Y}} = -\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}, \tag{7.11}$$

$$\mathsf{bias}\, S^2 = \frac{||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}||^2}{n - \mathsf{h}(\mathbf{X})}, . \tag{7.12}$$

Vychýlené odhady neporovnáváme pomocí jejich rozptylu či varianční matice, ale pomocí střední čtvercové chyby. *Střední čtvercová chyba* odhadu $\mathbf{T}$ parametru $\boldsymbol{\theta}$ je definována jako

$$\begin{aligned}\mathsf{MSE}\,(\mathbf{T}) &= \mathsf{E}\,(\mathbf{T}-\boldsymbol{\theta})(\mathbf{T}-\boldsymbol{\theta})' \\ &= \mathsf{var}\,(\mathbf{T}) + \mathsf{bias}\,(\mathbf{T})\mathsf{bias}\,(\mathbf{T})'.\end{aligned}$$

Střední čtvercovou chybu $\hat{\mathbf{Y}}$ jako odhadu pro $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ lze tedy psát

$$\mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}} = \mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}} + (\mathsf{bias}\,\hat{\mathbf{Y}})(\mathsf{bias}\,\hat{\mathbf{Y}})' = \sigma^2\mathbf{H} + \mathbf{MZ}\boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{\gamma}'\mathbf{Z}'\mathbf{M}.$$

Protože $\hat{\mathbf{Y}}_g$ je nestranným odhadem $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$, platí $\mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}}_g = \mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}}_g$, což lze upravit podobně jako při výpočtu $\hat{\mathbf{Y}}_g$ na

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}}_g &= \sigma^2(\mathbf{X},\mathbf{MZ})\begin{pmatrix}\mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{O}\\ \mathbf{O} & \mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\end{pmatrix}^{-}\begin{pmatrix}\mathbf{X}'\\ \mathbf{Z}'\mathbf{M}\end{pmatrix} \\ &= \sigma^2\left(\mathbf{H} + \mathbf{MZ}(\mathbf{Z}'\mathbf{MZ})^{-}\mathbf{Z}'\mathbf{M}\right). \qquad (7.13)\end{aligned}$$

Porovnejme $\hat{\mathbf{Y}}_g$ a $\hat{\mathbf{Y}}$ jako odhady pro $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$:

$$\mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}}_g - \mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}} = \sigma^2\left(\mathbf{MZ}(\mathbf{Z}'\mathbf{MZ})^{-}\mathbf{Z}'\mathbf{M} - \mathbf{MZ}\boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{\gamma}'\mathbf{Z}'\mathbf{M}/\sigma^2\right).$$

Nyní stačí použít tvrzení věty A.7 pro $\mathbf{A} = \mathbf{MZ}$ a $\mathbf{c} = \boldsymbol{\gamma}/\sigma$, abychom zjistili, že rozdíl středních čtvercových chyb dá pozitivně semidefinitní matici, právě když je $\|\mathbf{Ac}\|^2 = \|\mathbf{MZ}\boldsymbol{\gamma}/\sigma\|^2 \le 1$. Došli jsme tak k tvrzení následující věty.

Věta 7.2. (Kdy je vychýlení malé) Nechť platí $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}, \sigma^2\mathbf{I})$. Pro $\hat{\mathbf{Y}}_g$ z tohoto modelu a pro $\hat{\mathbf{Y}}$ z modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ platí ekvivalence

$$\mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}}_g \ge \mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}} \iff \|\mathsf{bias}\,\hat{\mathbf{Y}}\|^2 \le \sigma^2. \qquad (7.14)$$

Při předpovědi budoucího pozorování tedy je výhodnější použít menší model, když je vychýlení způsobené touto volbou dostatečně malé.

Věta 7.3. (Důsledek) Nechť platí $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}, \sigma^2\mathbf{I})$, nechť $\theta = \mathbf{p}'\boldsymbol{\beta} + \mathbf{s}'\boldsymbol{\gamma}$ je odhadnutelný parametr v tomto modelu. Nechť $\mathbf{b}$ je libovolné řešení normální rovnice $\mathbf{X}'\mathbf{Xb} = \mathbf{X}'\mathbf{Y}$. Potom je parametr $\tau = \mathbf{p}'\boldsymbol{\beta}$ odhadnutelný také v modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ a platí

$$\mathsf{MSE}\,\hat{\theta} \ge \mathsf{MSE}\,\hat{\tau} \iff \|\mathbf{MZ}\boldsymbol{\gamma}\|^2 \le \sigma^2.$$

D ů k a z: Především je třeba dokázat, že τ je odhadnutelný parametr. Odhadnutelnost θ je podle věty 2.4 ekvivalentní s existencí vektoru $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$, pro který platí $\mathbf{q}'(\mathbf{X},\mathbf{Z}) = (\mathbf{p}',\mathbf{s}')$. Speciálně to tedy znamená existenci $\mathbf{q}$, pro který platí $\mathbf{q}'\mathbf{X} = \mathbf{p}'$, tedy podle téže věty odhadnutelnost parametru τ v menším modelu. Porovnání

středních čtvercových chyb plyne z použití tvrzení věty 7.2, když se vezme ohled na $\mathsf{MSE}\,\hat{\tau} = \mathbf{q}'(\mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}})\mathbf{q}$ a $\mathsf{MSE}\,\hat{\theta} = \mathbf{q}'(\mathsf{MSE}\,\hat{\mathbf{Y}}_g)\mathbf{q}$. □

Poznámka Totéž dostaneme, pokud v modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}, \sigma^2\mathbf{I})$ je odhadnutelný parametr $\theta^* = \mathbf{p}'\boldsymbol{\beta} + \mathbf{0}'\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{p}'\boldsymbol{\beta}$. Něco jiného vyjde, když platí menší model, a my použijeme model větší, i když jen k odhadu odhadnutelné funkce $\mathbf{p}'\boldsymbol{\beta}$. Pak jsou oba odhady $\hat{\tau^*_g} = \mathbf{q}'\hat{\mathbf{Y}}_g$ a $\hat{\tau^*} = \mathbf{q}'\hat{\mathbf{Y}}$ nestranné. O vztahu obou středních čtvercových chyb pak rozhoduje porovnání rozptylů. Z Gaussovy-Markovovy věty plyne, že odhad $\hat{\tau^*}$ je nejlepší, takže $\hat{\tau^*_g}$ nemůže mít rozptyl menší. Použijeme vyjádření (7.13) pro rozptyl odhadu $\hat{\tau}^*_g$

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\,\hat{\tau}^*_g &= \mathbf{q}'(\mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}}_g)\mathbf{q}\\ &= \mathsf{var}\,\hat{\tau}^* + \mathbf{q}'\mathbf{M}\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{q}\end{aligned}$$

což ukazuje, nakolik je odhad ve zbytečně bohatém modelu méně přesný.

7.2. Případ s úplnou hodností

Předpokládejme nyní, že matice $\mathbf{G} = (\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ má lineárně nezávislé sloupce. Odtud plyne, že také matice $\mathbf{X}$ a $\mathbf{Z}$ mají lineárně nezávislé sloupce, takže $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ a $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$ jsou regulární. Regulární musí být také matice $\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}$, neboť prostor $\mathcal{M}(\mathbf{M}\mathbf{Z})$ musí mít stejnou dimenzi jako prostor $\mathcal{M}(\mathbf{Z})$. Můžeme tedy v tomto případě psát (viz (7.7), (7.6))

$$\mathbf{b}_g = \mathbf{b} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Z}\mathbf{c}_g, \tag{7.15}$$

$$\mathbf{c}_g = (\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{u}. \tag{7.16}$$

Ze vztahu (7.15) můžeme snadno zjistit vychýlení odhadu $\mathbf{b}$:

$$\mathsf{bias}\,\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}. \tag{7.17}$$

Invertováním matice rozdělené na pole (viz například (Anděl, 1978, kap. IV, věta 9)) dostaneme

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\begin{pmatrix}\mathbf{b}_g\\ \mathbf{c}_g\end{pmatrix} &= \sigma^2\begin{pmatrix}\mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{X}'\mathbf{Z}\\ \mathbf{X}'\mathbf{Z} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z}\end{pmatrix}^{-1}\\ &= \begin{pmatrix}\sigma^2(\mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{X}'\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{X})^{-1} & *\\ * & \sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z})^{-1}\end{pmatrix},\end{aligned} \tag{7.18}$$

když jsme hvězdičkou označili matice kovariancí, jejichž explicitní vyjádření nyní nepotřebujeme.

Závěr Pro model $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}, \sigma^2\mathbf{I})$ s úplnou hodností platí:

a) Je-li $\mathbf{X}'\mathbf{Z} = \mathbf{O}$, pak platí $\mathbf{b}_g = \mathbf{b}$ (se všemi důsledky).

b) Je-li $\mathbf{X}'\mathbf{Z} \neq \mathbf{O}$, pak je odhad $\mathbf{b}$ vychýleným odhadem $\boldsymbol{\beta}$, platí však

$$\mathsf{var}\,\mathbf{b}_g > \mathsf{var}\,\mathbf{b}. \tag{7.19}$$

Tvrzení o variančních maticích plyne z toho, že je

$$\mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{X}'\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{X} < \mathbf{X}'\mathbf{X},$$

pak stačí použít větu A.5 z appendixu o porovnání kvadratických forem.

Příklad 7.1 (dva regresory) Nechť platí regresní model se dvěma nezávisle proměnnými

$$\begin{aligned} y &= \beta_0 + \beta x + \gamma z \\ &= \beta_0^* + \beta(x - \bar{x}) + \gamma(z - \bar{z}) \end{aligned}$$

kdežto my uvažujeme pouze závislost na nezávisle proměnné x. V takovém případě používáme odhad parametru β_1 tvaru

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{T_{yx}}{T_{xx}}$$

s rozptylem

$$\mathsf{var}\, b = \sigma^2 / T_{xx}.$$

Odhadem parametru β_0^* je $\bar{Y}$ s rozptylem σ^2/n.

Ve skutečnosti jsme měli použít odhad založený na

$$\begin{pmatrix} b_g \\ c_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{xx} & T_{xz} \\ T_{zx} & T_{zz} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} T_{xy} \\ T_{zy} \end{pmatrix},$$

což po úpravě vede k odhadu

$$\begin{aligned} b_g &= \frac{T_{zz}T_{xy} - T_{xz}T_{zy}}{T_{xx}T_{zz} - T_{xz}^2} \\ &= \frac{b - (T_{xz}/T_{xx})(T_{zy}/T_{zz})}{1 - r_{xz}^2}, \end{aligned}$$

kde r_{xz}^2 je výběrový korelační koeficient mezi veličinami x, z. Rozptyl odhadové statistiky b_g můžeme zapsat jako

$$\begin{aligned} \mathsf{var}\, b_g &= \sigma^2 \frac{T_{zz}}{T_{xx}T_{zz} - T_{xz}^2} \\ &= \frac{\sigma^2}{T_{xx}} \frac{1}{1 - r_{xz}^2} = \frac{1}{1 - r_{xz}^2} \mathsf{var}\, b. \end{aligned}$$

Odtud je vidět zřetelně, že rozptyl b_g nemůže být nikdy menší, než rozptyl b. Naopak, při podobně se chovajících veličinách x a z bude rozptyl b_g mnohem větší.

Ze vztahu (7.17) o střední hodnotě $\mathbf{b}$ zde speciálně dostaneme vychýlení odhadu b

$$\mathsf{bias}\, b = \frac{T_{xz}}{T_{xx}}\gamma = \sqrt{\frac{T_{zz}}{T_{xx}}}r_{xz}\gamma.$$

○

7.3. Varianční matice

Předpokládejme, že ve skutečnosti platí

$$\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1}), \tag{7.20}$$

kde $\mathbf{W} > 0$ je známá pozitivně definitní matice. Možné odhady jsme popsali v oddílu 2.8. Zde se pokusíme zjistit následky toho, že vycházíme z předpokladu

$$\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I}). \tag{7.21}$$

Naším hlavním cílem je zjistit, kdy je takto získaný běžný odhad $\hat{\mathbf{Y}}$ totožný s optimálním odhadem $\hat{\mathbf{Y}}_W$.

Odhad $\hat{\mathbf{Y}}$ je i za platnosti modelu (7.20) nestranným odhadem $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$:

$$\mathsf{E}\,\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{H}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}.$$

Varianční matici odhadu $\hat{\mathbf{Y}}$ dostaneme také snadno:

$$\mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}} = \mathsf{var}\,\mathbf{H}\mathbf{Y} = \mathbf{H}\sigma^2\mathbf{W}^{-1}\mathbf{H} = \sigma^2\mathbf{H}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{H}.$$

Vyjdeme ze známé ortonormální matice $\mathbf{P} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N})$, kde $\mathbf{Q}$ je taková matice, že platí $\mathcal{M}(\mathbf{X}) = \mathcal{M}(\mathbf{Q})$. Zavedeme-li pracovní označení

$$\mathbf{T}_{QQ} = \mathbf{Q}'\mathbf{W}\mathbf{Q}, \tag{7.22}$$

$$\mathbf{T}_{QN} = \mathbf{Q}'\mathbf{W}\mathbf{N}, \tag{7.23}$$

$$\mathbf{T}_{NN} = \mathbf{N}'\mathbf{W}\mathbf{N}, \tag{7.24}$$

můžeme matici $\mathbf{W}$ zapsat jako $\mathbf{W} = \mathbf{P}\mathbf{P}'\mathbf{W}\mathbf{P}\mathbf{P}'$, tedy

$$\mathbf{W} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N}) \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{QQ} & \mathbf{T}_{QN} \\ \mathbf{T}'_{QN} & \mathbf{T}_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}' \\ \mathbf{N}' \end{pmatrix} \tag{7.25}$$

$$= \mathbf{Q}\mathbf{T}_{QQ}\mathbf{Q}' + \mathbf{Q}\mathbf{T}_{QN}\mathbf{N}' + \mathbf{N}\mathbf{T}'_{QN}\mathbf{Q}' + \mathbf{N}\mathbf{T}_{NN}\mathbf{N}'. \tag{7.26}$$

Podobně lze vyjádřit matici $\mathbf{W}^{-1}$ jako

$$\mathbf{W}^{-1} = \mathbf{Q}\mathbf{T}^{QQ}\mathbf{Q}' + \mathbf{Q}\mathbf{T}^{QN}\mathbf{N}' + \mathbf{N}\mathbf{T}'^{QN}\mathbf{Q}' + \mathbf{N}\mathbf{T}^{NN}\mathbf{N}'.$$

7.3.1. Totožné odhady

Zajímá nás, kdy jsou odhady $\hat{\mathbf{Y}}_W$ a $\hat{\mathbf{Y}}$ totožné. Je to právě tehdy, když jsou obě projekční matice totožné, tedy když platí (viz též větu 2.8)

$$\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}' = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'\mathbf{W}. \tag{7.27}$$

K maticím $\mathbf{X}$ a $\mathbf{Q}$ existuje matice $\mathbf{C}$ typu $r \times k$ taková, že je $\mathbf{X} = \mathbf{Q}\mathbf{C}$ (jsou to souřadnice jednotlivých sloupců matice $\mathbf{X}$ v bázi $\mathbf{Q}$). Protože řádky matice $\mathbf{C}$ musí být lineárně nezávislé, existuje její pravá inverzní matice $\mathbf{C}^{-}$. Když použijeme vyjádření $\mathbf{X} = \mathbf{Q}\mathbf{C}$, dostaneme s použitím (7.26) a vlastností matice $\mathbf{P}$

$$\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X} = \mathbf{C}'\mathbf{Q}'\mathbf{W}\mathbf{Q}\mathbf{C} = \mathbf{C}'\mathbf{T}_{QQ}\mathbf{C}.$$

Odtud je snadno matice $\mathbf{C}^{-}\mathbf{T}_{QQ}^{-1}\mathbf{C}^{-'}$ nějakou pseudoinverzní maticí matice $\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X}$. Dosadíme-li do (7.27), dostaneme s využitím (7.25)

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}\mathbf{Q}' &= \mathbf{Q}\mathbf{C}(\mathbf{C}^{-}\mathbf{T}_{QQ}^{'-1}\mathbf{C}^{-'})\mathbf{C}'\mathbf{Q}'\mathbf{W} \\ &= \mathbf{Q}\mathbf{T}_{QQ}^{-1}(\mathbf{T}_{QQ}\mathbf{Q}' + \mathbf{T}_{QN}\mathbf{N}') \\ &= \mathbf{Q}\mathbf{Q}' + \mathbf{Q}\mathbf{T}_{QQ}^{-1}\mathbf{T}_{QN}\mathbf{N}'.\end{aligned}$$

Uvážíme-li že matice $\mathbf{Q}$ a $\mathbf{N}$ mají lineárně nezávislé sloupce, došli jsme k tvrzení následující věty:

Věta 7.4. Odhady $\hat{\mathbf{Y}}_W$ a $\hat{\mathbf{Y}}$ jsou totožné, právě když platí

$$\mathbf{O} = \mathbf{T}_{QN} = \mathbf{Q}'\mathbf{W}\mathbf{N}, \tag{7.28}$$

což je ekvivalentní s podmínkou

$$\mathbf{O} = \mathbf{T}^{QN} = \mathbf{Q}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{N}. \tag{7.29}$$

D ů k a z: K dokončení důkazu stačí ukázat ekvivalenci obou podmínek. Stačí si však uvědomit, že inverzní matice k blokově diagonální matici je opět blokově diagonální. □

Totožnost obou odhadů je tedy zajištěna, když ortogonální skupiny sloupců matic $\mathbf{Q}, \mathbf{N}$ jsou vůči sobě ortogonální také v prostoru deformovaném maticí $\mathbf{W}$. (McElroy (1967))

7.3.2. Odhad rozptylu

Jsou-li splněny klasické předpoklady, je S^2 nestranným odhadem rozptylu σ^2. Důkaz byl založen na tom, že v klasickém lineárním modelu platí $\mathsf{E}\, RSS = (n-r)\sigma^2$.

Zachováme-li označení z 2. kapitoly, můžeme psát

$$RSS = \|\mathbf{u}\|^2 = \|\mathbf{N}\mathbf{N}'\mathbf{e}\|^2 = \|\mathbf{N}'\mathbf{e}\|^2,$$

když jsme použili ortonormalitu sloupců matice $\mathbf{N}$. Má-li náhodný vektor $\mathbf{Y}$ a tedy náhodný vektor $\mathbf{e}$ varianční matici $\sigma^2\mathbf{W}^{-1}$, má náhodný vektor $\mathbf{N}'\mathbf{Y}$ nulovou střední hodnotu a varianční matici

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\,\mathbf{N}'\mathbf{e} &= \sigma^2\mathbf{N}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{N}\\ &= \sigma^2\mathbf{T}^{NN}\end{aligned}$$

Došli jsme k následujícímu tvrzení:

Věta 7.5. V modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1})$ je statistika S^2 nestranným odhadem rozptylu σ^2 právě, když platí $\mathsf{tr}\,\mathbf{N}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{N} = n - r$.

Žádáme tedy, aby varianční matice vektoru $\mathbf{N}'\mathbf{Y}$ měla stejnou stopu, ať už platí model $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1})$ nebo model $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$.

7.3.3. Test podmodelu

Tentokrát musíme předpokládat normální rozdělení $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1})$. Požadavek $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0$ určí podmodel uvažovaného modelu, když platí $\mathcal{M}(\mathbf{X}_0) \subset \mathcal{M}(\mathbf{X})$ a současně $0 < \mathsf{h}(\mathbf{X}_0) = r_0 < \mathsf{h}(\mathbf{X}) = r$.

O platnosti podmodelu se rozhoduje pomocí F statistiky z věty 3.1, tvrzení d). V porovnání se zmiňovanou větou tentokrát má náhodný vektor $\mathbf{Y}$ jinou varianční matici. Tvrzení však zůstane v platnosti, pokud náhodný vektor

$$\begin{pmatrix}\mathbf{Q}_1'\\ \mathbf{N}'\end{pmatrix}\mathbf{Y}$$

má rozdělení $\mathsf{N}(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I})$. K tomu stačí, aby bylo současně

$$\mathbf{Q}_1'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{Q}_1 = \mathbf{I} \tag{7.30}$$

$$\mathbf{Q}_1'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{N} = \mathbf{O} \tag{7.31}$$

$$\mathbf{N}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{N} = \mathbf{I}. \tag{7.32}$$

Věta 7.6.(Jeyaratnam (1982)) Když existuje matice $\mathbf{D}$ tak, že platí

$$\mathbf{W}^{-1} = \mathbf{I} + \mathbf{X}_0\mathbf{D}' + \mathbf{D}\mathbf{X}_0', \tag{7.33}$$

a platí podmodel, pak statistika F z (3.10) má rozdělení $\mathsf{F}_{r-r_0,n-r}$.

D ů k a z: Je třeba dokázat, že platí vztahy (7.30)–(7.32). Toho se snadno dosáhne, když se využije vztahů $\mathbf{X}_0'\mathbf{N} = \mathbf{O}$ a $\mathbf{Q}_1'\mathbf{X}_0 = \mathbf{O}$. □

7.3.4. Příklady

Zde uvedeme dva modely, které vedou k speciálním maticím $\mathbf{W}$.

Příklad 7.2 (náhodné bloky) Rozšiřme úlohu, která vedla na jednoduché třídění. Opět chceme porovnat I nějakých ošetření. Abychom co možná nejvíce zmenšili vliv variability pokusných objektů (zvířat, osob, políček), sestavíme nejprve J pokud možno homogenních skupin (*bloků*) po I prvcích (myši z jednoho hnízda, sourozenci, velké pole, v němž vydělujeme políčka). V daném bloku pak náhodně přidělíme každému prvku jedno ošetření. Výsledný model by měl splňovat ($1 \le i \le I, 1 \le j \le J$)

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + B_j + e_{ij}, \tag{7.34}$$

kde $e_{ij} \sim \mathsf{N}(0, \sigma^2)$, $B_j \sim \mathsf{N}(0, \sigma_B^2)$ je celkem $IJ + J$ nezávislých náhodných veličin. Neznámé konstanty (parametry) α_i se nazývají *pevné efekty*, kdežto B_j jsou *náhodné efekty* jednotlivých bloků.

Snadno zjistíme, že platí

$$\mathsf{cov}(Y_{ij}, Y_{pq}) = \mathsf{cov}(B_j + e_{ij}, B_q + e_{pq}) = \delta_{ip}\delta_{jq}\sigma^2 + \delta_{jq}\sigma_B^2,$$

což lze pomocí Kroneckerova součinu (viz (A.21)) zapsat jako

$$\begin{aligned} \mathsf{var}\,\mathbf{Y} &= \sigma^2(\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{I}_J) + \sigma_B^2(\mathbf{1}\mathbf{1}' \otimes \mathbf{I}_J) \\ &= \sigma^2 \left((\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{I}_J) + \frac{\sigma_B^2}{\sigma^2}(\mathbf{1}\mathbf{1}' \otimes \mathbf{I}_J) \right) \end{aligned} \tag{7.35}$$

Protože v našem modelu mají jednotlivé složky vektoru $\mathbf{Y}$ stejné střední hodnoty, jako v modelu analýzy rozptylu jednoduchého třídění, je stejná i matice $\mathbf{X}$. Matici $\mathbf{P} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N})$ s ortonormální bází $\mathbb{R}^n$ snadno vyjádříme pomocí matice $\mathbf{N}_0$ typu $J \times (J-1)$, pro kterou je $(\sqrt{(1/J)}\mathbf{1}, \mathbf{N}_0)$ ortonormální. Snadno je

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{I}_I \otimes \sqrt{(1/J)}\mathbf{1}), \tag{7.36}$$

$$\mathbf{N} = \mathbf{I}_I \otimes \mathbf{N}_0. \tag{7.37}$$

Ověříme, že jsou oba odhady $\hat{\mathbf{Y}}_W = \hat{\mathbf{Y}}$ v modelu náhodných bloků totožné. Podle věty 7.4 stačí ověřit podmínku (7.29):

$$\mathbf{Q}'\mathbf{W}^{-1}\mathbf{N} = \sqrt{\frac{1}{J}}(\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{1}') \left((\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{I}_J) + \frac{\sigma_B^2}{\sigma^2}(\mathbf{1}\mathbf{1}' \otimes \mathbf{I}_J) \right) (\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{N}_0), \tag{7.38}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{J}} \left((\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{1}'\mathbf{N}_0) + \frac{\sigma_B^2}{\sigma^2}(\mathbf{1}\mathbf{1}' \otimes \mathbf{1}'\mathbf{N}_0) \right), \tag{7.39}$$

$$= \mathbf{O}, \tag{7.40}$$

neboť je $\mathbf{1}'\mathbf{N}_0 = \mathbf{0}'$.

Dál se snadno zjistí, že je $\mathsf{tr}\,(\mathbf{I}_I \otimes \mathbf{N}_0'\mathbf{N}_0) = I(J-1) = n - I$, takže odhad S^2 je nutně kladně vychýleným odhadem σ^2. Podobně se dá ukázat, že matici $\mathbf{W}^{-1}$ nelze pro test hypotézy, že pevné efekty jsou totožné, zapsat ve tvaru (7.33) z věty 7.6, neboť druhý sčítanec ve vyjádření $\mathbf{W}^{-1}$ má pro $\sigma_B > 0$ hodnost $J-1$, kdežto matice podmodelu má hodnost zřejmě jen 1. ◯

Příklad 7.3 (adjustace) Měřicí přístroj je třeba nejprve adjustovat, nastavit na něm nulu. K tomuto účelu se provádí n_0 měření Y_{0i}^* známého etalonu s hodnotou μ_0, a pak se k nastavení stupnice použije zjištěný průměr $\bar{Y}_0^* \sim \mathsf{N}\big(\mu_0, \sigma^2/n_0\big)$. Vlastní měření (vyjádřené na stupnici před nastavením nuly) vyhovuje modelu $Y_i^* \sim \mathsf{N}\big(\beta_0^* + \mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\big)$ pro $i = 1, \ldots, n$. Ve skutečnosti však porovnáváme zjištěnou úroveň měřené veličiny s průměrnou hodnotou $\bar{Y}_0^*$ u etalonu, takže dál budeme zpracovávat náhodné veličiny Y_i vyhovující modelu

$$\begin{aligned} Y_i &= Y_i^* - \bar{Y}_0^* \\ &= (\beta_0^* - \mu_0) + \mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta} + (e_i^* - \bar{e}_0^*) \\ &= \beta_0 + \mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta} + e_i, \end{aligned}$$

kde $\bar{e}^*, e_1^*, \ldots, e_n^*$ jsou nezávislé náhodné veličiny. Protože platí

$$\begin{aligned} \mathsf{cov}(Y_i, Y_j) &= \mathsf{cov}(e_i^* - \bar{e}_0^*, e_j^* - \bar{e}_0^*) \\ &= \delta_{ij}\sigma^2 + \sigma^2/n_0, \end{aligned}$$

můžeme varianční matici psát ve tvaru

$$\mathsf{var}\,\mathbf{Y} = \sigma^2\left(\mathbf{I} + (1/n_0)\mathbf{1}\mathbf{1}'\right) \tag{7.41}$$

Každá složka vektoru $\mathbf{Y}$ má rozptyl $((n_0+1)/n_0)\sigma^2$ a každé dvě různé složky stejnou kovarianci $(1/n_0)\sigma^2$.

Lze snadno ukázat, že v popsaném modelu jsou odhady $\hat{\mathbf{Y}}$ a $\hat{\mathbf{Y}}_W$ totožné, také odhad S^2 rozptylu σ^2 je nestranný. Je-li podmodelem $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} \sim (\mathbf{1}\gamma, \sigma^2\mathbf{W}^{-1})$, je také splněn předpoklad (7.33) věty 7.6.

K popsané úloze se dojde například při měření fluorescence, které je vlastně měřením relativním. Neznáme totiž multiplikativní konstantu, která udává poměr mezi naměřeným elektrickým signálem a skutečně vyzářenou energií. K aditivnímu modelu, jako v našem příkladu, dojdeme po logaritmování. ◯

7.4. Typ rozdělení

Nakonec pojednáme o vlivu nesplnění předpokladu normálního rozdělení. Budeme předpokládat model $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$, přičemž náhodné veličiny jsou $Y_1, \ldots, Y_n$ nezávislé, mají stejné rozdělení s šikmostí γ_1 a špičatostí γ_2 (pro určitost: $\gamma_2 = \mathsf{E}\,(e_i/\sigma)^4 - 3$).

7.4.1. Optimalita odhadu rozptylu

Zavedli jsme odhad S^2 rozptylu σ^2, zjistili jsme (2.11), že je nestranný. Nezabývali jsme se však otázkou, zda je tento odhad nejlepší. Pro jednoduchost budeme odhadovat násobek parametru σ^2, parametr $\theta = (n-r)\sigma^2$, pro který je nestranným odhadem statistika RSS. V dalším budeme zjišťovat, za jakých předpokladů je ve zvolené třídě odhadů odhad RSS nejlepším odhadem θ.

Nechť $\mathbf{A}$ je libovolná pozitivně semidefinitní matice typu $n \times n$. Vyšetřujme vlastnosti statistiky $T = \mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$, která je vzhledem k předpokladu $\mathbf{A} \geq 0$ nezáporná. Má-li být tato statistika nestranným odhadem parametru θ, musí pro všechna $\boldsymbol{\beta}$ a $\sigma^2 > 0$ platit:

$$\begin{aligned} \mathsf{E}\, T = \mathsf{E}\, \mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y} &= \operatorname{tr} \mathbf{A}\mathsf{E}\, \mathbf{Y}\mathbf{Y}' = \operatorname{tr} \mathbf{A}((\mathsf{E}\, \mathbf{Y})(\mathsf{E}\, \mathbf{Y})' + \operatorname{var} \mathbf{Y}) \\ &= \operatorname{tr} \mathbf{A}\left(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}' + \sigma^2\mathbf{I}\right) = \boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{A}\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \sigma^2 \operatorname{tr} \mathbf{A} = (n-r)\sigma^2. \end{aligned}$$

Vzhledem k požadované pozitivní semidefinitnosti matice $\mathbf{A}$ je nestrannost T ekvivalentní s dvojicí požadavků

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{O}, \tag{7.42}$$

$$\operatorname{tr} \mathbf{A} = n - r. \tag{7.43}$$

Požadavek (7.42) umožňuje místo $\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$ psát $\mathbf{e}'\mathbf{A}\mathbf{e}$. Podle věty A.11 dostaneme

$$\operatorname{var} \mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y} = \sigma^4\left(\gamma_2 \sum a_{ii}^2 + 2 \operatorname{tr} \mathbf{A}^2\right).$$

Protože je naším cílem konfrontovat odhad $T = \mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y}$ s odhadem $RSS = \mathbf{Y}'\mathbf{M}\mathbf{Y}$, zavedeme matici $\mathbf{D} = \mathbf{A} - \mathbf{M}$. Požadavek (7.43) přejde v požadavek

$$\operatorname{tr} \mathbf{D} = 0, \tag{7.44}$$

podobně požadavek (7.42) znamená $\mathbf{O} = (\mathbf{M} + \mathbf{D})\mathbf{X} = \mathbf{D}\mathbf{X}$. Je tedy nutně (nezapomeňme, že matice $\mathbf{D}$ je symetrická) $\mathcal{M}(\mathbf{D}) \subset \mathcal{M}(\mathbf{M})$, tedy

$$\mathbf{M}\mathbf{D} = \mathbf{D}. \tag{7.45}$$

Nyní budeme minimalizovat rozptyl kvadratické formy s maticí $\mathbf{A} = \mathbf{M} + \mathbf{D}$. K tomu budeme potřebovat druhou mocninu matice $\mathbf{A}$. S využitím (7.45) a (7.44) dostaneme

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^2 &= (\mathbf{M} + \mathbf{D})(\mathbf{M} + \mathbf{D}) \\ &= \mathbf{M} + 2\mathbf{D} + \mathbf{D}^2, \\ \operatorname{tr} \mathbf{A}^2 &= (n-r) + \operatorname{tr} \mathbf{D}^2. \end{aligned}$$

Proto nakonec vychází

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\,\mathbf{Y}'\mathbf{A}\mathbf{Y} &= \sigma^4\left(\gamma_2\left(\sum m_{ii}^2 + 2\sum m_{ii}d_{ii} + \sum d_{ii}^2\right) + 2(n-r) + 2\,\mathsf{tr}\,\mathbf{D}^2\right)\\ &= \sigma^4\left(\gamma_2\sum m_{ii}^2 + 2(n-r)\right)\\ &\quad + 2\sigma^4\left(\gamma_2(\sum d_{ii}^2/2 + \sum m_{ii}d_{ii}) + \mathsf{tr}\,\mathbf{D}^2\right)\\ &= \mathsf{var}\,\mathbf{Y}'\mathbf{M}\mathbf{Y} + 2\sigma^4 g(\mathbf{D}),\end{aligned}$$

kde jsme zavedli

$$g(\mathbf{D}) = \gamma_2\left(\sum d_{ii}^2/2 + \sum m_{ii}d_{ii}\right) + \mathsf{tr}\,\mathbf{D}^2.$$

Popíšeme dvě situace, v nichž funkce $g(\mathbf{D})$ minimální právě pro $\mathbf{D} = \mathbf{O}$.

Případ $\gamma_2 = 0$. Tento předpoklad splňuje zejména normální rozdělení. Funkce $g(\mathbf{D}) = \mathsf{tr}\,\mathbf{D}^2$ je nezáporná, minimální je právě pro $\mathbf{D} = \mathbf{O}$.

Případ $m_{ii} = m$. Pokud jsou všechny diagonální prvky matice $\mathbf{M}$ stejné, musí být rovny hodnotě $(n-r)/n$, neboť stopa matice $\mathbf{M}$ je rovna $n-r$. Proto lze funkci $g(\mathbf{D})$ postupně (použij (7.44)) upravit na výraz

$$\begin{aligned}g(\mathbf{D}) &= \gamma_2\sum d_{ii}^2/2 + \sum\sum d_{ij}^2\\ &= (\gamma_2/2+1)\sum d_{ii}^2 + 2\sum_{i<j}\sum d_{ij}^2.\end{aligned}$$

Výraz je minimální opět pro $\mathbf{D} = \mathbf{O}$, neboť obecně platí $\gamma_2 \geq -2$.

Shrneme-li svá zjištění, dostaneme následující tvrzení.

Věta 7.7.(Atiqullah (1962)) Jestliže platí některá z podmínek

$$\gamma_2 = 0, \tag{7.46}$$

$$h_{ii} = h, \qquad 1 \leq i \leq n, \tag{7.47}$$

potom je odhad S^2 nejlepším kvadratickým nezáporným nestranným odhadem rozptylu σ^2. Je-li splněna podmínka (7.47), potom platí

$$\mathsf{var}\,S^2 = \frac{2\sigma^4}{n-r}\left(1 + \frac{\gamma_2}{2}\frac{n-r}{n}\right).$$

D ů k a z: K důkazu stačí si uvědomit, že platí $h_{ii} = 1 - m_{ii}$, zbytek důkazu plyne z úvah uvedených před zněním tvrzení. □

Splňuje-li lineární model podmínku (7.47), říkáme, že je to **kvadraticky vyvážený** model. Mezi kvadraticky vyvážené patří zejména mnohé modely analýzy rozptylu.

7.4.2. Test podmodelu

Snadno se lze přesvědčit, že v normálním lineárním modelu lze statistiku F (3.10) pro testování podmodelu $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{X}_0\boldsymbol{\beta}_0$ vyjádřit jako podíl dvou nezávislých nestranných odhadů rozptylu (pro zjednodušení označíme $\mathbf{Q}_2 = \mathbf{N}$, příslušné stupně volnosti jsou $f_1 = r - r_0$ a $f_2 = n - r$)

$$F = \frac{\mathbf{Y}'\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'\mathbf{Y}/f_1}{\mathbf{Y}'\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_2'\mathbf{Y}/f_2},$$

přičemž pozitivně semidefinitní idempotentní (projekční) matice $\mathbf{Q}_j\mathbf{Q}_j'$ mají hodnosti $\mathsf{h}(\mathbf{Q}_j\mathbf{Q}_j') = \mathsf{h}(\mathbf{Q}_j) = f_j$ a platí $\mathbf{Q}_1'\mathbf{Q}_2 = \mathbf{O}$. V dalším budeme aproximovat první dva momenty logaritmu statistiky F a pokusíme se vymezit, kdy budou tyto aproximace stejné, jako v případě normálního lineárního modelu s klasickou variančí maticí.

Označme vektor diagonálních prvků matice $\mathbf{Q}_j\mathbf{Q}_j'$ symbolem $\mathbf{q}_j$. Potom pro j-tý odhad rozptylu

$$S_j^2 = \mathbf{Y}'\mathbf{Q}_j\mathbf{Q}_j'\mathbf{Y}/f_j \tag{7.48}$$

s použitím věty A.11 platí $\mathsf{E}\,S_j^2 = \sigma^2$ a také

$$\begin{aligned}\mathsf{var}\,S_j^2 &= \frac{\sigma^4}{f_j^2}(\gamma_2\mathbf{q}_j'\mathbf{q}_j + 2f_j), \qquad j = 1, 2,\\ \mathsf{cov}(S_1^2, S_2^2) &= \frac{\sigma^4}{f_1 f_2}\gamma_2\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2.\end{aligned}$$

K nekorelovanosti obou odhadů rozptylu zdánlivě není nutné $\gamma_2 = 0$ (např. normální rozdělení), stačila by „ortogonalita“ diagonálních prvků matic $\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'$ a $\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_2'$. Tyto matice jsou však pozitivně semidefinitní, takže vektory $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ mají nezáporné prvky. K ortogonalitě by se tedy musel sejít každý nenulový prvek jednoho vektoru s nulovým prvkem druhého vektoru. Přitom přinejmenším u diagonálních prvků matice $\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_2' = \mathbf{M}$ jsou v rozumných případech nulové prvky vyloučeny (viz větu 8.1).

Místo F budeme dál vyšetřovat rozdělení $Z = (1/2)\log F$, neboť i v normálním modelu je rozdělení statistiky Z mnohem více symetrické, lépe aproximovatelné normálním rozdělením. Pomocí Taylorova rozvoje

$$\log S_j^2 \doteq \log\sigma^2 + \frac{S_j^2 - \sigma^2}{1!}\frac{1}{\sigma^2} + \frac{(S_j^2 - \sigma^2)^2}{2!}\left(-\frac{1}{\sigma^4}\right)$$

dostaneme

$$\mathsf{E}\,\log S_j^2 \doteq \log\sigma^2 - \frac{\mathsf{var}\,S_j^2}{2\sigma^4} \tag{7.49}$$

$$= \log\sigma^2 - \frac{1}{f_j} - \frac{\gamma_2}{2f_j^2}\mathbf{q}_j'\mathbf{q}_j, \tag{7.50}$$

takže pro $\mathsf{E}\, Z$ dostaneme aproximaci

$$\begin{aligned}\mathsf{E}\, Z &\doteq \frac{1}{2}(\mathsf{E}\, \log S_1^2 - \mathsf{E}\, \log S_2^2) \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{f_2} - \frac{1}{f_1} + \frac{\gamma_2}{2}\left(\frac{1}{f_2^2}\mathbf{q}_2'\mathbf{q}_2 - \frac{1}{f_1^2}\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_1\right)\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{f_2} - \frac{1}{f_1} + \frac{\gamma_2}{2f_1^2 f_2^2}(f_1\mathbf{q}_2 - f_2\mathbf{q}_1)'(f_1\mathbf{q}_2 + f_2\mathbf{q}_1)\right).\end{aligned}$$

Podobně pomocí aproximace $\log S_j^2 \doteq \log\sigma^2 + (S^2 - \sigma^2)/\sigma^2$ dostaneme

$$\mathsf{var}\, Z \doteq \frac{1}{2}\left(\frac{1}{f_1} + \frac{1}{f_2}\right)\left(1 + \frac{\gamma_2}{2f_1 f_2(f_1 + f_2)}(f_1\mathbf{q}_2 - f_2\mathbf{q}_1)(f_1\mathbf{q}_2 - f_2\mathbf{q}_1)\right).$$

Závěr je nasnadě. Aproximované první dva momenty statistiky Z nezávisí na hodnotě γ_2, když platí

$$f_1\mathbf{q}_2 = f_2\mathbf{q}_1. \tag{7.51}$$

Jednou ze situací, kdy je tato podmínka splněna, je případ kdy model i podmodel jsou kvadraticky vyvážené. Pak je totiž $\mathbf{q}_j = (f_j/n)\mathbf{1}$ a podmínka (7.51) je bezpečně splněna.

Poznámka. V článku Box, Watson (1962) je vyšetřován speciální podmodel $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{1}\beta_0$. Technikou permutačních momentů je ukázáno, že rozptyl testové statistiky nezávisí na γ_2 v případě, že se řádky matice $\mathbf{X}$ (nebereme v úvahu sloupec $\mathbf{1}$, jehož přítomnost v $\mathbf{X}$ se předpokládá) chovají jako náhodný výběr z mnohorozměrného normálního rozdělení.

7.4.3. Příklady

Ukažme si příklad kvadraticky vyváženého modelu.

Příklad 7.4 (dvojné třídění) V oddílu 6.2 jsme zavedli model pro

$$Y_{ijt} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + e_{ijt}, \quad 1 \le t \le n_{ij}, 1 \le i \le I, 1 \le j \le J,$$

přičemž náhodné veličiny $e_{ijt} \sim \mathsf{N}(0, \sigma^2)$ jsou nezávislé. Vysvětlili jsme, že je

$$\hat{Y}_{ijt} = \bar{Y}_{ij\bullet} = \frac{1}{n_{ij}}\sum_{t=1}^{n_{ij}} Y_{ijt}.$$

Je tedy $h_{ijt,ijt} = 1/n_{ij}$, takže o kvadraticky vyvážený model půjde v případě, že počty opakování n_{ij} budou shodné, tj. když bude $n_{ij} = T$ pro všechna i, j.

Když testujeme nulovou hypotézu, podle které je vliv faktorů A, B aditivní, ověřujeme vlastně podmodel daný omezeními $\gamma_{ij} = 0$ pro všechna i, j, tedy platí

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + e_{ijt}, \quad 1 \le t \le n_{ij}, 1 \le i \le I, 1 \le j \le J.$$

V případě $n_{ij} = T$ pro všechna i, j bude v podmodelu odhadem střední hodnoty $\mathsf{E}\, Y_{ijt}$ výraz

$$\begin{aligned}\hat{Y}^0_{ijt} &= \bar{Y}_{i\bullet\bullet} + \bar{Y}_{\bullet j\bullet} - \bar{Y}_{\bullet\bullet\bullet} \\ &= \frac{1}{JT}\sum_{j't'} Y_{ij't'} + \frac{1}{IT}\sum_{i't'} Y_{i'jt'} - \frac{1}{IJT}\sum_{i'j't'} Y_{i'j't'},\end{aligned}$$

takže tentokrát je

$$h^0_{ijt,ijt} = \frac{1}{JT} + \frac{1}{IT} - \frac{1}{IJT}.$$

Vektor $\mathbf{q}_1$ z odstavce 7.4.2 (diagonála matice $\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_1'$) má tedy každém místě prvek

$$h_{ijt,ijt} - h^0_{ijt,ijt} = \frac{1}{T} - \left(\frac{1}{JT} + \frac{1}{IT} - \frac{1}{IJ}\right) = \frac{(I-1)(J-1)}{IJT}.$$

Ukázkou kvadraticky vyváženého modelu je příklad 6.7. ◯

8. Rezidua

V této kapitole se budeme věnovat podrobně složkám u_i vektoru $\mathbf{u}$ a jednotlivým jejich „vylepšením“. Zavedeme dvojí upravená rezidua, vhodná zejména pro testování odlehlosti jednotlivých pozorování. Proto bude užitečné vyšetřit vlastnosti odhadů po vynechání jednoho pozorování.

8.1. Vynechání jednoho pozorování

Zvolíme pevně index t a budeme se snažit vyšetřit model bez tohoto pozorování (nazveme jej *model vynechaného pozorování*). Použijeme při tom označení zavedené na začátku appendixu:

$$\mathbf{Y}_{-t} \sim (\mathbf{X}_{-t\bullet}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I}). \tag{8.1}$$

Odhady v modelu (8.1) budeme porovnávat s jiným modelem, kde naopak přidáme jednu nezávisle proměnnou, specifickou pro jediné, t-té pozorování (nazveme *model odlehlého pozorování*).

$$\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{j}_t\gamma, \sigma^2\mathbf{I}). \tag{8.2}$$

V tomto druhém případě jde o speciální případ rozšířeného modelu (7.1), proto statistiky vztažené k tomuto modelu označíme dolním indexem g. Nejprve se budeme zajímat o předpoklady, které zajistí odhadnutelnost parametru γ.

Věta 8.1. Následující tři tvrzení jsou ekvivalentní:

$$\mathsf{h}(\mathbf{X}) = \mathsf{h}(\mathbf{X}_{-t\bullet}), \tag{8.3}$$

$$m_{tt} > 0, \tag{8.4}$$

$$\gamma \text{ je v modelu (8.2) odhadnutelné.} \tag{8.5}$$

D ů k a z: Platí ekvivalence

$$m_{tt} = \mathbf{j}_t'\mathbf{M}\mathbf{j}_t = 0 \Leftrightarrow \mathbf{M}\mathbf{j}_t = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{j}_t \in \mathcal{M}(\mathbf{X}).$$

To znamená, že $m_{tt} = 0$ právě tehdy, když existuje $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^k$ tak, že je $\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{j}_t$. Jinými slovy právě tehdy, když existuje vektor $\mathbf{a}$, který je kolmý na všechny řádky matice

$\mathbf{X}$ s výjimkou t-tého. Poslední tvrzení však lze psát také tak, že $\mathcal{M}(\mathbf{X}')^\perp$ je vlastní podmnožinou $\mathcal{M}((\mathbf{X}_{-t\bullet})')^\perp$, což je opět ekvivalentní s tvrzením, že $\mathcal{M}((\mathbf{X}_{-t\bullet})')$ je vlastní podmnožinou $\mathcal{M}(\mathbf{X}')$, což je už naposled ekvivalentní s tvrzením $\mathsf{h}(\mathbf{X}_{-t\bullet}) < \mathsf{h}(\mathbf{X})$. Protože nutně platí $\mathsf{h}(\mathbf{X}_{-t\bullet}) \leq \mathsf{h}(\mathbf{X})$, dokázali jsme tak ekvivalenci (8.3) a (8.4).

Věnujme se nyní odhadnutelnosti parametru γ v modelu (8.2). Ta je ekvivalentní s existencí vektoru $\mathbf{q}$ splňujícího $(\mathbf{0}', 1) = \mathbf{q}'(\mathbf{X}, \mathbf{j}_t)$, tedy $1 = \mathbf{q}'\mathbf{j}_t = q_t$ a současně $\mathbf{q}'\mathbf{X} = \mathbf{0}'$. Druhý vztah je ekvivalentní s tvrzením $(\mathbf{x}_{t\bullet})' = (-\mathbf{q}_{-t})'\mathbf{X}_{-t\bullet}$. Je tedy $\mathbf{x}_{t\bullet} \in \mathcal{M}((\mathbf{X}_{-t\bullet})')$, což je konečně ekvivalentní s (8.3). □

Nyní vyjádříme v našem speciálním případě řešení c_g normální rovnice modelu (8.2) podle (7.6)

$$c_g = (\mathbf{j}_t'\mathbf{M}\mathbf{j}_t)^-\mathbf{j}_t'\mathbf{u}.$$

Je-li $m_{tt} > 0$, je parametr γ odhadnutelný a vyjde

$$c_g = \frac{u_t}{m_{tt}}. \tag{8.6}$$

Podobně podle (7.7) vyjde v tomto případě

$$\mathbf{b}_g = \mathbf{b} - \frac{u_t}{m_{tt}}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{x}_{t\bullet} \tag{8.7}$$

a také

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{Y}}_g = \mathbf{X}\mathbf{b}_g + \mathbf{j}_t c_g \;&=\; \mathbf{X}\left(\mathbf{b} - (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{j}_t c_g\right) + \mathbf{j}_t c_g \\ &= \hat{\mathbf{Y}} + \frac{u_t}{m_{tt}}\left(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{X}'\right)\mathbf{j}_t \;=\; \hat{\mathbf{Y}} + \frac{u_t}{m_{tt}}\mathbf{m}_{t\bullet}.\end{aligned}$$

Protože je $\mathbf{d} = \hat{\mathbf{Y}}_g - \hat{\mathbf{Y}}$, dostaneme ještě

$$RSS - RSS_g = ||\mathbf{d}||^2 = \frac{u_t^2}{m_{tt}^2}(\mathbf{m}_{t\bullet})'\mathbf{m}_{t\bullet} = \frac{u_t^2}{m_{tt}}. \tag{8.8}$$

Vraťme se ke vztahu modelů (8.1) a (8.2). Odhady v modelu (8.1) označíme dolním indexem $[-t\bullet]$.

Věta 8.2. (Ekvivalence dvou modelů) Vektor $\mathbf{b}_g$ je řešením normální rovnice modelu (8.1) právě, když je spolu s $c_g = Y_t - (\mathbf{x}_{t\bullet})'\mathbf{b}_g$ řešením modelu (8.2). Reziduální součty čtverců jsou v obou modelech stejné. Je-li $m_{tt} > 0$, pak platí

$$\mathbf{b}_{[-t\bullet]} = \mathbf{b} - \frac{u_t}{m_{tt}}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^-\mathbf{x}_{t\bullet}, \tag{8.9}$$

$$RSS_{[-t\bullet]} = RSS - \frac{u_t^2}{m_{tt}}, \tag{8.10}$$

$$\frac{S^2_{[-t\bullet]}}{S^2} = \frac{n - r - v_t^2}{n - r - 1}, \tag{8.11}$$

kde jsme označili

$$v_t = \frac{u_t}{S\sqrt{m_{tt}}}. \tag{8.12}$$

D ů k a z: Důkaz plyne ze vztahu

$$||\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{j}_t\gamma||^2 = ||\mathbf{Y}_{-t} - \mathbf{X}_{-t\bullet}\boldsymbol{\beta}||^2 + (Y_t - (\mathbf{x}_{t\bullet})'\boldsymbol{\beta} - \gamma)^2. \tag{8.13}$$

Je zřejmé, že pro každé $\boldsymbol{\beta}$ lze zvolit γ tak, aby se poslední člen na pravé straně anuloval. Vztahy (8.9) a (8.10) plynou pak bezprostředně z (8.7) a (8.8). Vztah (8.11) dostaneme postupnou úpravou založenou na $S^2_{[-t\bullet]} = RSS_{[-t\bullet]}/(n-1-r)$. □

Statistika v_t se nazývá *normované reziduum* (někdy také studentizované, ale toto označení použijeme později pro poněkud jinak definovanou statistiku). V prostředí R lze spočítat tato rezidua pomocí funkce `rstandard(a)`, kde `a` je výsledek použití funkce `lm()`. Jednoduchým důsledkem vztahu (8.11) je ekvivalence

$$S^2_{[-t\bullet]} < S^2 \Leftrightarrow |v_t| > 1. \tag{8.14}$$

Věta 8.3. (Vlastnosti normovaného rezidua) V normálním lineárním modelu splňujícím $m_{tt} > 0$ platí $\mathsf{E}\, v_t = 0$ a $\mathsf{var}\, v_t = 1$.

D ů k a z: Statistiku v_t lze psát jako

$$v_t = \frac{(\mathbf{j}_t'\mathbf{N})(\mathbf{N}'\mathbf{Y})}{||\mathbf{N}'\mathbf{Y}||}\sqrt{\frac{n-r}{m_{tt}}} = \frac{\sigma\mathbf{j}_t'\mathbf{N}\mathbf{U}}{\sigma||\mathbf{U}||}\sqrt{\frac{n-r}{m_{tt}}},$$

kde je $\mathbf{U} = \mathbf{N}'\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ (viz (2.21)). Protože se zřejmě v_t nezmění, když místo $\mathbf{U}$ pro $c > 0$ použijeme $c\mathbf{U}$, podle věty A.12 jsou náhodné veličiny S a v_t jsou nezávislé. Odtud plyne

$$0 = \mathsf{E}\, u_t = \mathsf{E}\,(v_t S\sqrt{m_{tt}}) = (\mathsf{E}\, v_t)(\mathsf{E}\, S)\sqrt{m_{tt}} \Rightarrow \mathsf{E}\, v_t = 0$$

a podobně

$$m_{tt}\sigma^2 = \mathsf{E}\, u_t^2 = (\mathsf{E}\, v_t^2)(\mathsf{E}\, S^2)m_{tt} = m_{tt}\sigma^2\mathsf{E}\, v_t^2 \Rightarrow \mathsf{E}\, v_t^2 = 1.$$

□

8.2. Studentizovaná rezidua

Jak jsme zjistili, pokud platí $m_{tt} > 0$, je parametr γ v modelu (8.2) odhadnutelný. Požadavek $\gamma = 0$ určuje podmodel, v němž platí $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$. Testování podmodelu lze testovat pomocí F statistiky, jednodušší bude v modelu (8.2) testovat hypotézu $\mathsf{H}_0 : \gamma = 0$ pomocí t-statistiky (2.23) z věty 2.6.

Odhad parametru γ známe z (8.6). Dále snadno zjistíme, že je

$$\mathsf{var}\, c_g = \mathsf{var}\left(\frac{u_t}{m_{tt}}\right) = \frac{\sigma^2 m_{tt}}{m_{tt}^2} = \frac{\sigma^2}{m_{tt}}.$$

Parametr σ^2 odhadneme pomocí $S^2_{[-t\bullet]}$, který je identický s odhadem rozptylu v modelu (8.2). Proto má t-statistika

$$v_t^* = \frac{u_t}{S_{[-t\bullet]}\sqrt{m_{tt}}} \tag{8.15}$$

za platnosti hypotézy rozdělení t_{n-r-1}. Statistika v_t^* se nazývá *studentizované reziduum*.

Zkusme použít model (8.1) k tomu, abychom odhadli neznámé parametry a pak ověřili, zda t-té pozorování klasického modelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ vyhovuje stejnému modelu.

Odhadněme nejprve střední hodnotu $\mathsf{E}\, Y_t = (\mathbf{x}_{t\bullet})'\boldsymbol{\beta}$ pomocí modelu (8.1), který náhodnou veličinu Y_t neobsahuje. Parametrická funkce $(\mathbf{x}_{t\bullet})'\boldsymbol{\beta}$ je nutně v tomto modelu odhadnutelná, neboť předpoklad $m_{tt} > 0$ je podle věty 8.1 ekvivalentní s tím, že matice $\mathbf{X}$ a $\mathbf{X}_{-t\bullet}$ mají stejnou hodnost, takže parametr $(\mathbf{x}_{t\bullet})'\boldsymbol{\beta}$ je odhadnutelný. Rozdíl mezi skutečným pozorováním a odhadem jeho střední hodnoty $Y_t - (\mathbf{x}_{t\bullet})'\mathbf{b}_{[-t\bullet]}$ je podle důkazu věty 8.2 roven právě c_g. Lze tedy definici studentizovaného rezidua (8.15) interpretovat jako porovnání předpovědi založené na modelu (8.1) se skutečnou hodnotou Y_t, což je typické pro postupy nazývané *jackkniffe*. Proto se někdy naše studentizovaná rezidua nazývají také *jackkniffe rezidua*. Samotný rozdíl c_g se v počítačových výstupech často nazývá *deleted residual*. V R se studentizovaná rezidua počítají pomocí funkce `rstudent(a)`, kde `a` je výsledek použití `lm()`.

Věta 8.4. (Vlastnosti studentizovaných reziduí) Nechť pro dané t, $1 \le t \le n$, v normálním lineárním modelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ platí $m_{tt} > 0$. Potom má studentizované reziduum v_t^* Studentovo t-rozdělení s $n - r - 1$ stupni volnosti a platí

$$\text{je-li } n - r > 2, \text{ pak } \mathsf{E}\, v_t^* = 0, \tag{8.16}$$

$$\text{je-li } n - r > 3, \text{ pak } \mathsf{var}\, v_t^* = \frac{n-r-1}{n-r-3}. \tag{8.17}$$

D ů k a z: K dokončení důkazu stačí připomenout vlastnosti Studentova rozdělení, viz například (Anděl, 1998, odst. 4.5). □

Poslední úvahou jsme vlastně sledovali smysl modelu odlehlého pozorování (8.2). Parametr γ slouží k tomu, aby střední hodnota t-tého pozorování mohla být zcela individuální, nezávislá na středních hodnotách ostatních pozorování. Pouze v případě $\gamma = 0$ je použitý model pro všechna pozorování stejný. Odtud dostáváme nejčastější

použití studentizovaných reziduí, kdy pomocí v_t^* testujeme, zda t-té pozorování je odlehlé, tj. má střední hodnotu jinou, než určuje model.

Uvedený postup je adekvátní v případě, že index t (které pozorování má být odlehlé) známe předem, nezávisle na náhodném vektoru $\mathbf{Y}$. Na hladině α označíme t-té pozorování (t předem dáno) za odlehlé, když platí $|v_t^*| \geq t_{n-r-1}(\alpha)$.

V praxi je mnohem častější jiná situace, kdy nevíme předem, které pozorování by mohlo být odlehlé. Z odlehlosti podezříváme takové pozorování, které má v absolutní hodnotě největší reziduum, případně v absolutní hodnotě největší studentizované reziduum (nebo normované reziduum, což je totéž). Řešená úloha patří k mnohonásobným srovnáním.

Pro $\delta \in (0,1)$ a pro $i = 1, \ldots, n$ zaveďme náhodné jevy $W_i(\delta) = \{|v_i^*| \geq t_{n-r-1}(\delta)\}$. Některé z n pozorování bychom měli na hladině nejvýše α označit za odlehlé, pokud platí $\mathsf{P}(\cup_{i=1}^n W_i(\delta)) \leq \alpha$. Problém jak zvolit δ pomůže vyřešit Bonferroniho nerovnost (viz též A.13 z appendixu pro $A_i = W_i(\delta)$). Zvolíme-li $\delta = \alpha/n$, bude zajištěno

$$\mathsf{P}(\cup_{i=1}^n W_i(\alpha/n)) \leq \sum_{i=1}^n \mathsf{P}(W_i(\alpha/n)) = \alpha.$$

Prakticky to znamená použít kritickou hodnotu $t_{n-r-1}(\alpha/n)$. Soudobé programové vybavení je schopno udat ke každému studentizovanému reziduu v_i^* hodnotu $p_i = \mathsf{P}(|T_{n-r-1}| \geq v_i^*)$, kde T_{n-r-1} je náhodná veličina s rozdělením t_{n-r-1}. Za odlehlé pak označíme každé pozorování, pro které vyjde $p_i \leq \alpha/n$, což je totéž, jako $|v_i^*| \geq t_{n-r-1}(\alpha/n)$.

Poněkud jemnější Holmovu metodu mnohonásobných srovnání lze nalézt u Havránka (1993) od str. 174. Ještě jemnější postupy obsahuje knihovna `multcomp` v procedurách `simint()` a `simtest()`.

8.3. Vliv jednotlivých pozorování

Připomeňme význam dolního indexu $[-t\bullet]$, který jsme zavedli na str. 173, který označuje odhad získaný z modelu (8.1) bez t-tého pozorování, ať už jej použijeme k jakémukoliv účelu. Symbolem $\hat{\mathbf{Y}}_{[-t\bullet]}$ tedy označíme odhad celého n-členného vektoru $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$.

O vlivu jednotlivých pozorování vypovídají rezidua. Další pohled dostaneme, když porovnáme odhady konstanty $\mathsf{E}\,Y_t$, případně vektoru $\boldsymbol{\beta}$, založené na všech pozorováních s odhady získanými po vyloučení jediného pozorování. Zpravidla se při tom předpokládá, že vyloučení jednoho pozorování nesníží hodnost regresní matice $\mathbf{X}$, tedy že pro příslušné t platí $m_{tt} > 0$.

Nejprve se budeme zabývat citlivostí odhadů na případné vyloučení t-tého pozorování.

8.3.1. Diagonála H

Především připomeňme, že v tomto textu uvažujeme model s absolutním členem, takový, že první sloupec matice $\mathbf{X}$ je tvořen jedničkami. Použijme označení

$$\mathbf{X} = \left(\mathbf{1}, \mathbf{x}_{\bullet 1}, \cdots, \mathbf{x}_{\bullet k}\right).$$

Symbolem $\mathbf{x}_{\bullet j}$ tedy značíme hodnoty j-tého regresoru a symbolem $\bar{x}_j$ označíme průměr tohoto regresoru. Symbolem $\tilde{\mathbf{X}}$ označíme matici s centovanými k sloupci

$$\tilde{\mathbf{X}} = (\mathbf{x}_{\bullet 1} - \bar{x}_1\mathbf{1}, \mathbf{x}_{\bullet 2} - \bar{x}_2\mathbf{1}, \cdots, \mathbf{x}_{\bullet k} - \bar{x}_k\mathbf{1}).$$

Platí zřejmě $\mathcal{M}(\mathbf{X}) = \mathcal{M}((\mathbf{1}, \tilde{\mathbf{X}}))$, takže projekční matici $\mathbf{H}$ lze zapsat také ve tvaru

$$\mathbf{H} = (\mathbf{1}, \tilde{\mathbf{X}}) \begin{pmatrix} n & \mathbf{0}' \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{X}}'\tilde{\mathbf{X}} \end{pmatrix}^{-} (\mathbf{1}, \tilde{\mathbf{X}})' = \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}' + \tilde{\mathbf{X}}(\tilde{\mathbf{X}}'\tilde{\mathbf{X}})^{-}\tilde{\mathbf{X}}'.$$

Je tedy

$$h_{tt} = \frac{1}{n} + (x_{t1} - \bar{x}_1, \ldots, x_{tk} - \bar{x}_k)(\tilde{\mathbf{X}}'\tilde{\mathbf{X}})^{-}(x_{t1} - \bar{x}_1, \ldots, x_{tk} - \bar{x}_k)',$$

takže t-tý diagonální prvek matice $\mathbf{H}$ můžeme interpretovat jako o číslo $1/n$ zvětšenou zobecněnou vzdálenost t-tého řádku matice $\mathbf{X}$ od těžiště všech jejích řádků. Samotná hodnota h_{tt} je v počítačových výstupech uváděna pod označením *leverage*. Pozorování s velkou hodnotou h_{tt} mohou značně ovlivnit odhad parametru $\boldsymbol{\beta}$, zpravidla se za mezní hodnotu považuje hodnota $2r/n$. (Je hodnota h_{tt} dána jednoznačně?)

Pro regresní přímku (viz (4.3)) platí

$$h_{tt} = \frac{1}{n} + \frac{(x_t - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}.$$

Nejvíce tedy ovlivňují odhad parametrů regresní přímky ta pozorování, jejichž nezávisle proměnná je nejdále od průměru této proměnné.

8.3.2. DFBETAS

Abychom mohli porovnávat dva odhady vektoru $\boldsymbol{\beta}$, musíme zajistit jeho odhadnutelnost. Proto zde předpokládáme úplnou hodnost matice $\mathbf{X}$. Podle (8.9) z věty 8.2 platí (použijeme opět označení $\mathbf{V} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$)

$$\mathbf{b} - \mathbf{b}_{[-t\bullet]} = \frac{u_t}{m_{tt}}\mathbf{V}\mathbf{x}_{t\bullet}. \tag{8.18}$$

Tyto rozdíly ukazují změny v odhadech jednotlivých regresních koeficientů způsobené vynecháním t-tého pozorování. Častěji se uvedené rozdíly škálují tak, že jsou vyděleny odhadem střední chyby příslušné složky vektoru $\mathbf{b}$, takže j-tá složka škálovaného rozdílu je rovna

$$\triangle_t(\beta_j) = \frac{b_j - b_{j[-t\bullet]}}{S_{[-t\bullet]}\sqrt{v_{jj}}}. \tag{8.19}$$

Uvedené rozdíly bývají označovány jako $DFBETAS$. Neškálovanou verzi rozdílu uvedenou v (8.18) bychom pak označili jako $DFBETA$.

8.3.3. DFFITS

Podobně se můžeme zajímat o odhad parametrické funkce $\mu_t = (\mathbf{x}_{t\bullet})'\boldsymbol{\beta}$, která je vždy odhadnutelná. Předpoklad $m_{tt} > 0$ zajistí, že je odhadnutelná i po vynechání t-tého pozorování. Proto bez ohledu na hodnost matice $\mathbf{X}$ platí

$$\begin{aligned}\hat{Y}_{t[-t\bullet]} &= (\mathbf{x}_{t\bullet})'\mathbf{b}_{[-t\bullet]} = \hat{Y} - (\mathbf{x}_{t\bullet})'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{x}_{t\bullet}\frac{u_t}{m_{tt}} \\ &= \hat{Y}_t - \frac{h_{tt}}{m_{tt}}u_t\end{aligned}$$

Rozdíl odhadů střední hodnoty $\mathsf{E}\,Y_i$ lze tedy vyjádřit jako

$$\hat{Y}_t - \hat{Y}_{t[-t\bullet]} = \frac{h_{tt}}{m_{tt}}u_t. \tag{8.20}$$

Uvedený rozdíl bývá někdy označen jako $DFFIT$. Podobně jako u rozdílu odhadů regresních koeficientů provedeme škálování, přičemž použijeme $\mathsf{var}\,\hat{Y}_t = \sigma^2 m_{tt}$. Postupnými úpravami dojdeme k vyjádření pomocí studentizovaného rezidua

$$\begin{aligned}\triangle_t(\mathsf{E}\,Y_t) &= \frac{\hat{Y}_t - \hat{Y}_{t[-t\bullet]}}{\sqrt{\mathsf{var}\,\hat{Y}_t}} = \frac{h_{tt}}{m_{tt}}\frac{u_t}{S_{[-t\bullet]}\sqrt{h_{tt}}} = \sqrt{\frac{h_{tt}}{m_{tt}}}\frac{u_t}{S_{[-t\bullet]}\sqrt{m_{tt}}} \\ &= \sqrt{\frac{h_{tt}}{m_{tt}}}v_t^*\end{aligned} \tag{8.21}$$

Pro tuto statistiku se používá označení $DFFITS$.

8.3.4. Cookova vzdálenost

Pokusme se vyjádřit vliv t-tého pozorování na odhad celé střední hodnoty $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ pomocí jediného čísla tak, že zjistíme čtverec délky rozdílu obou odhadů:

$$\begin{aligned}||\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_{[-t\bullet]}||^2 &= ||\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{X}\mathbf{b}_{[-t\bullet]}||^2 \;=\; ||\mathbf{X}(\mathbf{b} - \mathbf{b}_{[-t\bullet]})||^2 \\ &= (\mathbf{b} - \mathbf{b}_{[-t\bullet]})'\mathbf{X}'\mathbf{X}(\mathbf{b} - \mathbf{b}_{[-t\bullet]}) \\ &= \left(\frac{u_t}{m_{tt}}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{x}'_{t\bullet}\right)' \mathbf{X}'\mathbf{X} \left(\frac{u_t}{m_{tt}}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{x}'_{t\bullet}\right) \\ &= \frac{u_t^2}{m_{tt}^2} h_{tt}.\end{aligned}$$

Drobnou modifikací (např. abychom dostali bezrozměrnou charakteristiku) dostaneme odtud *Cookovu vzdálenost*

$$D_t = \frac{1}{rS^2}||\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}_{[-t\bullet]}||^2 = v_t^2 \frac{h_{tt}}{m_{tt}} \frac{1}{r}. \tag{8.22}$$

Cookova vzdálenost je tedy součinem tří členů. První z nich ukazuje nakolik se střední hodnota závisle proměnné Y_t odlišuje od střední hodnoty dané modelem. Druhý člen je monotonní funkcí h_{tt}, kterážto hodnota ukazuje, jak daleko je řádek $\mathbf{x}_{t\bullet}$ od těžiště všech řádků matice $\mathbf{X}$. Tato charakteristika je podobná (až na dělení hodností matice $\mathbf{X}$) čtverci statistiky $\triangle_t(\mathsf{E}\,Y_t)$, jen je použito normované reziduum v_t na místo rezidua studentizovaného v_t^*.

8.3.5. COVRATIO

Nyní budeme hodnotit vliv vynechání t-tého pozorování na přesnost odhadů regresních koeficientů. Budeme tedy opět předpokládat model s úplnou hodností. Abychom místo odhadu varianční matice dostali jednorozměrnou charakteristiku, použijeme determinant tohoto odhadu. Statistika $COVRATIO$ je dána podílem těchto determinantů, přičemž v čitateli se determinant odkazuje na odhady s vynecháním t-tého pozorování.

Dříve než uvedeme vzorec, pomocí často používané identity pro determinanty (viz např. (Anděl, 1978, Věta IV. 4), (Anděl, 2005, Věta A. 4)) najdeme vztah mezi determinanty dvou souvisejících matic:

$$\begin{aligned}\begin{vmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{x}_{t\bullet} \\ (\mathbf{x}_{t\bullet})' & 1 \end{vmatrix} &= \left|\mathbf{X}'\mathbf{X}\right| \left(1 - (\mathbf{x}_{t\bullet})'(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{x}_{t\bullet}\right) = |\mathbf{X}'\mathbf{X}| m_{tt} \\ &= 1 \cdot \left|\mathbf{X}'\mathbf{X} - \mathbf{x}_{t\bullet}(\mathbf{x}_{t\bullet})'\right| = |(\mathbf{X}_{-t\bullet})'\mathbf{X}_{-t\bullet}|.\end{aligned}$$

Hledaný podíl je tedy

$$\begin{aligned}\frac{|\widehat{\mathsf{var}}\,\mathbf{b}_{[-t\bullet]}|}{|\widehat{\mathsf{var}}\,\mathbf{b}|} &= \left(\frac{S^2_{(t\bullet)}}{S^2}\right)^{k+1} \frac{|\mathbf{X}'\mathbf{X}|}{|(\mathbf{X}_{-t\bullet})'\mathbf{X}_{-t\bullet}|} \\ &= \left(\frac{S^2_{[-t\bullet]}}{S^2}\right)^{k+1} \frac{1}{m_{tt}}, \\ &= \frac{1}{m_{tt}}\left(\frac{n-k-1-v_t^2}{n-k-2}\right)^{k+1}.\end{aligned} \tag{8.23}$$

Přesnost odhadu regresních koeficientů se tedy po vynechání t-tého pozorování zlepší například tehdy, když je jeho studentizované reziduum příliš velké (daleko od nuly).

8.4. Nabídka prostředí R

V prostředí R je k disposici zejména funkce `influence.measures()`, kterou lze použít na objekt třídy `lm`. Výsledkem je objekt třídy `infl`, který je složen ze tří prvků: `infmat`, `is.inf`, `call`.

V matici nazvané `infmat` jsou soustředěny hlavní diagnostické statistiky. Každý řádek odpovídá jednomu pozorování, tedy jednomu řádku matice $(\mathbf{Y}, \mathbf{X})$. Prvních $k+1$ sloupců tvoří matici statistik $DFBETAS$, jejíž (t,j)-tý prvek je dán vztahem (8.19). Tyto sloupce jsou nazvány `dfb.`, kde za tečkou následuje (někdy přiměřeně zkrácený) název příslušného regresoru. Následuje sloupec statistik $DFFITS$ označený `dffit`. Další sloupce, nazvané `cov.r`, `cook.d`, `hat` obsahují odpovídající statistiky $COVRATIO$, D_t a h_{tt}.

Matice `is.inf` má stejný rozměr jako `infmat`. Jednotlivé prvky odpovídají prvkům matice `infmat`, jsou `TRUE`, pokud příslušný prvek ukazuje na problém, tj. pokud překračuje (mnohdy velmi arbitrárně) zvolenou mez. Je to tehdy, když

$$|\triangle_t(\beta_j)| > 1, \tag{8.24}$$

$$|\triangle_t(\mathsf{E}\,Y_t)| > 3\sqrt{\frac{k+1}{n-k-1}}, \tag{8.25}$$

$$|1 - COVRATIO| > 3\frac{k+1}{n-k-1}, \tag{8.26}$$

$$F_{k+1,n-k-1}(D_t) > 0{,}5, \qquad (F \text{ je distr. funkce } F \text{ rozdělení}) \tag{8.27}$$

$$h_{tt} > 3\frac{k+1}{n}. \tag{8.28}$$

V případě statistik, které lze spočítat, i když nemá regresní matice lineárně nezávislé sloupce ($DFFITS$, h_{tt}) je hodnota $k+1$ nahrazena hodností regresní matice.

Pokud tiskneme matici `infmat` funkcí `print()`, nejprve se připomene tvar vyšetřované závislosti uložený v `call`. Pak se tiskne matice `infmat`, přičemž na konec každého řádku je doplněna buď hvězdička nebo mezera podle toho, zda je v daném řádku matice `is.inf` aspoň jednou `TRUE` či nikoliv. Výstup pomocí `summary` obsahuje pouze ty řádky, které v bohatším výstupu pomocí `print` obsahují hvězdičku. Hvězdičky jsou tentokrát umístěny u příslušné statistiky.

Normovaná rezidua lze v R spočítat, když se na objekt třídy `lm` použije funkce `rstandard`. Podobně lze spočítat vektor studentizovaných reziduí pomocí funkce `rstudent`, a další statistiky pomocí funkcí `dffits`, `dfbetas`, `covratio`, `cooks.distance`, které se všechny používají na objekt třídy `lm`. Podobně lze spočítat diagonální prvky regresní matice pomocí funkce `hatvalues`, jejímž argumentem je objekt třídy `lm`, resp. pomocí funkce `hat`, jejímž argumentem je regresní matice. Tu můžeme získat funkcí `model.matrix` uplatněnou na objekt třídy `lm`.

Příklad 8.1 (procento tuku) Vyšetřuje se závislost procenta tuku u mladých mužů v závislosti na jejich výšce a hmotnosti.

```
> summary(f.hw<-lm(fat~height+weight))

Call:
lm(formula = fat ~ height + weight)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-6.40111 -2.94819 -0.02106  2.30723  7.29683

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 16.55309   15.24621   1.086   0.2831
height      -0.24362    0.09728  -2.504   0.0158 *
weight       0.50418    0.05095   9.896 4.49e-13 ***
---
Residual standard error: 3.731 on 47 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.714,      Adjusted R-squared: 0.7018
F-statistic: 58.66 on 2 and 47 degrees of freedom,   p-value: 1.681e-013

> anova(f.hw)
Analysis of Variance Table

Response: fat
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
height     1  270.06  270.06  19.398 6.096e-05 ***
weight     1 1363.26 1363.26  97.922 4.490e-13 ***
Residuals 47  654.33   13.92
---
```

```
> summary(f.hw.infl<-influence.measures(f.hw))
Potentially influential observations of
         lm(formula = fat ~ height + weight) :

  dfb.1_ dfb.hght dfb.wght dffit   cov.r   cook.d hat
2 -0.43   0.60    -0.98    -1.02_*  1.30_*  0.34   0.30_*
4  0.01  -0.01     0.01    -0.01    1.22_*  0.00   0.12
6 -0.60   0.52     0.10     0.79_*  0.98    0.20   0.14
```

○

8.5. Nekorelovaná rezidua

Dvě až dosud uvedené modifikace reziduí odstraňují jeden z problémů klasických reziduí, totiž jejich nestejné rozptyly. Nemohou však odstranit další nedostatek reziduí v porovnání s chybovým členem $\mathbf{e}$, totiž jejich vzájemnou závislost. Vektor reziduí $\mathbf{u}$ leží v podprostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$, jehož dimenze je nutně menší, než počet jeho složek n. Budeme-li tedy hledat skutečně nekorelovaná (v normálním modelu nezávislá) rezidua, musíme zmenšit jejich počet.

Klasická rezidua můžeme pomocí jakékoliv matice $\mathbf{N}$, jejíž sloupce tvoří ortonormální bázi prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$ (tj. která splňuje $\mathbf{N}'\mathbf{N} = \mathbf{I}, \mathbf{N}\mathbf{N}' = \mathbf{M}$), psát v tvaru

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}(\mathbf{N}'\mathbf{Y}) = \mathbf{N}\mathbf{n}.$$

Složky vektoru $\mathbf{n}$ nazveme *nekorelovaná rezidua*. Jsou to tedy koeficienty jednoznačně určeného vektoru $\mathbf{u}$ vyjádřeného v některé z nekonečně mnoha ortonormálních bází prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$. Snadno zjistíme, že $\mathbf{n}$ má mnohorozměrné normální rozdělení:

$$\mathbf{n} \sim \mathsf{N}\big(\mathbf{N}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{N}'\mathbf{N}\big) = \mathsf{N}\big(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}_{n-r}\big).$$

V normální lineárním modelu jsou tedy složky vektoru $\mathbf{n}$ nezávislé, mají nulové střední hodnoty a stejné rozptyly σ^2.

Volbou různých bází prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})^\perp$ dostaneme různá nekorelovaná rezidua. Zajímavou interpretaci mají *rekurzivní rezidua*. Tato rezidua závisí na pořadí řádků matice $\mathbf{X}$, tedy zpravidla na pořadí, v jakém data získáváme.

Vyjdeme z prvního řádku matice $\mathbf{X}$ a postupně budeme přidávat jednotlivé řádky. V každém kroku, kdy se *nezvýší* hodnost postupně rozšiřované matice, spočítáme rozdíl mezi nově přidanou hodnotou Y_t a predikcí její střední hodnoty spočítanou pomocí všech již dřív zavedených pozorování (s menšími indexy). Tento rozdíl ještě normujeme tak, aby vzniklá statistika měla rozptyl rovný σ^2. Předpokládejme, že jsme takto do modelu zavedli prvních t řádků matice $(\mathbf{Y}, \mathbf{X})$, označme je jako

$(\mathbf{Y}_t, \mathbf{X}_t)$ a že při zavedení dalšího pozorování $(Y_{t+1}, (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})')$ se hodnost matice regresorů nezvýší. Tuto hodnost označíme jako r_t (tj. platí $\mathsf{h}(\mathbf{X}_t) = \mathsf{h}(\mathbf{X}_{t+1}) = r_t$). Řešení normální rovnice, která používá prvních t pozorování označme jako $\mathbf{b}_t$. Potom bude

$$n_{t-r_t+1} = \frac{Y_{t+1} - (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'\mathbf{b}_t}{\sqrt{1 + (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{x}_{t+1,\bullet}}}. \tag{8.29}$$

Střední hodnota $\mathsf{E}\, Y_{t+1} = (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'\mathbf{b}_t$ je odhadnutelným parametrem podle věty 2.4, neboť jsme předpokládali, že přidáním $(t+1)$. řádku hodnost matice regresorů nevzrostla. Výraz v čitateli i ve jmenovateli (8.29) je proto jednoznačný pro každé řešení normální rovnice.

Podle (8.29) dostaneme postupně statistiky $n_1, \ldots, n_{n-r}$, které mají důležitou vlastnost. Každá z nich je nekorelovaná se všemi statistikami s nižším indexem. Pro $j = 1, \ldots, t$ totiž platí

$$\begin{aligned}
&\mathsf{cov}(Y_{t+1} - (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'\mathbf{b}_t, Y_{t+1-j} - (\mathbf{x}_{t+1-j,\bullet})'\mathbf{b}_{t-j}) \\
&= \mathsf{cov}(Y_{t+1} - (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{X}_t'\mathbf{Y}_t, \\
&\qquad Y_{t+1-j} - (\mathbf{x}_{t+1-j,\bullet})'(\mathbf{X}_{t-j}'\mathbf{X}_{t-j})^-\mathbf{X}_{t-j}'\mathbf{Y}_{t-j}) \\
&= \sigma^2\Big(0 - 0 - (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{X}_t'\mathbf{j}_{t+1-j} \\
&\qquad + (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{X}_t'\begin{pmatrix}\mathbf{I}_{t-j}\\ \mathbf{O}_{t\times j}\end{pmatrix}\mathbf{X}_{t-j}(\mathbf{X}_{t-j}'\mathbf{X}_{t-j})^-\mathbf{x}_{t+1-j,\bullet}\Big) \\
&= \sigma^2\Big(-(\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{x}_{t+1-j,\bullet} \\
&\qquad + (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{X}_{t-j}'\mathbf{X}_{t-j}(\mathbf{X}_{t-j}'\mathbf{X}_{t-j})^-\mathbf{x}_{t+1-j,\bullet}\Big) \\
&= \sigma^2\Big(-(\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{x}_{t+1-j,\bullet} + (\mathbf{x}_{t+1,\bullet})'(\mathbf{X}_t'\mathbf{X}_t)^-\mathbf{x}_{t+1-j,\bullet}\Big) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Rekurzivní rezidua mají interpretaci, pokud má smysl uspořádání řádků matice $(\mathbf{Y}, \mathbf{X})$. Ukazují, nakolik další pozorování odpovídá modelu obsahujícímu všechna předchozí pozorování. Proto se používají tam, kde se zajímáme o stabilitu závislosti.

8.6. Parciální rezidua

Také parciální rezidua budeme používat tam, kde se budeme zajímat o správnost zvoleného modelu. Tentokrát půjde o vhodnost zařazení toho kterého regresoru.

Zvolme pevně index j sloupce matice $\mathbf{X}$ takový, že platí $\mathsf{h}(\mathbf{X}_{\bullet -j}) = r - 1$. V takovém případě je parametr β_j odhadnutelný, neboť pseudoinvertovanou maticí

v (7.6) je zřejmě nenulové číslo (použili jsme $\mathbf{X}_{\bullet -j}$ místo $\mathbf{X}$ a $\mathbf{x}_{\bullet j}$ místo $\mathbf{Z}$, takže na místě $\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}$ máme $||\mathbf{M}_{[\bullet -j]}\mathbf{x}_{\bullet j}||^2$, což vzhledem k požadavku na vztah hodností je nutně kladné číslo). Zaveďme vektor *parciálních reziduí* $\mathbf{u}^{[\bullet -j]}$ se složkami

$$u_i^{[\bullet -j]} = u_i + x_{ij} b_j. \tag{8.30}$$

Protože lze psát

$$u_i^{[\bullet -j]} = Y_i - \sum_{\nu \neq j} x_{i\nu} b_\nu,$$

lze vektor $\mathbf{u}^{[\bullet -j]}$ interpretovat jako tu složku vektoru hodnot závisle proměnné, kterou se nepodařilo vysvětlit pomocí ostatních regresorů, tedy jako tu složku, jejíž vysvětlení zbylo na j-tý regresor $\mathbf{x}_{\bullet j}$.

Parciální rezidua jsou užitečná především při grafickém vyjádření, v němž se znázorňují body o souřadnicích $[x_{ij}, u_i^{[\bullet -j]}]$. Těmito body se prokládá běžná regresní přímka. Užitečné je zjištění, že směrnice této přímky je rovna právě odhadu b_j parametru β_j. Platí totiž

$$\begin{aligned} ||\mathbf{u}^{[\bullet -j]} - \mathbf{x}_{\bullet j}\beta||^2 &= ||(\mathbf{Y} - \mathbf{X}_{\bullet -j}\mathbf{b}_{-j}) - \mathbf{x}_{\bullet j}\beta||^2 \\ &\geq ||\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{b}||^2. \end{aligned}$$

Jen je třeba opatrně interpretovat těsnost rozmístění bodů kolem přímky, neboť grafické znázornění odpovídá formálně modelu $\mathbf{u}^{[\bullet -j]} \sim (\mathbf{x}_{\bullet j}\beta, \sigma^2\mathbf{I})$, v němž má odhad pro β obecně menší rozptyl, než je skutečný rozptyl odhadu b_j v původním modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$.

Některé programy při grafickém znázornění používají vektor

$$\mathbf{u}^{[\bullet -j]} + (\bar{Y} - b_j\bar{x}_j)\mathbf{1} \tag{8.31}$$

místo $\mathbf{u}^{[\bullet -j]}$, což má smysl, jen když je $\mathbf{1} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$. Graf potom opravdu připomíná „očištěnou závislost“ Y na j-tém regresoru, neboť průměr souřadnic na svislé ose je roven $\bar{Y}$.

V prostředí R (základní knihovna `stats`) dostaneme u lineárního modelu `a` matici jisté modifikace parciálních reziduí příkazem `residuals(a,type="partial")`. Od definice (8.30) se liší tím, že mají vždy nulový průměr, čehož se dosáhne tím, že se odečte $b_j\mathbf{x}_{\bullet j}$. Parciální rezidua podle (8.31) dostaneme, když ke všem prvkům uvedené matice přičteme průměr hodnot závisle proměnné, například pomocí příkazového řádku

```
> pr <- residuals(a,type="partial"); pr[,] + attr(pr,"constant")
```

Knihovna `car` obsahuje parciální rezidua jako funkci `cr.plot()` resp. funkce ji využívající. Název je odvozen od alternativního pojmenování component + residual plot. Vylepšení grafu parciálních reziduí dá funkce `ceres.plot()`. V tomto grafu je kromě přímky znázorněn také jistý neparametrický odhad tvaru parciální závislosti $\mathsf{E}\,Y$ na zvoleném regresoru. Postup navrhl Cook (1993), označení je zkratkou za Combining conditional Expectations RESiduals.

8.7. Grafy reziduí

Rezidua poskytují řadu možností, jak diagnostikovat porušení toho kterého z předpokladů, na nichž je lineární model založen.

Při diagnostice *nesprávného tvaru závislosti* jsou užitečné diagramy znázorňující body $[\hat{Y}_i, Y_i]$, $[\hat{Y}_i, u_i]$, $[x_{ij}, u_i]$ pro nezávisle proměnné, které jsou v matici $\mathbf{X}$ nebo body $[z_{ij}, u_i]$ pro potenciální nezávisle proměnné, které v matici $\mathbf{X}$ zahrnuty nejsou. Velmi používaná jsou také parciální rezidua $\mathbf{u}^{[\bullet - j]}$ pro jednotlivé nezávisle proměnné z matice $\mathbf{X}$ resp. prve zmíněný `ceres.plot()`. Podobný význam jako diagram parciálních reziduí má diagram tzv. parciální regrese, v němž znázorní body, jejichž první souřadnice je dána reziduem závislosti zvoleného regresoru na všech ostatních regresorech, kdežto druhá souřadnice je rovna reziduu vyvětlované proměnné na všech regresorech s výjimkou onoho zvoleného.

Při diagnostice *nekonstantního rozptylu* jsou užitečné diagramy pro $[\hat{Y}_i, u_i]$, $[\hat{Y}_i, u_i^2]$ nebo pro $[x_{ij}, u_i]$ resp. $[x_{ij}, u_i^2]$ pro v regresní matici $\mathbf{X}$ uplatněné či $[z_{ij}, u_i]$ resp. $[z_{ij}, u_i^2]$ pro neuplatněné nezávisle proměnné.

Při diagnostice *nenormálního rozdělení* chybového členu se používá zejména *normální diagram*, který znázorňuje $[g_i, u_{(i)}]$, případně $[u_{(i)}, g_i]$. Při tom je $g_i = \mathsf{E}\, Z_{(i)}$, kde $Z_1, \ldots, Z_n$ je náhodný výběr z rozdělení $\mathsf{N}(0, 1)$. Závorky u indexů tentokrát klasicky odkazují na to, že rezidua jsou uspořádaná.

Hodnocení je založeno na představě, že kdyby byl $U_1, \ldots, U_n$ náhodný výběr z rozdělení $\mathsf{N}(\mu, \sigma^2)$, platilo by $\mathsf{E}\, U_{(i)} = \mu + \sigma g_i$. To znamená, že body $[g_i, U_{(i)}]$ by měly náhodně kolísat kolem přímky $y = \mu + \sigma x$. Pokud body $[g_i, U_{(i)}]$ naznačují konkávní závislost, je to známka záporné šikmosti rozdělení náhodné veličiny U (tedy její nenormality). Konvexní průběh je známkou kladné šikmosti. Naproti tomu esovitý průběh naznačuje špičatost jinou, než předpokládáme u normálního rozdělení. Menší, než průměrný růst v okrajových částech naznačuje špičatost spíš menší, kdežto větší růst v okrajových částech naznačuje spíš větší špičatost.

Uvedený postup se používá pro rezidua $u_1, \ldots, u_n$ přesto, že ta nejsou nezávislá a obecně nemají stejný rozptyl. Upozorňuji na to, že některé programy (například STATISTICA) zaměňují pořadí obou os. Potom musíme odpovídajícím způsobem upravit také interpretaci normálního diagramu.

9. Testy

Na rozdíl od poslední části předchozí kapitoly se budeme zabývat možnostmi ověřovat splnění předpokladů lineární regrese statistickými testy, nikoliv jen možností jejich nesplnění dodatečně diagnostikovat.

9.1. Tvar závislosti

9.1.1. Opakovaná pozorování

Podstatným (a často nesplnitelným) požadavkem pro řadu testů je to, že pro stejnou hodnotu všech nezávisle proměnných máme několik pozorování. Tomu také přizpůsobíme označení. Mějme tedy n *nezávislých* náhodných veličin, které splňují

$$Y_{ij} = \mu_i + e_{ij}, \qquad 1 \le j \le n_i, \quad 1 \le i \le I, \tag{9.1}$$

kde e_{ij} jsou nezávislé náhodné veličiny s rozdělením $\mathsf{N}\big(0, \sigma^2\big)$. Jde vlastně o model analýzy rozptylu jednoduchého třídění. Jak víme, reziduální součet čtverců je v tomto modelu roven

$$RSS = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet})^2 \tag{9.2}$$

a má celkem $f = n - I$ stupňů volnosti.

Pro testování zvoleného tvaru závislosti uvedeme zobecnění postupu, který je uveden v IX. kapitole knihy prof. Anděla (1978) nebo v odst. 10. 8 knihy Anděl (2005). Předpokládaný tvar závislosti udává podmodel

$$Y_{ij} = \sum_{\ell=1}^{L} g_\ell(\mathbf{t}_i)\gamma_\ell + e_{ij} = (\mathbf{g}(\mathbf{t}_i))'\boldsymbol{\gamma} + e_{ij}, \qquad 1 \le j \le n_i, \quad 1 \le i \le I. \tag{9.3}$$

Přitom $g_\ell(\mathbf{t})$ jsou pro $\ell = 1, \dots L$, $L < I$, známé funkce, jejichž argumentem je vektor nezávisle proměnných. Funkční hodnoty lze nazývat pro odlišení jako *regresory.*

Několik regresorů (např. mocnin) lze získat z jediné nezávisle proměnné. Maticový zápis podmodelu má tvar

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{Y}_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}(\mathbf{g}(\mathbf{t}_1))' \\ \vdots \\ \mathbf{1}(\mathbf{g}(\mathbf{t}_I))' \end{pmatrix} \boldsymbol{\gamma} + \mathbf{e}.$$

Je zřejmé, že sloupce regresní matice podmodelu jsou lineární kombinací sloupců matice modelu, koeficienty příslušných lineárních kombinací tvoří hodnoty $g_\ell(\mathbf{t}_i)$. Předpokládejme, že matice

$$\begin{pmatrix} \mathbf{g}(\mathbf{t}_1)' \\ \vdots \\ \mathbf{g}(\mathbf{t}_I)' \end{pmatrix}$$

má lineárně nezávislé sloupce, tedy hodnost L. Stejnou hodnost má také regresní matice podmodelu. Test podmodelu je podle (3.10) založen na statistice

$$F = \frac{(RSS_0 - RSS)/(I - L)}{RSS/(n - I)}, \tag{9.4}$$

kde RSS_0 je reziduální součet čtverců v podmodelu.

Uvedený postup je velmi účinný, ale hrozí nebezpečí nesprávného použití v případě, že pozorování pro pevné $\mathbf{t}_i$ (pevné i) nejsou nezávislá. Potom snadno dá použitý model velmi podhodnocený odhad rozptylu σ^2 a tudíž nadhodnocenou hodnotu statistiky F.

Příklad 9.1 (brzdná dráha) Zajímáme se o brzdnou dráhu 63 automobilů v závislosti na výchozí rychlosti. K disposici je celkem $n = 63$ měření, přičemž pro většinu z $I = 29$ různých výchozích rychlostí máme k disposici více než jedno pozorování. (Ezekiel, Fox (1959))

Pro model lineární závislosti veličiny `draha/rychlost` na veličině `rychlost` provedeme test dobré shody podle (9.4):

```
> anova(a.ANOVA1<-lm(draha/rychlost~factor(rychlost)))
Analysis of Variance Table

Response: draha/rychlost
                Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
factor(rychlost) 28 25.7720  0.9204  4.0678 7.096e-05 ***
Residuals        34  7.6932  0.2263
---
> anova(a.kvadrat<-lm(draha/rychlost~rychlost))
Analysis of Variance Table

Response: draha/rychlost
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
rychlost   1 21.1640 21.1640  104.95 6.994e-15 ***
```

```
Residuals 61 12.3012  0.2017
---
> anova(a.kvadrat,a.ANOVA1)
Analysis of Variance Table

Model 1: draha/rychlost ~ rychlost
Model 2: draha/rychlost ~ factor(rychlost)
  Res.Df Res.Sum Sq Df  Sum Sq F value Pr(>F)
1     61    12.3012
2     34     7.6932 27  4.6080  0.7543 0.7728
>
```

Výsledná testová statistika $F = 0{,}7543$ s dosaženou hladinou $p = 0{,}7728$ nikterak nesvědčí proti předpokládané závislosti. ◯

9.1.2. Testy o parametru

Typickou situací je model

$$Y_i = (\mathbf{x}_{i\bullet})'\boldsymbol{\beta} + \gamma g(\mathbf{x}_{i\bullet}) + e_i, \tag{9.5}$$

kde $g(\mathbf{x})$ je nějaká známá funkce. Testujeme pak nulovou hypotézu $\gamma = 0$. Nejčastěji je $g(\mathbf{x})$ funkcí jediné složky vektoru $\mathbf{x}$. Pokud funkci $g(\mathbf{x})$ neznáme, volíme nějakou aproximaci, například polynom. Tento postup je účinný zvláště tehdy, když je skutečná funkce $g(\mathbf{x})$ konvexní nebo konkávní funkcí pouze skalárního x.

Příklad 9.2 (kořeny) Vraťme se k příkladu o závislosti hmotnosti kořenové části rostliny na obsahu cukru v živném roztoku. Tentokrát se zajímáme o závislost na podílu cukru v živném roztoku (vyjádřeném v procentech). Porovnáme závislost kvadratickou a lineární.

```
> summary(a<-lm(hmotnost~procento+I(procento**2)))

Call:
lm(formula = hmotnost ~ procento + I(procento^2))

Residuals:
       Min         1Q     Median         3Q        Max
-0.1410511 -0.0352009 -0.0006059  0.0508703  0.1219806

Coefficients:
               Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)    0.218106   0.015640  13.945  < 2e-16 ***
procento       0.111677   0.012900   8.657 1.38e-11 ***
I(procento^2) -0.018610   0.002119  -8.784 8.85e-12 ***
---
```

```
Residual standard error: 0.06197 on 51 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.6044,     Adjusted R-squared: 0.5889
F-statistic: 38.97 on 2 and 51 degrees of freedom,   p-value: 5.355e-011
```

Závěr je nepochybný, bez kvadratického členu (nebo jiného konkávního) se neobejdeme. ○

9.1.3. Použití rekurzivních reziduí

Harvey a Collier (1977) navrhli použít rekurzivní rezidua k ověřování linearity závislosti na zvolené nezávisle proměnné proti alternativě, že je tato závislost konvexní či konkávní, tento test nazvali *ψ-test*.

Předem je třeba pozorování uspořádat tak, zmíněná nezávisle proměnná, řekněme j-tá, splňovala požadavek $x_{1j} < x_{2j} < \ldots < x_{nj}$. Pokud je skutečná závislost na j-té nezávisle proměnné například konvexní, pak lze očekávat, že rekurzivní rezidua budou spíše kladná. Testová statistika tedy spočívá v testování nulové hypotézy, že střední hodnota rekurzivních reziduí je nulová.

V knihovně `lmtest` prostředí R je tento test uveden jako funkce `harvtest()`.

9.1.4. Durbinův-Watsonův test

Durbinův-Watsonův (viz oddíl 9.4) test je původně určen k testování hypotézy o nezávislosti jednotlivých pozorování. Testová statistika je citlivá při testování nulové hypotézy $\mathsf{H}_0 : \gamma = 0$ v modelu (9.5), když je funkce $g(\mathbf{x})$ konvexní nebo konkávní funkcí některé složky $\mathbf{x}$. K smysluplnému použití je však třeba, aby funkční hodnoty x_i byly monotonní vůči pořadí pozorování i.

V knihovně `lmtest` prostředí R je tento test uveden jako funkce `dwtest()`.

9.1.5. Chowův test

Následující postup (viz například (Anděl, 1998, kap. 12.5)) lze použít v mnoha variantách, vždy jde o efektivní použití umělých proměnných.

Základní myšlenkou testu je ověřit stabilitu parametru $\boldsymbol{\beta}$, jeho případnou závislost na nějaké doprovodné veličině. Data rozdělíme na dvě až tři disjunktní podmnožiny dat. Dělení provedeme tak, aby ve skupině I byly velké hodnoty této doprovodné proměnné, ve skupině II naopak její malé hodnoty. Zbývající skupina III obsahuje pozorování s „prostředními“ hodnotami doprovodné veličiny, může být i prázdná. Odhadneme stejnou regresní závislost ve skupinách I a II. Statistiky vztažené k jednotlivým skupinám označíme příslušným indexem. Pro jednoduchost předpokládejme, že ve skupinách I a II má regresní matice úplnou hodnost rovnou $k + 1$.

Dál pracujeme se skupinami I a II buď jednotlivě (model) nebo spojenými (podmodel). Reziduální součet čtverců v modelu bude $RSS = RSS_I + RSS_{II}$. Použijeme-li data z obou skupin dohromady a odhadneme parametry, dostaneme výsledný reziduální součet čtverců v podmodelu RSS_0. Testujeme tak nulovou hypotézu, že parametry v obou částech dat jsou totožné.

Rozhodujeme pomocí statistiky

$$F = \frac{RSS_0 - (RSS_I + RSS_{II})}{RSS_I + RSS_{II}} \frac{n_I + n_{II} - 2k - 2}{k+1},$$

která má na platnosti nulové hypotézy rozdělení $\mathsf{F}_{k+1,n_I+n_{II}-2k-2}$.

9.2. Rozptyl

V tomto oddílu se budeme zabývat ověřováním předpokladu *homoskedasticity*, tedy předpokladu konstantního rozptylu závisle proměnné. Když uvedený předpoklad není splněn, nastává *heteroskedasticita*.

9.2.1. Opakovaná pozorování

Předpokládejme opět, že platí model (9.1), tentokrát je však $e_{ij} \sim \mathsf{N}(0, \sigma_i^2)$. Znamená to tedy, že připouštíme jakoukoliv regresní funkci s libovolnými parametry. Je třeba rozhodnout o shodě všech rozptylů σ_i^2, tedy o nulové hypotéze $\mathsf{H}_0 : \sigma_1^2 = \ldots = \sigma_k^2 (= \sigma^2)$.

Řada použitelných testů je pomocí simulací porovnána v článku Conover et al. (1981). Uveďme nejprve klasický *Bartlettův test*, který je modifikací testu poměrem věrohodnosti. Označme odhady rozptylu pro jednotlivé střední hodnoty závisle proměnné symbolem

$$S_i^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet})^2.$$

Odhadem společné hodnoty rozptylů σ^2 je reziduální rozptyl v modelu

$$S^2 = \frac{1}{n - I} \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet})^2 = \sum_{i=1}^{I} \frac{n_i - 1}{n - I} S_i^2,$$

což je nepochybně vážený průměr odhadů jednotlivých odhadů s vahami

$(n_i - 1)/(n - I)$. Testová statistika Bartlettova testu má tvar

$$B = \frac{1}{C}\left((n-I)\log S^2 - \sum_{i=1}^{I}(n_i - 1)\log S_i^2\right) \tag{9.6}$$
$$= \frac{n-I}{C}\left(\log S^2 - \sum_{i=1}^{I}\frac{n_i - 1}{n-I}\log S_i^2\right).$$

Je zřejmé, že test je založen na porovnání logaritmu váženého průměru odhadů rozptylu pro jednotlivá i s váženým průměrem logaritmů těchto odhadů. Konstanta C je dána vztahem

$$C = 1 + \frac{1}{3(I-1)}\left(\sum_{i=1}^{I}\frac{1}{n_i - 1} - \frac{1}{n-I}\right),$$

je zpravidla jen nepatrně větší než 1.

Rozdělení statistiky B lze za platnosti nulové hypotézy při dostatečně velkých četnostech aproximovat rozdělením χ^2_{I-1}. Udává se, že tuto vlastnost lze použít, platí-li pro všechna i nerovnost $n_i \geq 7$. Nulovou hypotézu pak zamítáme, je-li $B \geq \chi^2_{I-1}(\alpha)$.

Vážnou nevýhodnou Bartlettova testu je jeho velká citlivost na případné porušení předpokladu o normálním rozdělení. V knihovně `stats` je prostředí R vedle Bartlettova testu (`bartlett.test`) implementován také test Flignerův-Killeenův (`fligner.test`)), který je robustnější vůči porušení předpokladu normality. Postup vychází z uspořádaných hodnot $|Y_{it} - \tilde{Y}_{i\bullet}|$, kde $\tilde{Y}_{i\bullet}$ je medián $Y_{i1}, \ldots, Y_{in_i}$. Takto získáme celkem n veličin, které uspořádáme. Nechť R_{it} je pořadí $|Y_{it} - \tilde{Y}_{i\bullet}|$. Veličiny

$$a_{it} = \Phi^{-1}(1/2 + (R_{it}/2(n+1)))$$

se zpracují podobně, jako samotná pořadí v Kruskalově-Wallisově testu. Použije se tedy statistika

$$Q = \frac{\sum_{i=1}^{I}\left(\sum_{t=1}^{n_i} a_{it}\right)^2 / n_i - n\,(\bar{a})^2}{v_a},$$

kde v_a je výběrový rozptyl hodnot a_{it}. Za platnosti nulové hypotézy (rozptyly jsou shodné) má statistika Q asymptoticky rozdělení χ^2_{I-1}.

Příklad 9.3 (kořeny)

```
> bartlett.test(hmotnost,procentoF)

        Bartlett test for homogeneity of variances

data:  hmotnost and procentoF
Bartlett's K-square = 2.872, df = 3, p-value = 0.4118
```

```
> fligner.test(hmotnost,procentoF)

        Fligner-Killeen test for homogeneity of variances

data:  hmotnost and procentoF
Fligner-Killeen:med chi-square = 2.6522, df = 3, p-value = 0.4484
```

Je patrné, že homoskedasticitu můžeme předpokládat. ◯

9.2.2. Leveneův test

V poslední době je Bartlettův test nahrazován postupem, který navrhl Levene.

Základní myšlenkou je vlastnost normálního rozdělení, kterou pro naše nezávislé náhodné veličiny Y_{ij} s rozdělením $\mathsf{N}(\mu_i, \sigma_i^2)$ můžeme zapsat jako

$$\mathsf{E}\,|Y_{ij} - \mu_i| = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sigma_i.$$

Spočítají se pomocné veličiny $Y_{ij}^* = |Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet}|$ a potom se s nimi provede běžná analýza rozptylu jednoduchého třídění. Nulovou hypotézu, podle které jsou rozptyly σ_i^2 stejné, tedy zamítneme, když klasická F statistika vyjde významná.

Někdy se používá (například NCSS) modifikace, kterou navrhli Brown a Forsythe, místo s Y_{ij}^* s veličinami $Y_{ij}^{**} = |Y_{ij} - \tilde{Y}_{i\bullet}|$, kde $\tilde{Y}_{i\bullet}$ je opět medián veličin $Y_{i1}, \ldots, Y_{in_i}$.

Příklad 9.4 (kořeny) Veličiny `hmotnost.1` a `hmotnost.2` obsahují hodnoty závisle proměnné zmenšené o průměr (medián) zjištěný v dané skupině.

```
> hmotnost.mean <- hmotnost-tapply(hmotnost,Procento,mean)[Procento]
> anova(lm(abs(hmotnost.mean)~Procento))
Analysis of Variance Table

Response: abs(hmotnost.mean)
          Df   Sum Sq  Mean Sq F value Pr(>F)
Procento   3 0.003552 0.001184  0.9306 0.4329
Residuals 50 0.063613 0.001272
> hmotnost.median <- hmotnost-tapply(hmotnost,Procento,median)[Procento]
> anova(lm(abs(hmotnost.median)~Procento))
Analysis of Variance Table

Response: abs(hmotnost.median)
          Df   Sum Sq  Mean Sq F value Pr(>F)
Procento   3 0.003652 0.001217  0.8302 0.4836
Residuals 50 0.073319 0.001466
```

Je zřejmé, že žádná z variant Leveneova testu neukazuje na heteroskedasticitu. ◯

9.2.3. Goldfeldův-Quandtův test

Tento postup je v mnohém podobný Chowovu testu.

Testujeme nulovou hypotézu, podle které je rozptyl Y_{ij} konstantní proti alternativní hypotéze, že rozptyl je monotonní funkcí pořadového indexu. Má-li být monotonní funkcí nějaké doprovodné veličiny, musíme nejprve data příslušným způsobem uspořádat.

Postup je založen na porovnání dvou nezávislých odhadů rozptylu. Nejprve vydělíme asi třetinu pozorování s malými indexy a zde provedeme odhad parametrů stejného lineárního modelu, jako jsme použili pro všechna data. Zejména spočítáme odhad rozptylu S_I^2. Podobně odhadneme rozptyl z poslední třetiny dat, takto získáme odhad S_{II}^2. Za platnosti nulové hypotézy má statistika $F = S_I^2/S_{II}^2$ rozdělení $\mathsf{F}_{n_I-r_I,n_{II}-r_{II}}$.

Goldfeldův-Quandtův test lze považovat za zobecnění klasického F testu shody rozptylů, jen poněkud jinak získáme dva nezávislé odhady rozptylu.

9.2.4. Skórový test

Nejprve popíšeme poměrně obecný model pro nekonstantní rozptyl, v dalších oddílech jej konkretizujeme na důležité speciální případy. Postup je založen na metodě maximální věrohodnosti a to na použití skórů (viz Cook, Weisberg (1983)). Nevyžaduje tedy odhad parametrů vyjadřujících nestejné rozptyly, ale pouze odhady v podmodelu, tedy za předpokadu stejných rozptylů.

Uvažujme model (speciální případ modelu z oddílu 2.8)

$$\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}\big(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1}\big), \tag{9.7}$$

kde $\mathbf{W}$ je diagonální matice s diagonálními prvky w_i, přičemž

$$w_i^{-1} = \omega_i = \omega_i(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\lambda}). \tag{9.8}$$

Připouštíme tedy, že prostřednictvím známých funkcí ω_i může rozptyl záviset na neznámém parametru $\boldsymbol{\beta}$ (který slouží k popisu středních hodnot) a na nějakém dalším parametru $\boldsymbol{\lambda}$. Pro stručnost zápisu budeme v dalším někdy argumenty funkcí ω_i vynechávat. Věrohodnostní funkci modelu (9.7) lze zapsat jako

$$\ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\lambda}) = -\frac{n}{2}\log(2\pi) - \frac{n}{2}\log(\sigma^2) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\log\omega_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{(Y_i - (\mathbf{x}_{i\bullet})'\boldsymbol{\beta})^2}{\sigma^2\omega_i}.$$

Odtud plyne (po úpravě a s označením $e_i = Y_i - (\mathbf{x}_{i\bullet})'\boldsymbol{\beta}$)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}} &= \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\frac{e_i}{\omega_i}\mathbf{x}_{i\bullet} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\left(\frac{e_i}{\sigma\sqrt{\omega_i}}\right)^2 - 1\right)\frac{\partial \log \omega_i}{\partial \boldsymbol{\beta}},\\
\frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} &= \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\left(\left(\frac{e_i}{\sigma\sqrt{\omega_i}}\right)^2 - 1\right),\\
\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\lambda}} &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\left(\frac{e_i}{\sigma\sqrt{\omega_i}}\right)^2 - 1\right)\frac{\partial \log \omega_i}{\partial \boldsymbol{\lambda}}.
\end{aligned}$$

Označíme-li symbolem $\mathbf{D}_\beta$ matici typu $n \times (k+1)$ parciálních derivací $\partial \log \omega_i / \partial \beta_j$ a podobně symbolem $\mathbf{D}_\lambda$ matici parciálních derivací $\partial \log \omega_i / \partial \lambda_j$ a uvážíme-li, že platí $(1 \le i, j \le n)$

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}\, e_i e_j &= \delta_{ij}\sigma^2\omega_i\\
\mathsf{E}\, e_i\left(\left(\frac{e_j}{\sigma\sqrt{\omega_j}}\right)^2 - 1\right) &= 0\\
\mathsf{E}\left(\left(\frac{e_i}{\sigma\sqrt{\omega_i}}\right)^2 - 1\right)\left(\left(\frac{e_j}{\sigma\sqrt{\omega_j}}\right)^2 - 1\right) &= 2\delta_{ij},
\end{aligned}$$

bude výsledná Fisherova informační matice rovna

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\lambda}) &= \mathsf{E}\begin{pmatrix}
\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}}\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}'} & \frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}}\frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} & \frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}}\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\lambda}'}\\
\frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2}\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}'} & \frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2}\frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} & \frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2}\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\lambda}'}\\
\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\lambda}}\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}'} & \frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\lambda}}\frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} & \frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\lambda}}\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\lambda}'}
\end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix}
\frac{1}{\sigma^2}\mathbf{X}'\mathbf{W}\mathbf{X} + \frac{1}{2}\mathbf{D}'_\beta\mathbf{D}_\beta & \frac{1}{2\sigma^2}\mathbf{D}'_\beta\mathbf{1} & \frac{1}{2}\mathbf{D}'_\beta\mathbf{D}_\lambda\\
\frac{1}{2\sigma^2}\mathbf{1}'\mathbf{D}_\beta & \frac{n}{2\sigma^4} & \frac{1}{2\sigma^2}\mathbf{1}'\mathbf{D}_\lambda\\
\frac{1}{2}\mathbf{D}'_\lambda\mathbf{D}_\beta & \frac{1}{2\sigma^2}\mathbf{D}'_\lambda\mathbf{1} & \frac{1}{2}\mathbf{D}'_\lambda\mathbf{D}_\lambda.
\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{9.9}$$

Testová statistika je podle (A.34) rovna kvadratické formě

$$\left(\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}} \quad \frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} \quad \frac{\partial \ell}{\partial \lambda}\right)_{\tilde{\beta},\tilde{\sigma^2},\tilde{\lambda}}\left(\mathbf{J}(\tilde{\beta},\tilde{\sigma^2},\tilde{\lambda})\right)^{-1}\left(\frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}} \quad \frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} \quad \frac{\partial \ell}{\partial \lambda}\right)'_{\tilde{\beta},\tilde{\sigma^2},\tilde{\lambda}}.$$

9.2.5. Závislost na střední hodnotě

Velmi častým případem porušení předpokladu o konstantním rozptylu (tedy případem *heteroskedasticity*) je monotonní závislost rozptylu na střední hodnotě Y. Odvodíme testovou statistiku, která je založena na metodě skórů (viz Appendix A.3).

Předpokládejme, že je $\omega_i = \exp(\lambda(\mathbf{x}_{i\bullet})'\boldsymbol{\beta})$. Potom je $\mathbf{D}_\beta = \lambda\mathbf{X}$ a $\mathbf{D}_\lambda = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$. Konstantní rozptyly (homoskedasticitu) zaručí nulová hypotéza $\mathsf{H}_0 : \lambda = 0$. Za platnosti H_0 je tedy $\mathbf{D}_\beta = \mathbf{O}$ a $\mathbf{D}_\lambda = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$. Odtud je informační matice rovna

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, 0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma^2}\mathbf{X}'\mathbf{X} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \frac{n}{2\sigma^4} & \frac{1}{2\sigma^2}\mathbf{1}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \\ \mathbf{0}' & \frac{1}{2\sigma^2}\boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{1} & \frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \end{pmatrix}.$$

Když počítáme odhady metodou maximální věrohodnosti za nulové hypotézy, dostaneme $\tilde{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{b}$, $\tilde{\sigma^2} = RSS/n$ a samozřejmě $\tilde{\lambda} = 0$. Odtud vyjde

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \ell}{\partial \boldsymbol{\beta}} \\ \frac{\partial \ell}{\partial \sigma^2} \\ \frac{\partial \ell}{\partial \lambda} \end{pmatrix}_{\tilde{\beta}, \tilde{\sigma^2}, \tilde{\lambda}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ 0 \\ \frac{1}{2\tilde{\sigma^2}} \sum_{i=1}^{n} (u_i^2 - \tilde{\sigma^2})\hat{Y}_i \end{pmatrix}.$$

Když ještě vezmeme v úvahu, že odhad $\tilde{\sigma^2}$ je průměrem hodnot u_i^2 a když označíme průměrnou hodnotu z $\hat{Y}_i$ symbolem $\bar{\hat{Y}}$, můžeme jediný obecně nenulový prvek vektoru parciálních derivací logaritmické věrohodnostní funkce zapsat také jako

$$\frac{1}{2\tilde{\sigma^2}} \sum_{i=1}^{n} u_i^2 (\hat{Y}_i - \bar{\hat{Y}}).$$

Když také do Fisherovy informační matice dosadíme odhady za nulové hypotézy a výsledek dosadíme do (A.34), po úpravě (nezapomeňte invertovat matici $\mathbf{J}(\mathbf{b}, \tilde{\sigma^2}, 0)$) dostaneme statistiku

$$S_f = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} u_i^2 (\hat{Y}_i - \bar{\hat{Y}})\right)^2}{2\left(\tilde{\sigma^2}\right)^2 \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i - \bar{\hat{Y}})^2}. \tag{9.10}$$

Podle obecné teorie by za platnosti nulové hypotézy měla mít statistika S_f asymptoticky rozdělení χ_1^2. Statistiku S_f lze nalézt v citovaném článku Cook, Weisberg (1983), avšak jde o modifikaci postupu z Anscombe (1961).

Pokusme se nalezenou statistiku nějak názorně interpretovat. Až na dvojnásobek čtverce odhadu rozptylu $2\left(\tilde{\sigma^2}\right)^2$ je statistika S_f formálně rovna regresnímu součtu čtverců u lineární závislosti u_i^2 na $\hat{Y}_i$. Nebo jinak, je to polovina regresního součtu čtverců závislosti $u_i^2/\tilde{\sigma^2}$ na $\hat{Y}_i$. Uvážíme-li, že v této pomocné úvaze statistika u_i^2 nahrazuje veličinu e_i^2, která má rozptyl $2\sigma^4$, můžeme považovat výraz $2(\tilde{\sigma^2})^2$ za odhad tohoto rozptylu. Statistika S_f tedy vypovídá o nulovosti směrnice regresní přímky závislosti u_i^2 na $\hat{Y}_i$.

Program R obsahuje popsaný test v knihovně `car` jako funkci `ncv.test()`, kde je také odkaz na dvojici autorů Breusch, Pagan (1979), kteří navrhli také postup popsaný v následujícím odstavci. Iniciály právě zmíněných autorů má ve svém označení funkce `bptest()` z knihovny `lmtest`. Aby tato procedura testovala homosedasticitu proti právě proti monotonní závislosti na střední hodnotě, je třeba jako druhý argument uvést vektor $\hat{\mathbf{Y}}$, jak je patrno níže z příkladu.

Ukazuje se však, že popsaný test je velmi citlivý na splnění předpokladu o normálním rozdělení (např. Lyon, Tsai (1996)). Zvláště při pochybnostech o normalitě rozdělení je vhodné použít modifikaci, kterou navrhl Koenker (1981). Úprava spočívá v tom, že se výraz $2\sigma^4$ nahradí odhadem rozptylu veličin e_i^2 pomocí

$$\psi = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(u_i^2 - \tilde{\sigma^2})^2.$$

Není obtížné zjistit, že Koenkerovu variantu statistiky S_f lze vyjádřit pomocí výběrového korelačního koeficientu mezi vektorem druhých mocnin reziduí a vektorem $\hat{\mathbf{Y}}$ jako

$$S_{f,\text{Koenker}} = n(r_{u_i^2,\hat{Y}_i})^2.$$

Na místě je také zjednodušená varianta statistiky S_f, totiž čtverec testové t statistiky k testu hypotézy o nulové směrnici v uvažované pomocné regresní úloze.

Příklad 9.5 (brzdná dráha)

```
> summary(a<-lm(draha~rychlost+I(rychlost^2),data=Draha))

Call:
lm(formula = draha ~ rychlost + I(rychlost^2), data = Draha)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-22.499  -5.468  -0.425   3.932  28.106

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   1.83871    5.06085   0.363    0.718
rychlost      0.36935    0.54943   0.672    0.504
I(rychlost^2) 0.06664    0.01287   5.177 2.76e-06
```

```
Residual standard error: 9.891 on 60 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9137,     Adjusted R-squared: 0.9108
F-statistic: 317.7 on 2 and 60 DF,  p-value: < 2.2e-16

> ncv.test(a)
Non-constant Variance Score Test
Variance formula: ~ fitted.values
Chisquare = 23.08760    Df = 1     p = 1.547860e-06

> bptest(a,~fitted(a),studentize=FALSE)

        Breusch-Pagan test

data:  a
BP = 23.0876, df = 1, p-value = 1.548e-06

> bptest(a,~fitted(a),studentize=TRUE)

        studentized Breusch-Pagan test

data:  a
BP = 17.8588, df = 1, p-value = 2.379e-05
```

Výsledek bylo lze očekávat, když si prohlédneme závislost reziduí na vyrovnaných hodnotách znázorněnou na obrázku 9.1. Ještě nahoře zmíněná přibližná varianta testu:

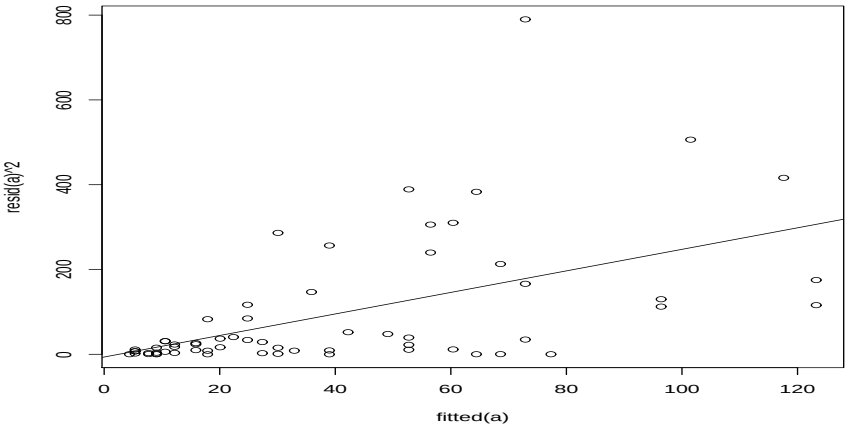
```
> anova(lm(resid(a)^2~fitted(a)))
Analysis of Variance Table

Response: resid(a)^2
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
fitted(a)  1  400923  400923  24.133 7.077e-06 ***
Residuals 61 1013399   16613
```

○

9.2.6. Závislost na doprovodných veličinách

Předpokládejme nyní, že heteroskedasticita je způsobena monotonní závislostí rozptylu na lineární kombinaci nějakých doprovodných veličin, mezi něž mohou patřit i některé použité regresory.

Předpokládejme, že je $\omega_i = \exp(\boldsymbol{\lambda}' \mathbf{z}_{i\bullet})$, kde $\mathbf{z}_{i\bullet}$ je i-tý řádek matice známých konstant s lineárně nezávislými sloupci $\mathbf{Z}$. Pro matice derivací evidentně platí $\mathbf{D}_\beta = \mathbf{O}$ a $\mathbf{D}_\lambda = \mathbf{Z}$, a to ať už nulová hypotéza $\mathsf{H}_0 : \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$ platí nebo neplatí. Vektor parciálních derivací věrohodnostní funkce má za platnosti nulové hypotézy



Obrázek 9.1: Závislost reziduí na vyhlazených hodnotách v modelu kvadratické závislosti brzdné dráhy na rychlosti

(po dosazení odhadů za nulové hypotézy) opět první dva bloky nulové. Nenulová je pouze derivace $\partial\ell/\partial\boldsymbol{\lambda}$. Po dosazení zmíněných odhadů dostaneme podobně jako v předchozí kapitolce výraz

$$\frac{\partial\ell}{\partial\boldsymbol{\lambda}} = \frac{1}{2\tilde{\sigma^2}}\sum_{i=1}^{n} u_i^2(\mathbf{z}_{i\bullet} - \bar{\mathbf{z}}).$$

Odpovídající prvek inverzní matice k Fisherově informační matici je inverzní matice k matici

$$\frac{1}{2}(\mathbf{Z} - \mathbf{1}\bar{\mathbf{z}}')'(\mathbf{Z} - \mathbf{1}\bar{\mathbf{z}}'),$$

takže výsledná statistika metody skórů typu (A.34) je

$$S_z = \frac{1}{2\left(\tilde{\sigma^2}\right)^2}\left(\sum_{i=1}^{n} u_i^2(\mathbf{z}_{i\bullet} - \bar{\mathbf{z}})\right)' ((\mathbf{Z} - \mathbf{1}\bar{\mathbf{z}}')'(\mathbf{Z} - \mathbf{1}\bar{\mathbf{z}}'))^{-1}\left(\sum_{i=1}^{n} u_i^2(\mathbf{z}_{i\bullet} - \bar{\mathbf{z}})\right).$$

Platí-li nulová hypotéza (homoskedasticita), má statistika S_z asymptoticky rozdělení χ_q^2, kde q je počet složek vektoru λ.

Interpretace statistiky S_z je podobná, jako u S_f. Lze ji chápat jako míru těsnosti závislosti čtverců reziduí u_i^2 na nezávisle proměnných obsažených v matici $\mathbf{Z}$ (v modelu, který kromě nich obsahuje také absolutní člen). I zde si lze představit zjednodušenou variantu a k rozhodování použít tabulku analýzy rozptylu mnohonásobné regrese (s absolutním členem) čtverců reziduí na regresorech z matice $\mathbf{Z}$.

Samozřejmě, na místě doprovodných proměnných lze použít také některé nebo všechny nezávisle proměnné z matice modelu. Speciálně, když u regresní přímky budeme vyšetřovat závislost rozptylu na (jediné) nezávisle proměnné, musí vyjít přesně stejná testová statistika jako při testování závislosti na střední hodnotě, tedy $S_z = S_f$.

Také tato varianta testu homockedasticity je implemetována v R v knihovnách `car` (funkce `ncv.test()` s parametrem `var.formula`) a `lmtest` (funkce `bptest()` s parametrem `varformula`).

Příklad 9.6 (brzdná dráha)

```
> ncv.test(a,var.formula=~rychlost)
Non-constant Variance Score Test
Variance formula: ~ rychlost
Chisquare = 23.44439    Df = 1     p = 1.285769e-06
```

I tento výsledek bylo lze očekávat, když si prohlédneme závislost reziduí na vyrovnaných hodnotách znázorněnou na obrázku 9.1. ◯

9.3. Normalita

V případě testování normality v lineárním modelu nastává zajímavá situace. Existují sice testové statistiky, jejichž rozdělení za platnosti nulové hypotézy (normálního rozdělení) bezpečně známe, ale takové testy mají slabou sílu. Mnohem užitečnější je aplikovat některé přibližné postupy, které použijí klasická rezidua u_i. Použití normovaných nebo studentizovaných reziduí vede ke snížení síly testu (viz např. diplomku Mgr. Štefka (1994)).

Často se používají *šikmost* a *špičatost*, vždy počítané z běžných reziduí. Velmi užitečné jsou transformace, které navrhl D'Agostino a které jsou použitelné pro poměrně malé počty pozorování. Transformovanou šikmost Z_3 lze použít již pro $n \geq 9$, transformovanou špičatost Z_4 již pro $n \geq 20$. Podrobně jsou transformace popsány například v Andělově (1998) knížce.

V kapitolce 8.7 jsme se již seznámili s *diagramem normality*, který znázorňuje body o souřadnicích $[g_i, u_{(i)}]$, kde g_i je střední hodnota i-té pořádkové statistiky prostého náhodného výběru z rozdělení $\mathsf{N}(0,1)$. Když předpokládáme běžný lineární model s absolutním členem, potom je součet reziduí nutně nulový, takže pak lze čtverec výběrového korelačního koeficientu psát jako

$$W' = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} g_i u_{(i)}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n} g_i^2 \sum_{i=1}^{n} u_{(i)}^2}. \tag{9.11}$$

Gardiner (1997) uvádí přibližné kritické hodnoty pro výběrový korelační koeficient $\sqrt{W'}$:

$$1{,}0063 - \frac{0{,}1288}{\sqrt{n}} - \frac{0{,}6118}{n} + \frac{1{,}3505}{n^2} \qquad \text{pro } \alpha = 5\ \%,$$

$$1{,}0071 - \frac{0{,}1371}{\sqrt{n}} - \frac{0{,}3682}{n} + \frac{0{,}7780}{n^2} \qquad \text{pro } \alpha = 10\ \%.$$

Postup založený na korelačním koeficientu $\sqrt{W'}$ bývá uváděn jako *Ryanův-Joinerův test*. Statistika W' je zjednodušenou alternativou k původní *statistice Shapira a Wilka*, která má tvar

$$W = \frac{1}{S^2}\left(\sum_{i=1}^{[n/2]} a_{i,n}(u_{(n-i+1)} - u_{(i)})\right)^2. \tag{9.12}$$

Koeficienty $a_{i,n}$ jsou odvozeny ze středních hodnot a varianční matice pořádkových statistik prostého náhodného výběru z $\mathsf{N}(0,1)$ rozsahu n. Spolu s kritickými hodnotami jsou tabelovány např. v knize Hahn, Shapiro (1967).

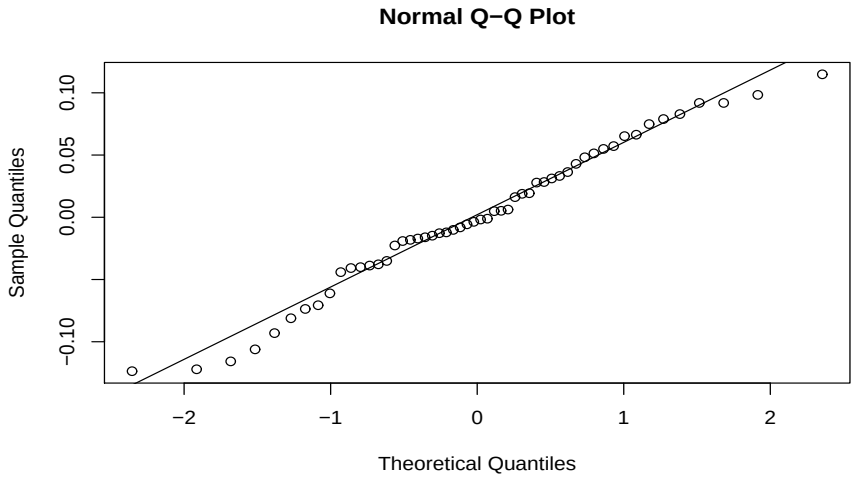
Uvedený test je v R součástí standardní knihovny `ctest` jako `shapiro.test`.

Příklad 9.7 (brzdná dráha)

```
> shapiro.test(resid(a))

        Shapiro-Wilk normality test

data:  resid(a)
W = 0.9744, p-value = 0.2126
> skewness.test(resid(a))

        D'Agostino skewness normality test

data:  resid(a)
Z3 = 1.1535, p-value = 0.2487

> kurtosis.test(resid(a))

        D'Agostino kurtosis normality test

data:  resid(a)
Z4 = 1.2584, p-value = 0.2082

> omnibus.test(resid(a))

        D'Agostino omnibus normality test

data:  resid(a)
Chi2 = 2.9143, df = 2, p-value = 0.2329
```

Často se používá *test Kolmogorovův-Smirnovův*, který porovnává empirickou a teoretickou distribuční funkci. Protože jde o testování složené hypotézy (nulová hypotéza určuje pouze tvar rozdělení, nikoliv jeho parametry), je třeba pracovat s modifikací Kolmogorovova-Smirnovova testu, která známa jako *test Lillieforsův*. Rozdíl je pouze v použitých kritických hodnotách.

Pozor, dostupné programové vybavení je třeba používat opatrně. Jinak zajímavý program NCSS používá zmíněnou Lillieforsovu modifikaci automaticky a bez upozornění, kdežto Statistica udává dvojí hodnocení zjištěné statistiky Kolmogorova-Smirnova. V knihovně `stats` systému R procedura `ks.test()` předpokládá u jednovýběrového testu nulovou hypotézou jednoznačně určenou distribuční funkci. Knihovna `nortest` obsahuje pět dalších testů normality, mezi nimi také variantu testu Lillieforsova (`lillie.test()`).



Obrázek 9.2: Normální diagram reziduí

Příklad 9.8 (kořeny) Opět se budeme věnovat známému příkladu. Začněme normálním diagramem reziduí (obrázek 9.2).

```
> u <- resid(lm(hmotnost~Procento,data=Koreny))
> shapiro.test(u)

        Shapiro-Wilk normality test

data:  u
W = 0.9794, p-value = 0.476

> lillie.test(u)

        Lilliefors (Kolmogorov-Smirnov) normality test

data:  u
D = 0.0762, p-value = 0.606

> dagostinoTest(u)
             skewness   kurtosis   omnibus
statistics -0.7077626 -0.5144408 0.7655772
p-value     0.4790927  0.6069438 0.6819570
>
```

Všechny použité testy naznačují totéž, co normální diagram. Není důvod nepředpokládat v modelu analýzy rozptylu normální rozdělení. Pilnému čtenáři doporučuji vyzkoušet si testy normality na stejných datech, ovšem v modelech lineární a kvadratické závislosti na obsahu cukru. ◯

9.4. Nezávislost

Problém se stochastickou závislostí pozorování se vyskytuje zejména tehdy, když data získáváme postupně, takže hodnoty závisle proměnné tvoří ve skutečnosti časovou řadu. Každopádně musí mít pořadí pozorování nějaký význam, aby mělo smysl formálně se zabývat ověřováním předpokladu nezávislosti jednotlivých pozorování.

Mějme opět náhodné veličiny $Y_i = (\mathbf{x}_{i\bullet})'\boldsymbol{\beta} + e_i$, kde $e_i \sim \mathsf{N}(0, \sigma^2)$. Tentokrát připouštíme, že náhodné veličiny $e_1, \ldots, e_n$ jsou závislé, speciálně, že tvoří autoregresní proces prvního řádu $e_i = \rho e_{i-1} + \epsilon_i$, v němž ϵ_i jsou již nezávislé. Pro $\rho = 0$ dostaneme klasický normální lineární model.

Statistika Durbina a Watsona má tvar

$$d = \frac{\sum_{i=1}^{n-1}(u_{i+1} - u_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} u_i^2} = \frac{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}}{\mathbf{u}'\mathbf{u}}, \tag{9.13}$$

kde matice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

je zřejmě symetrická a pozitivně semidefinitní (vyjadřuje nezápornou kvadratickou funkci z čitatele, součet řádků dá nulový vektor).

Zajímá nás rozdělení statistiky d za platnosti nulové hypotézy $\mathsf{H}_0 : \rho = 0$. Připomeňme, že je $\mathbf{u} = \mathbf{Me}$. Přitom matici $\mathbf{M}$ lze vyjádřit pomocí mnohokrát použité ortonormální báze jako $\mathbf{M} = \mathbf{NN}'$. Když zavedeme náhodný vektor

$$\mathbf{t} = \frac{1}{\sigma}\mathbf{N}'\mathbf{e} \sim \mathsf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_{n-r}),$$

můžeme statistiku d přepsat jako

$$d = \frac{\mathbf{t}'\mathbf{N}'\mathbf{AN}\mathbf{t}}{\mathbf{t}'\mathbf{t}}.$$

Nyní najdeme k pozitivně semidefinitní matici $\mathbf{N}'\mathbf{AN}$ její spektrální rozklad $\mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}'$, kde $\mathbf{Q}$ je nějaká ortonormální matice řádu $n-r$ a $\mathbf{\Lambda}$ je diagonální matice s diagonálními prvky $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_{n-r} \geq 0$. Zaveďme nyní náhodný vektor $\mathbf{Z} = \mathbf{Q}'\mathbf{t}$. Snadno zjistíme, že je $\mathbf{Z} \sim \mathsf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_{n-r})$, takže statistika

$$d = \frac{\mathbf{Z}'\mathbf{\Lambda}\mathbf{Z}}{\mathbf{Z}'\mathbf{Z}} = \frac{\sum_{i=1}^{n-r} \lambda_i Z_i^2}{\sum_{i=1}^{n-r} Z_i^2}$$

je podílem lineární kombinace náhodných veličin s rozdělením χ_1^2 a součtu těchto náhodných veličin.

Problémem je, že koeficienty lineární kombinace (konstanty λ_i) závisí na výchozí regresní matici $\mathbf{X}$. Naštěstí lze podle Poincarého věty (viz větu A.10 v Dodatku) tato vlastní čísla omezit pomocí vlastních čísel matice $\mathbf{A}$. Předpokládejme, že platí $\mathbf{1} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$ (například v modelu existuje absolutní člen). Potom platí $\mathbf{N1} = \mathbf{0}$ a protože je $\mathbf{1}$ vlastním vektorem matice $\mathbf{A}$ odpovídajícím jejímu nejmenšímu vlastnímu číslu, můžeme použít nerovnosti (A.22) a (A.24). Uvážíme-li, že v našem případě je hodnost menší matice rovna $q = n - r$, můžeme zmíněné nerovnosti přepsat jako

$$\begin{aligned} \lambda_i &\leq \alpha_i && 1 \leq i \leq n-r, \\ \alpha_{n-j} &\leq \lambda_{n-r-j+1} && 1 \leq j \leq n-r. \end{aligned}$$

Nyní ve druhé nerovnosti provedeme záměnu $i = n-r$, přičemž nový sčítací index se bude pohybovat ve stejném rozmezí jako původní index j. Dostaneme tak omezení pro λ_i shora i zdola ve tvaru

$$\alpha_{i+r-1} \leq \lambda_i \leq \alpha_i \qquad 1 \leq i \leq n-r,$$

takže pro každé vlastní číslo λ_i máme rozmezí, v němž se musí nacházet a jehož šířka (co do vzdálenosti mezi α_i) závisí na hodnosti matice $\mathbf{X}$. Uvážíme-li nyní, že s jednotkovou pravděpodobností jsou všechny náhodné veličiny Z_i^2 kladné, dostaneme horní a dolní omezení pro d ve tvaru

$$d_L = \frac{\sum_{i=1}^{n-r} \alpha_{i+r-1} Z_i^2}{\sum_{i=1}^{n-r} Z_i^2} = d_L \leq d = \frac{\sum_{i=1}^{n-r} \lambda_i Z_i^2}{\sum_{i=1}^{n-r} Z_i^2} \leq \frac{\sum_{i=1}^{n-r} \alpha_i Z_i^2}{\sum_{i=1}^{n-r} Z_i^2} = d_U.$$

Rozdělení náhodných veličin d_L, d_U závisí již pouze na n a r. Existují tabulky kritických hodnot pro náhodné veličiny d_L, d_U, např. Likeš, Laga (1978).

Při testování nulové hypotézy $\mathsf{H}_0 : \rho = 0$ proti alternativní hypotéze $\mathsf{H}_1 : \rho > 0$ pak ve prospěch alternativní hypotézy budou svědčit spíše malé hodnoty statistiky d (sousední rezidua jsou spíš podobná). Nulovou hypotézu zamítneme, když bude platit $d \leq d_L(\alpha)$, nezamítneme ji v případě, že vyjde $d > d_U(\alpha)$.

Ve zbývajících případech ($d_L(\alpha) < d \leq d_U(\alpha)$) rozhodnout takto snadno nelze. Pak je možno skutečné rozdělení statistiky $d/4$ aproximovat pomocí beta rozdělení s takovými parametry, aby se shodovaly první dva momenty. O možnostech aproximací rozdělení d pojednává podrobně přehledný článek autorů metody Durbin, Watson (1971). V poslední době se stále častěji používají k hodnocení statistiky d simulace. Výsledkem je pak přibližná dosažená hladina testu (p hodnota).

Snadno se zjistí, že statistika d těsně souvisí s odhadem koeficientu ρ: $d \doteq 2(1 - \hat{\rho})$.

K diagnostice problémů s nenulovým autokorelačním koeficientem ρ se používá diagram, který znázorňuje $n - 1$ bodů $[u_{i-1}, u_i]$. Při kladném parametru ρ mají body tendenci sdružovat se podle přímky $y = x$, při záporném ρ pak podle přímky $y = -x$.

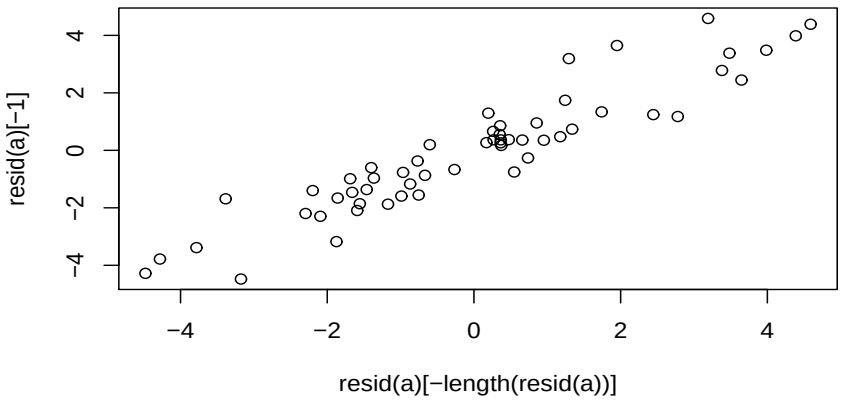
Předpokládejme, že data jsou uspořádána tak, že hodnoty nezávisle proměnné rostou s pořadovým indexem pozorování. Když se vyšetřuje kvadratická závislost na nezávisle proměnné a použije se pouze závislost lineární, výsledná sousední rezidua mají tendenci být si blízká, což je podobná situace, jako při kladném autokorelačním koeficientu ρ. Proto lze Durbinův-Watsonův test použít někdy také k diagnostice nesprávného tvaru regresní funkce.

V R lze najít Durbinův-Watsonův test ve dvou knihovnách. V `car` pod názvem `dwtest` je funkce třídy `htest` (v níž jsou klasické testy jako např. t-testy) a p-hodnota se počítá pomocí algoritmu AS153 (Farebrother, 1980, 1984). Procedura `durbin.watson` umístěná v knihovně `lmtest` počítá p-hodnotu simulováním, udává také odhad $\hat{\rho}$.

Příklad 9.9 (porodnost) Uvažujme porodnost v České republice od roku 1946 do roku 2002. Nepochybně lze očekávat, že při předpokládané lineární závislosti na čase půjde o silnou autokorelaci.

```
> summary(a<-lm(birthsM~year))

Call:
lm(formula = birthsM ~ year)
```

```
Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.4783 -1.4620  0.1959  1.1766  4.5895

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 405.57541   34.05868   11.91  < 2e-16 ***
year         -0.19785    0.01725  -11.47  3.3e-16 ***

Residual standard error: 2.143 on 55 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.7051,     Adjusted R-squared: 0.6997
F-statistic: 131.5 on 1 and 55 DF,  p-value: 3.297e-16

> durbin.watson(a)
 lag Autocorrelation D-W Statistic p-value
   1       0.9276123     0.1291842       0
 Alternative hypothesis: rho != 0
> plot(resid(a)[-length(resid(a))],resid(a)[-1])
```



Obrázek 9.3: Diagnostický diagram pro autokorelaci

10. Multikolinearita

Ve vlastní regresi se zpravidla předpokládá, že regresní matice $\mathbf{X}$ má lineárně nezávislé sloupce. Teoreticky matice má nebo nemá lineárně závislé sloupce. Ovšem u reálných matic je někdy obtížné rozhodnout, která z obou možností opravdu nastala.

O *multikolinearitě* tedy hovoříme tehdy, kdy matice $\mathbf{X}$ má sice lineárně nezávislé sloupce, ale v nějakém smyslu jsou tyto sloupce téměř lineárně závislé. O způsobem, jak multikolinearitu odhalit, pojednáme postupně.

10.1. Teorie

Nejprve uvedeme dvě důležité vlastnosti odhadů v lineárním modelu.

Věta 10.1. V modelu $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ platí

$$\mathsf{E}\,||\hat{\mathbf{Y}}||^2 = ||\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}||^2 + \sigma^2\mathsf{h}(\mathbf{X}). \tag{10.1}$$

Má-li matice $\mathbf{X}$ lineárně nezávislé sloupce, pak platí

$$\mathsf{E}\,||\mathbf{b}||^2 = ||\boldsymbol{\beta}||^2 + \sigma^2\,\mathsf{tr}\,(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}. \tag{10.2}$$

D ů k a z: Výraz $\mathsf{E}\,||\hat{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}||^2$ můžeme upravit dvěma způsoby. Jednak je to

$$\begin{aligned}\mathsf{E}\,(\hat{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})'(\hat{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) &= \mathsf{tr}\,\mathsf{E}\,(\hat{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})'(\hat{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \\ &= \mathsf{tr}\,\mathsf{var}\,\hat{\mathbf{Y}} \;=\; \sigma^2\,\mathsf{tr}\,\mathbf{H} \;=\; \sigma^2\mathsf{h}(\mathbf{X}),\end{aligned}$$

a také

$$\begin{aligned}\mathsf{E}\,||\hat{\mathbf{Y}} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}||^2 &= \mathsf{E}\,||\hat{\mathbf{Y}}||^2 - 2\boldsymbol{\beta}'\mathbf{X}'\mathsf{E}\,\hat{\mathbf{Y}} + ||\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}||^2 \\ &= \mathsf{E}\,||\hat{\mathbf{Y}}||^2 - ||\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}||^2.\end{aligned}$$

Tvrzení (10.1) dostaneme porovnáním obou vyjádření. Druhé tvrzení věty dostaneme podobně, když dvěma způsoby vyjádříme výraz $\mathsf{E}\,||\mathbf{b}-\boldsymbol{\beta}||^2$:

$$\begin{aligned}\mathsf{E}\,||\mathbf{b}-\boldsymbol{\beta}||^2 &= \operatorname{tr}\operatorname{var}\mathbf{b} \;=\; \sigma^2\operatorname{tr}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\\ &= \mathsf{E}\,||\mathbf{b}||^2 - ||\boldsymbol{\beta}||^2. \qquad\qquad \square\end{aligned}$$

Ze vztahu (10.1) je zřejmé, že střední hodnota čtverce délky odhadu vektoru $\mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ závisí pouze na skutečné hodnosti matice $\mathbf{X}$, nikoliv na tom, jak „dobře“ jsou její sloupce lineárně nezávislé. Multikolinearita tu tedy nehraje žádnou roli. Totéž však neplatí pro odhad vektoru regresních koeficientů $\boldsymbol{\beta}$. Při tom právě tento vektor udává, která lineární kombinace sloupců matice $\mathbf{X}$ tvoří jednoznačně určený vektor $\hat{\mathbf{Y}}$. Je zajímavé všimnout si, že hodnota, o kterou se liší střední hodnota čtverce délky odhadu od čtverce délky odhadovaného parametru, je rovna součtu rozptylů odhadů jednotlivých složek odhadovaného parametru.

Dál budeme v této kapitole předpokládat, že platí $\mathsf{h}(\mathbf{X}) = k+1$. Nechť $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ má spektrální rozklad podle (A.5) (s vlastními čísly $\lambda_1,\ldots,\lambda_{k+1}$) tvaru:

$$\mathbf{X}'\mathbf{X} = \sum_{i=1}^{k+1}\lambda_i\mathbf{q}_i\mathbf{q}_i'. \tag{10.3}$$

Potom platí

$$\mathsf{E}\,||\mathbf{b}||^2 = ||\boldsymbol{\beta}||^2 + \sigma^2\sum_{i=1}^{k+1}\frac{1}{\lambda_i}.$$

Malá vlastní čísla se tedy projeví velikou neshodou mezi $\mathsf{E}\,||\mathbf{b}||^2$ a $||\boldsymbol{\beta}||^2$.

Předpokládejme, že vlastní čísla jsou označena indexy tak, aby platilo

$$\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_{k+1} > 0,$$

když poslední nerovnost plyne z našeho předpokladu o hodnosti matice $\mathbf{X}$. O nebezpečí multikolinearity do značné míry vypovídá *číslo podmíněnosti* matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$, které je definováno jako λ_1/λ_{k+1}. Podobně číslo podmíněnosti matice $\mathbf{X}$ je rovno $\sqrt{\lambda_1/\lambda_{k+1}}$. Podrobnější informaci dají *indexy podmíněnosti* matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$

$$\eta_j = \frac{\lambda_1}{\lambda_j}, \qquad 1 \leq j \leq k+1.$$

Číslo podmíněnosti matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ je rovno η_{k+1} a číslo podmíněnosti matice $\mathbf{X}$ je rovno $\sqrt{\eta_{k+1}}$.

Je třeba upozornit na jednu velmi nepříjemnou vlastnost vlastních čísel, totiž jejich závislost na zvoleném měřítku. Porovnejme dvě matice:

$$A = \begin{pmatrix}30 & 2 & 1\\ 2 & 30 & 5\\ 1 & 5 & 10\end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix}30 & 0{,}02 & 1000\\ 0{,}02 & 0{,}0030 & 50\\ 1000 & 50 & 10000000\end{pmatrix}.$$

Může jít o dvě matice typu $\mathbf{X}'\mathbf{X}$, které se liší pouze měřítkem, v jakém jsou vyjádřena data. Matice $\mathbf{X}$ má tři sloupce, z nichž první obsahuje jedničky (pro absolutní člen). Druhý sloupec obsahuje délkové údaje vyjádřené v centimetrech (matice $\mathbf{A}$) nebo v metrech (matice $\mathbf{B}$), třetí sloupec obsahuje údaje o hmotnosti vyjádření v kilogramech nebo v gramech. Jedná se tedy vlastně o stejnou úlohu, ovšem čísla podmíněnosti matice $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ jsou velmi různá: $\eta_{k+1}(A) = 3{,}730$ je poměrně malé, kdežto $\eta_{k+1}(B) = 3{,}646 \cdot 10^9$.

Někdy se tedy, dříve než se spočítají vlastní čísla, matice $\mathbf{X}$ normuje tak, aby všechny její sloupce měly stejnou délku (viz program NCSS). Má to význam zejména tehdy, když máme interpretaci pro absolutní člen modelu.

Druhým používaným normováním je přechod ke korelačním koeficientům, jak to provedeme v následující kapitolce. Tento postup však nelze použít tehdy, když má ve vyšetřovaném modelu absolutní člen vlastní věcnou interpretaci.

10.2. Regrese standardizovaných veličin

Mnohé programy nabízejí diagnostické prostředky, které jsou založeny na standardizovaných veličinách a jejich kovariancích, tedy na korelačních koeficientech.

Uvažujme model tvaru

$$Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{k} x_{ij}\beta_j + e_i, \qquad 1 \le i \le n, \tag{10.4}$$

kde nezávislé náhodné veličiny $e_1, \dots, e_n$ mají rozdělení $\mathsf{N}(0, \sigma^2)$. Předpokládáme opět, že matice

$$\mathbf{X} = (\mathbf{1}, \mathbf{x}_{\bullet 1}, \cdots, \mathbf{x}_{\bullet k})$$

má lineárně nezávislé sloupce, tedy hodnost $k+1$. Označme

$$T_j^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - \bar{x}_j)^2, \qquad T_0^2 = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2,$$

a zaveďme standardizované veličiny

$$Y_i^* = \frac{Y_i - \bar{Y}}{T_0}, \qquad x_{ij}^* = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{T_j},$$

pro které platí

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i^* = 0, \qquad \sum_{i=1}^{n} Y_i^{*2} = 1, \qquad \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^* = 0, \qquad \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^{*2} = 1.$$

Označme dále

$$r_{jt} = \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^* x_{it}^*, \qquad r_{j0} = \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^* Y_i^*.$$

Snadno nahlédneme, že r_{jt}, r_{j0} jsou výběrové korelační koeficienty. Nyní vyjádříme původní pozorování pomocí odhadů

$$\begin{aligned} Y_i = \hat{Y}_i + u_i &= b_0 + \sum_{j=1}^{k} x_{ij} b_j + u_i \\ &= \left(b_0 + \sum_{j=1}^{k} \bar{x}_j b_j \right) + \sum_{j=1}^{k} (x_{ij} - \bar{x}_j) b_j + u_i \\ &= \bar{Y} + \sum_{j=1}^{k} (x_{ij} - \bar{x}_j) b_j + u_i, \end{aligned}$$

když jsme využili skutečnosti, že v modelu s absolutním členem prochází odhadnutá závislost těžištěm, takže platí $\bar{Y} = b_0 + \sum_{j=1}^{k} \bar{x}_j b_j$.

Poslední vztah vyjádříme pomocí standardizovaných veličin označených hvězdičkou, dostaneme tak *standardizovaný model*

$$\begin{aligned} Y_i^* = \frac{Y_i - \bar{Y}}{T_0} &= \sum_{j=1}^{k} \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{T_j} \frac{T_{jj}}{T_0} b_j + \frac{u_i}{T_{00}} \\ &= \sum_{j=1}^{k} x_{ij}^* b_j^* + u_i^*, \end{aligned}$$

když jsme zavedli *standardizované koeficienty* $b_j^* = (T_{jj}/T_{00}) b_j$ a rezidua standardizovaného modelu $u_i^* = u_i/T_{00}$. Reziduální součet čtverců standardizovaného modelu RSS^* zřejmě těsně souvisí s koeficientem determinace

$$RSS^* = \sum_{i=1}^{n} u_i^{*2} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{u_i}{T_{00}} \right)^2 = \frac{RSS}{T_{00}^2} = 1 - \left(1 - \frac{RSS}{T_{00}^2} \right) = 1 - R^2. \qquad (10.5)$$

Pokusme se vyjádřit hledání odhadů regresních koeficientů. Když shromáždíme standardizované veličiny x_{ij}^* a Y_i^* do matice $\mathbf{X}^*$ a vektoru $\mathbf{Y}^*$, bude vektor $\mathbf{b}^* = (b_1^*, \ldots, b_k^*)'$ řešením normální rovnice (standardizovaný model má absolutní člen identicky nulový)

$$(\mathbf{X}^{*'} \mathbf{X}^*) \mathbf{b}^* = \mathbf{X}^{*'} \mathbf{Y}^*.$$

Označíme-li matici korelačních koeficientů r_{jt} jako $\mathbf{R}_{xx}$ a podobně vektor korelačních koeficientů r_{j0} symbolem $\mathbf{r}_{xy}$, můžeme poslední vztah vyjádřit také jako

$$\mathbf{R}_{xx} \mathbf{b}^* = \mathbf{r}_{xy}.$$

Vyjádříme ještě odhad varianční matice statistiky $\mathbf{b}^*$:

$$\widehat{\mathsf{var}\,\mathbf{b}^*} = S^{*2}\mathbf{R}_{xx}^{-1} = \frac{RSS^*}{n-k-1}\mathbf{R}_{xx}^{-1} = \frac{1-R^2}{n-k-1}\mathbf{R}_{xx}^{-1}.$$

Použijeme-li běžné označení prvků inverzní matice pomocí horních indexů, dostaneme vyjádření

$$\widehat{\mathsf{var}\,b_j^*} = \frac{1-R^2}{n-k-1}r^{jj}.$$

V dalším bude užitečné další vyjádření koeficientu determinace. Postupně upravíme inverzní matici k výběrové korelační matici veličin $Y^*, x_1^*, \ldots, x_k^*$ (která je totožná s korelační maticí veličin $Y, x_1, \ldots, x_k$):

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} 1 & \mathbf{r}'_{xy} \\ \mathbf{r}_{xy} & \mathbf{R}_{xx} \end{pmatrix}^{-1} &= \begin{pmatrix} (1-\mathbf{r}'_{xy}\mathbf{R}_{xx}^{-1}\mathbf{r}_{xy})^{-1} & * \\ * & * \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (\mathbf{Y}^{*'}\mathbf{Y}^* - \mathbf{Y}^{*'}\mathbf{X}^*(\mathbf{X}^{*'}\mathbf{X}^*)^{-1}\mathbf{X}^{*'}\mathbf{Y}^*)^{-1} & * \\ * & * \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} RSS^{*-1} & * \\ * & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1-R^2)^{-1} & * \\ * & * \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Nyní vyjádříme jemněji j-tý diagonální prvek matice $\mathbf{R}_{xx}^{-1}$. Představme si nyní, že na místě veličiny Y je jedna z veličin x_j. Označme symbolem R_j^2 koeficient determinace závislosti $\mathbf{x}_{\bullet j}$ na ostatních veličinách, tedy na veličinách $\mathbf{x}_{\bullet 1}, \ldots, \mathbf{x}_{\bullet(j-1)}$, $\mathbf{x}_{\bullet(j+1)}, \ldots, \mathbf{x}_{\bullet k}$. Z úvahy o inverzní matici ke korelační matici zřejmě plyne, že platí

$$r^{jj} = \frac{1}{1-R_j^2}$$

Můžeme tedy vyjádřit odhad rozptylu odhadu b_j^* ve tvaru

$$\widehat{\mathsf{var}\,b_j^*} = \frac{1-R^2}{n-k-1}\frac{1}{1-R_j^2}. \tag{10.6}$$

Nejmenší možný rozptyl dostaneme, když je $R_j^2 = 0$, s rostoucí hodnotou R_j^2 se rozptyl odhadu b_j^* zvětšuje. Charakteristika $1-R_j^2$ se zpravidla nazývá *tolerance*, její převrácená hodnota se označuje *VIF* (Variance Inflation Factor) a ukazuje, kolikrát se zhorší rozptyl odhadu b_j^* v důsledku korelovanosti j-tého regresoru s ostatními regresory.

Ukažme ještě souvislost s původními parametry. Protože je $b_j = (T_0/T_j)b_j^*$, platí

$$\widehat{\mathsf{var}\,b_j} = \frac{1-R^2}{n-k-1}\frac{1}{1-R_j^2}\left(\frac{T_0}{T_j}\right)^2.$$

Poslední poznámka patří testování nulovosti regresních koeficientů β_j. Testovou statistiku lze vyjádřit následovně:

$$\frac{b_j}{\sqrt{\widehat{\mathsf{var}}\, b_j}} = \frac{(T_0/T_j)b_j^*}{\sqrt{\widehat{\mathsf{var}}\,((T_0/T_j)b_j^*)}} = \frac{b_j^*}{\sqrt{\widehat{\mathsf{var}}\, b_j^*}}$$
$$= b_j^* \sqrt{\frac{n-k-1}{1-R^2}} \sqrt{1-R_j^2}.$$

Rozhodovat lze tedy buď v původní nebo v upravené (hvězdičkové) parametrizaci. Dále je zřejmé, jak závisí na vnitřní závislosti mezi regresory. Malá tolerance (velký inflační faktor *VIF*) vyžaduje větší hodnotu $|b_j^*|$ k tomu, abychom mohli prokázat nenulovost parametru β_j.

Ve výstupu programu NCSS lze koeficienty b_j^* nalézt v oddílu nazvaném Regression Coefficient Section pod názvem Standardized Coefficient. Program STATISTICA uvádí tyto odhady ve sloupci nadepsaném BETA. V R si můžeme pomoci procedurou `scale()`, která provádí normování (přechod od x_{ij} k x_{ij}^*).

Příklad 10.1 (měření IQ) Použijme data, zjištěná na velké škole při pedagogickém výzkumu. Pro každého ze 111 žáků známe jeho pohlaví, průměrný prospěch v pololetí sedmé a osmé třídy a hodnotu IQ. Naším cílem je ověřit možnost odhadovat IQ nepřímo, ze známých průměrných známek, případně s přihlédnutím k pohlaví, kdy dívky jsou kódovány jedničkou a hoši nulou. Výběrové korelační koeficienty zjistíme snadno:

```
> cor(cbind(iq,divka,zn7,zn8))
                iq      divka        zn7        zn8
iq       1.0000000  0.1217568 -0.6887396 -0.6571046
pohlavi  0.1217568  1.0000000 -0.3666488 -0.3802419
zn7     -0.6887396 -0.3666488  1.0000000  0.9545902
zn8     -0.6571046 -0.3802419  0.9545902  1.0000000
```

Při výpočtu odhadů standardizovaného modelu b_j^* ponecháme přednastavené parametry funkce `scale` (odečte průměr, vydělí směrodatnou odchylkou). I když je ve standardizovaném modelu absolutní člen identicky nulový, my jej v popisu závislosti ponecháme, abychom zachovali správný počet stupňů volnosti (absolutní člen je v upraveném modelu pouze skryt).

```
> summary(lm(scale(iq)~scale(pohlavi)+scale(zn7)+scale(zn8),data=Iq))

Call:
lm(formula = scale(iq) ~ scale(pohlavi) + scale(zn7) + scale(zn8))

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-1.47790 -0.50164 -0.02892  0.47855  1.76069
```

```
Coefficients:
                 Estimate Std. Error   t value Pr(>|t|)
(Intercept)    -1.455e-16  6.844e-02 -2.13e-15  1.00000
scale(pohlavi) -1.528e-01  7.434e-02    -2.055  0.04232 *
scale(zn7)     -6.989e-01  2.308e-01    -3.029  0.00308 **
scale(zn8)     -4.800e-02  2.321e-01    -0.207  0.83658

Residual standard error: 0.721 on 107 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.4943,     Adjusted R-squared: 0.4801
F-statistic: 34.87 on 3 and 107 degrees of freedom,  p-value: 8.882e-016
```

Pro srovnání uveďme také klasické odhady b_j:

```
> summary(lm(IQ~pohlavi+zn7+zn8,data=Iq))

Call:
lm(formula = IQ ~ pohlavi + zn7 + zn8)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-22.1677  -7.5243  -0.4338   7.1780  26.4095

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  142.785      3.869  36.909  < 2e-16 ***
pohlavi       -4.563      2.221  -2.055  0.04232 *
zn7          -16.767      5.536  -3.029  0.00308 **
zn8           -1.149      5.557  -0.207  0.83658

Residual standard error: 10.81 on 107 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.4943,     Adjusted R-squared: 0.4801
F-statistic: 34.87 on 3 and 107 degrees of freedom,  p-value: 8.882e-016
```

Všimněme si především stejných hodnot jednotlivých t-statistik a odpovídajích dosažených hladin testu v běžném a standardizovaném modelu. Totéž platí pro koeficient determinace i pro adjustovaný koeficient determinace.

Ponechme zatím stranou velkou dosaženou hladinu u průměru z 8. třídy, která svědčí o tom, že tento regresor bychom mohli vynechat. O multikolinearitě svědčí velký korelační koeficient mezi oběma průměrnými známkami: Absolutní člen tentokrát nemá v modelu vlastní význam, proto při hodnocení multikolinearity vyjdeme z korelační matice. Indexy podmíněnosti a další charakteristiky odvozené z korelační matice spočítáme jednoduchou procedurou

```
VIF <- function(lmobj)
#  počítá diagnostické statistiky související s multikolinearitou
#  založené na korelační matici
#  předpokládá absolutní člen
{
if (!is.null(weights(lmobj)))
```

```
stop("requires unweighted model")
if (!(any(names(coefficients(lmobj))=="(Intercept)")))
stop("requires model with intercept")
X0 <- scale(model.matrix(lmobj))[,-1] # standardizace regresorů
nam <- labels(terms(lmobj))[-1]
y0 <- scale(lmobj$model[,1]) # standardizace regresandu
lmobj0 <- lm(y0~X0) # standardizovaná regrese
VIF <- diag(solve(cor(X0)))
tol <- 1/VIF; R2 <- 1-tol
b.star <- coef(lmobj0)[-1]
out <- cbind(b.star,VIF,R2,tol)
rownames(out) <- term.names(lmobj)[-1]
return(out)
}
```

Vyšetřovaný model dal tyto výsledky:

```
VIF(lm(iq~divka+zn7+zn8,data=Iq))
           b.star       VIF        R2        tol
divka -0.15275544  1.169230 0.1447359 0.85526408
zn7   -0.69892795 11.268657 0.9112583 0.08874172
zn8   -0.04799886 11.402400 0.9122992 0.08770084
```

Samotné hodnoty *VIF* lze spočítat pomocí procedury `vif()` z knihovny `car` nebo z knihovny `Design`. Druhá ze zmíněných knihoven si ovšem sama natáhne knihovnu `Hmisc` a změní význam řady funkcí.

Sloupec nazvaný `b.star` obsahuje odhady b_j^*. Sloupec nazvaný `R2` obsahuje koeficienty determinace R_j^2 v regresních modelech, kdy se snažíme vysvětlit regresor x_j jako lineární funkci všech ostatních regresorů.

Ukazuje se, že vzájemná závislost některých regresorů zvětšila rozptyl odhadů koeficientů u standardizovaných průměrů více než desetkrát (*VIF*). Velikost vzájemné závislosti charakterizují velké koeficienty determinace. Například průměr v 8. třídě lze vysvětlit více než z 90 % pomocí ostatních regresorů. Diagonální prvky `vjj` matice $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ udávají (až na S^2) rozptyl odhadů b_j.

Pro zajímavost, když odstraníme z modelu průměr známek z 8. třídy, jsou obě inflační čísla *VIF* rovna 1,155310 (Pročpak jsou *obě* inflační čísla stejná?):

```
> VIF(lm(iq~divka+zn7,data=Iq))
          b.star      VIF        R2       tol
divka -0.1510784 1.155310 0.1344313 0.8655687
zn7   -0.7441323 1.155310 0.1344313 0.8655687
```

Všimněme si také odhadů regresních koeficientů.

```
> summary(lm(iq~divka+zn7,data=Iq))

Call:
lm(formula = iq ~ divka + zn7, data = Iq)
```

```
Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-21.9606  -7.4290  -0.1927   7.0047  26.5244

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  142.607      3.755  37.982   <2e-16 ***
divka         -4.513      2.198  -2.054   0.0424 *
zn7          -17.852      1.765 -10.116   <2e-16 ***

Residual standard error: 10.77 on 108 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.4941,     Adjusted R-squared: 0.4848
F-statistic: 52.74 on 2 and 108 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Je jistě patrné, jak byla krátkozraká piterpretace velké dosažené hladiny u proměnné `zn8`. Vůbec neznamenala, že by hodnota *IQ* nesouvisela se známkovým průměrem. Pouze tento průměr neuměl říci nic podstatně nového o *IQ*, co bychom nevěděli z proměnných `divka, zn7`.

Ještě k charakteristikám podmíněnosti. Největší index podmíněnosti 48,330 z modelu s obojími průměrnými známkami založený na zhodnocení korelační matice (absolutní člen nás nezajímá) se zmenší na 2,158 u zjednodušeného modelu:

```
> ind.podm <- function(A) {e <- eigen(A); e$val[1]/e$val}
> ind.podm(cor(cbind(pohlavi,zn7,zn8)))
[1]  1.000000  2.859583 48.330483
> ind.podm(cor(cbind(pohlavi,zn7)))
[1] 1.000000 2.157806
```

○

11. Hledání modelu

V následující kapitole uvedeme některé charakteristiky a postupy, které lze použít v souvislosti s hledáním modelu. Nepochybně není na škodu připomenout, že nejlepší je situace, kdy model je odvozen z představy o fungování vyšetřovaných dějů. Je-li to možné, takovému postupu je třeba vždy dát přednost. To se týká také plánování pokusu (pro jaké hodnoty nezávisle proměnné zjišťovat hodnotu závisle proměnné).

11.1. Dvě kritéria

Nejprve provedeme dvě obecné úvahy o praktických možnostech srovnání modelu a podmodelu jinak než testem podmodelu.

11.1.1. Silné kritérium

Připomeňme si větu 7.2. Tehdy jsme při porovnávání standardního modelu s nějakých obsáhlejším modelem zjistili, že menší klasický model nedá horší střední čtvercové chyby, pokud je čtverec délky vychýlení nejvýše roven rozptylu (tj. $||\mathsf{bias}\,\hat{\mathbf{Y}}||^2 \leq \sigma^2$). Předpokládejme nyní, že vektory parametrů $\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}$ jsou oba odhadnutelné, což je zaručeno například tím, že matice $\mathbf{X}$ a $\mathbf{MZ}$ mají lineárně nezávislé sloupce, tj. platí $\mathsf{h}(\mathbf{X}) = k + 1$ a $\mathsf{h}(\mathbf{MZ}) = m$. Pod m si můžeme představovat počet nových regresorů v matici $\mathbf{Z}$.

Podle (7.10) vyjádříme vychýlení odhadu $\hat{\mathbf{Y}}$ jako $-\mathbf{MZ}\boldsymbol{\gamma}$ a do tohoto výrazu za $\boldsymbol{\gamma}$ i za σ^2 dosadíme běžné odhady, dostaneme *silné kritérium*

$$||\mathbf{MZ}\mathbf{c}_g||^2 \leq S_g^2. \tag{11.1}$$

Nyní tuto nerovnost vyjádříme praktičtějším způsobem. Protože podle (8.8) platí $RSS - RSS_g = ||\mathbf{MZ}\mathbf{c}_g||^2$, má testová statistika podmodelu (zde je jím klasický model) tvar

$$F = \frac{||\mathbf{MZ}\mathbf{c}_g||^2/m}{S_g^2}. \tag{11.2}$$

Silné kritérium je tedy ekvivalentní s požadavkem

$$F \leq \frac{1}{m}. \tag{11.3}$$

V běžném regresním výstupu máme vedle odhadů jednotlivých regresních koeficientů uvedeny t statistiky. Můžeme je nějak v souvislosti s ověřováním (11.3) použít?

Připomeňme, že platí (7.18), takže varianční matici odhadu $\mathbf{c}_g$ můžeme odhadnout pomocí $\widehat{\mathsf{var}}\,\mathbf{c}_g = S_g^2(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z})^{-1}$. Proto platí

$$(\mathbf{c}_g)'\left(\widehat{\mathsf{var}}\,\mathbf{c}_g\right)^{-1}\mathbf{c}_g = \frac{1}{S_g^2}(\mathbf{c}_g)'\left(\mathbf{Z}'\mathbf{M}\mathbf{Z}\right)\mathbf{c}_g = \frac{||\mathbf{M}\mathbf{Z}\mathbf{c}_g||^2}{S_g^2} = mF.$$

Se silným kritériem je ekvivalentní nerovnost $\mathbf{c}_g'\left(\widehat{\mathsf{var}}\,\mathbf{c}_g\right)^{-1}\mathbf{c}_g \leq 1$. Podle věty A.8 je tato nerovnost ekvivalentní s tím, že matice $\widehat{\mathsf{var}}\,\mathbf{c}_g - \mathbf{c}_g\mathbf{c}_g'$ je pozitivně semidefinitní. K tomu je ale nutné (ale nemusí stačit), aby všechny diagonální prvky této matice byly nezáporné, tedy aby pro všechny t statistiky pro testy hypotéz, že je $\gamma_j = 0$, platilo

$$T_{\gamma_j} = \frac{|c_{gj}|}{\sqrt{\left(\widehat{\mathsf{var}}\,\mathbf{c}_g\right)_{jj}}} = \frac{|c_{gj}|}{\mathsf{S.E.}(c_{gj})} \leq 1. \tag{11.4}$$

Odtud plyne užitečný závěr: *mezi kandidáty na „zbytečné“ regresory ve smyslu silného kritéria mohou patřit jen takové, u nichž je t statistika nejvýše rovna jedničce.*

11.1.2. Slabé kritérium

Když se nebudeme zajímat o všechny lineární funkce parametrů $\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}$ (s tím je ekvivalentní vyšetřování $\hat{\mathbf{Y}}$), ale jen o kombinace „vyzkoušené“ v datech, můžeme porovnat střední čtvercové chyby odhadů $(\mathbf{x}_{i\bullet})'\mathbf{b}$ a $(\mathbf{x}_{i\bullet})'\mathbf{b}_g + (\mathbf{z}_{i\bullet})'\mathbf{c}_g$ pro lineární funkce parametrů $(\mathbf{x}_{i\bullet})'\boldsymbol{\beta} + (\mathbf{z}_{i\bullet})'\boldsymbol{\gamma}$, kde $i = 1, \ldots, n$.

Zajímá nás tedy, kdy bude splněn požadavek (*slabé kritérium*)

$$\sum_{i=1}^{n} \mathsf{MSE}\left(\hat{Y}_i\right) \leq \sum_{i=1}^{n} \mathsf{MSE}\left(\hat{Y}_{gi}\right). \tag{11.5}$$

Po dosazení postupně tento požadavek upravíme na

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}\left(\mathsf{var}\,\hat{Y}_i + (\mathsf{bias}\,\hat{Y}_i)^2\right) &\leq \sum_{i=1}^{n}\mathsf{var}\,\hat{Y}_{gi},\\
\sum_{i=1}^{n}\left(\sigma^2 h_{ii} + ((-\mathbf{m}_{i\bullet})'\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma})^2\right) &\leq \sum_{i=1}^{n}\sigma^2 h_{gii},\\
\sigma^2(k+1) + ||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}||^2 &\leq \sigma^2(k+1+m).
\end{aligned} \tag{11.6}$$

Výsledkem je tedy požadavek

$$||\mathbf{MZ}\gamma||^2 \leq m\sigma^2, \tag{11.7}$$

který nahradil podobný požadavek (11.1) silného kritéria. Protože se obě nerovnosti liší pouze koeficientem m na pravé straně (11.7), je zřejmé, že nerovnost (11.3) můžeme v případě slabého kritéria nahradit požadavkem $F \leq 1$ a nutnou podmínku (11.4) slabším požadavkem $|T_{\gamma_j}| \leq \sqrt{m}$.

Mezi kandidáty na „zbytečné“ regresory ve smyslu slabého kritéria mohou patřit jen takové, u nichž je t statistika nejvýše rovna $\sqrt{m}$.

11.2. Porovnání modelu a podmodelu

Zde shrneme zpravidla již známá tvrzení o možnostech porovnání kvality modelu a podmodelu.

11.2.1. Reziduální součet čtverců RSS

Podle (8.8) víme, že platí

$$RSS_g = RSS - ||\mathbf{MZc}_g||^2 \leq RSS,$$

takže reziduální součet čtverců v podmodelu je zdola omezen reziduálním součtem čtverců v modelu. Přejdeme-li k podmodelu, nemůže reziduální součet čtverců klesnout.

11.2.2. Koeficient determinace R^2

Vzhledem ke vztahu mezi RSS_g a RSS platí

$$R_g^2 = 1 - \frac{RSS_g}{||\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}||^2} \geq 1 - \frac{RSS}{||\mathbf{Y} - \bar{Y}\mathbf{1}||^2} = R^2.$$

Při zjednodušení modelu na podmodel nemůže koeficient determinace vzrůst. Uspořádání posloupnosti do sebe vřazených podmodelů podle klesajícího koeficientu determinace je stejné, jako uspořádání týchž podmodelů podle rostoucího reziduálního součtu čtverců.

11.2.3. Reziduální rozptyl S^2

Nejprve vyjádříme požadavky silného a slabého kritéria pomocí nestranných odhadů rozptylu v modelu a podmodelu. Pomocí obou reziduálních součtů čtverců můžeme statistiku F ze vztahu (11.2) upravit postupně jako

$$\begin{aligned} F &= \frac{RSS - RSS_g}{RSS_g} \frac{n-k-1-m}{m} \\ &= \frac{(n-k-1)S^2 - (n-k-1-m)S_g^2}{mS_g^2} \\ &= \frac{n-k-1}{mS_g^2}\left(S^2 - S_g^2\right) + 1, \end{aligned} \tag{11.8}$$

takže požadavek slabého kritéria lze zapsat jako $S^2 \leq S_g^2$.

Podobně požadavek silného kritéria $F \leq 1/m$ vede k nerovnosti

$$(n-k-1)S^2 - (n-k-1-m)S_g^2 \leq S_g^2,$$

která je ekvivalentní s nerovností

$$S^2 \leq \frac{n-k-m}{n-k-1} S_g^2. \tag{11.9}$$

O možnostech splnění poslední nerovnosti vypoví následující úvaha. Nerovnost $RSS_g \leq RSS$ je ekvivalentní s nerovností $(n-k-1-m)S_g^2 \leq (n-k-1)S^2$, která dá omezení zdola pro odhad rozptylu S^2, které je téměř totožné s omezením shora uvedeným v (11.9). Platí-li silné kritérium, musí být současně splněny nerovnosti

$$\frac{n-k-1-m}{n-k-1} S_g^2 \leq S^2 \leq \frac{n-k-m}{n-k-1} S_g^2.$$

Je vidět, že silné kritérium dává jen velmi málo „svobody“ pro možné hodnoty reziduálního rozptylu S^2.

11.2.4. Adjustovaný koeficient determinace R^2_{adj}

Klasický koeficient determinace R^2 lze vyjádřit pomocí odhadů rozptylu metodou maximální věrohodnosti v modelu a ve speciálním podmodelu, který má pouze absolutní člen, totiž $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} = \mathbf{1}\gamma$, jako

$$R^2 = 1 - \frac{RSS/n}{\sum(Y_i - \bar{Y})^2/n} = 1 - \frac{\hat{\sigma}^2}{\hat{\sigma}_0^2}.$$

Když nyní nahradíme odhady metodou maximální věrohodností příslušnými nestrannými odhady, dostaneme *adjustovaný (upravený) koeficient determinace*

$$R^2_{adj} = 1 - \frac{RSS/(n-k-1)}{\sum(Y_i - \bar{Y})^2/(n-1)} = 1 - \frac{n-1}{n-k-1}\left(1 - R^2\right).$$

Protože lze tento koeficient vyjádřit jako monotonní funkci výběrového rozptylu S^2 (S^2_0 je odhad rozptylu v podmodelu)

$$R^2_{adj} = 1 - \frac{S^2}{S^2_0},$$

je uspořádání posloupnosti do sebe vnořených podmodelů podle klesajícího upraveného koeficientu determinace stejné, jako podle rostoucího výběrového rozptylu.

11.2.5. Mallowsovo C_p

Myšlenka statistiky C_p je založena na porovnání odhadu celkové střední čtvercové chyby z (11.5) s „bezpečným“ odhadem rozptylu.

Nechť platí „bezpečný“ model $\mathbf{Y} \sim (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}+\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}, \sigma^2\mathbf{I})$. Použijeme-li střední hodnotu $\mathsf{E}\,RSS$ ze vztahu (7.9), dostaneme v předpokládaném modelu s úplnou hodností vztah

$$\mathsf{E}\,RSS = (n-k-1)\sigma^2 + ||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}||^2.$$

Když vyjádříme celkovou střední chybu podle (11.6), dostaneme

$$\sum_{i=1}^{n} \mathsf{MSE}\,(\hat{Y}_i) = (k+1)\sigma^2 + ||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}||^2.$$

Když ze dvou posledních rovnic vyloučíme neznámý čtverec délky vychýlení $||\mathbf{M}\mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma}||^2$ a celkovou střední čtvercovou chyby podělíme rozptylem, dostaneme

$$\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n} \mathsf{MSE}\,(\hat{Y}_i) = \frac{(k+1)\sigma^2 + \mathsf{E}\,RSS - (n-k-1)\sigma^2}{\sigma^2} = 2(k+1) - n + \frac{\mathsf{E}\,RSS}{\sigma^2}.$$

Nahradíme-li nyní neznámý rozptyl σ^2 jeho nestranným odhadem S^2_g a střední hodnotu statistiky RSS její skutečnou hodnotou, dostaneme *Mallowsovo* C_p

$$C_p = 2(k+1) - n + \frac{RSS}{S^2_g}. \tag{11.10}$$

Zbývá ukázat souvislost s nahoře uvedeným slabým kritériem. Použijme vyjádření F statistiky podle (11.8). Snadnou úpravou dostaneme

$$m(F-1) = \frac{n-k-1}{S^2_g}\left(S^2 - S^2_g\right) = \frac{RSS}{S^2_g} - (n-k-1) = C_p - k - 1.$$

Slabé kritérium $F \leq 1$ je tedy ekvivalentní s nerovností $C_p \leq k+1$. Protože je dále

$$m(F - \frac{1}{m}) = C_p - k - 2 + m,$$

je silné kritérium $F < 1/m$ ekvivalentní s požadavkem $C_p \leq k + 2 - m$.

11.2.6. Průměrný rozptyl předpovědi

Následující úvaha již není založena na porovnání modelu a podmodelu, už se nesnažíme model zjednodušit vylučováním některých regresorů. Tentokrát se budeme zamýšlet na přesností předpovědi budoucích pozorování,

Pro každý řádek matice $\mathbf{X}$ máme předpovídat nové pozorování $Y(\mathbf{x}_{i\bullet})$, nezávislé na těch, s jejichž pomocí jsme odhadli všechny parametry. Bodovým odhadem bude samozřejmě $\hat{Y}_i$. Ovšem rozptyl chyby předpovědi $\hat{Y}_i - Y(\mathbf{x}_{i\bullet})$ bude $\sigma^2 h_{ii} + \sigma^2$. Součet těchto rozptylů (celkový rozptyl) je tedy roven výrazu

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sigma^2\left(1+h_{ii}\right)=\sigma^2\left(1+\frac{k+1}{n}\right).$$

Když ještě neznámý parametr σ^2 nahradíme jeho nestranným odhadem S^2, dostaneme statistiku

$$J_k = S^2\left(1+\frac{k+1}{n}\right), \tag{11.11}$$

která na rozdíl od samotného rozptylu penalizuje počet parametrů použitých v modelu.

11.2.7. Akaikeho informační kritérium

V poslední době se k porovnání různých modelů často používá funkce založená na logaritmu odhadu rozptylu zvětšeném o penalizaci počtu odhadovaných parametrů (viz Anděl (1998, str. 187)). Akaikeho informační kritérium bylo navrženo jako

$$AIC = -2\ell(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + 2q,$$

kde ℓ je logaritmická věrohodnostní funkce a q je počet složek maximálně věrohodného odhadu $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. V případě lineárního normálního modelu se *známým* rozptylem σ^2 po dosazení do logaritmické věrohodnostní funkce dostaneme

$$AIC = n\log 2\pi\sigma^2 + \frac{RSS}{\sigma^2} + 2r,$$

což se až na konstantu velice podobá Malowsovu C_p.

Pokud odhadujeme také rozptyl σ^2, dostaneme (funkce `AIC()` v R)

$$\begin{aligned} AIC &= n\left(1+\log(2\pi)+\log(RSS)-\log(n)\right)+2(r+1) \\ &= n\left(1+\log(2\pi\widehat{\sigma^2})\right)+2(r+1), \end{aligned} \tag{11.12}$$

kde $\widehat{\sigma^2}$ je odhad σ^2 metodou maximální věrohodnosti a r je hodnost matice $\mathbf{X}$. V případě modelu s úplnou hodností a s absolutním členem je tedy $r = k + 2$ (nezapomeňme na to, že i σ^2 je pak odhadovaným parametrem).

11.2.8. Odhad stupně polynomu

Nechť je závislost $\mathsf{E}\,Y$ na nezávisle proměnné x popsána polynomem $\beta_0 + \beta_1 x + \ldots + \beta_k x^k$, přičemž platí $\beta_k \neq 0$. Máme k disposici $n > k+1$ nezávislých pozorování

$$Y_i = \sum_{j=0}^{k} \beta_j x^j + e_i,$$

kde $e_i \sim \mathsf{N}(0, \sigma^2)$. Předpokládáme, že stupeň k polynomu neznáme, že je dalším neznámým parametrem. V parametru k je úloha nelineární. V tomto odstavci popíšeme některé metody, které vedou ke konzistentnímu odhadu tohoto parametru.

Připomeňme vztah (7.12) z věty 7.1, podle kterého reziduální rozptyl nadhodnocuje skutečný rozptyl v případě, že použitý model opomíjí některé regresory, které skutečně ovlivňují střední hodnotu závisle proměnné. Na druhé straně, když použijeme některé regresory zbytečně, odhad rozptylu zůstane nestranným.

Zdálo by se tedy, že stačí odhadovat regresní modely postupně s rostoucím stupněm a skončit tehdy, když reziduální rozptyly (označíme je S_k^2) přestanou klesat, kdy začnou kolísat kolem nějaké konstanty. Tento postup ale nevede ke konzistentnímu odhadu stupně polynomu. Je třeba nějak penalizovat počet parametrů.

Kupodivu, i když statistika J_k z (11.11) se o takovou penalizaci snaží, nestačí to, minimalizace J_k přes stupeň polynomu nevede ke konzistentnímu odhadu. Podobně nemusí vést ke správné hodnotě ani Akaikeho kritérium z (11.12) (Anděl, 1998, odst. 12. 3.).

Ke konzistentním odhadům vede minimalizace řady funkcí, například

$$A(k) = S_k^2 \left(1 + c(k+1)n^{-\alpha}\right), \qquad \alpha \in (0,0{,}5), c > 0, \tag{11.13}$$

$$SR(k) = \log S_k^2 + (k+1)\frac{\log n}{n}, \tag{11.14}$$

$$HQ(k) = \log S_k^2 + 2c(k+1)\frac{\log\log n}{n}, \quad c > 0. \tag{11.15}$$

11.3. Sekvenční postupy

Běžně používané programové vybavení nabízí zpravidla automatizovaný výběr regresorů z množiny možných regresorů, které zvolí uživatel. K tomu se používají v zásadě dva postupy a zejména jejich kombinace.

11.3.1. Sestupný výběr

Nejprve se spočítá nejbohatší model, pak se jednotlivé regresory postupně z modelu vylučují. V každém kroku se vylučuje takový regresor, který v daném modelu nejméně přispívá k vysvětlení. Označme symbolem t_j hodnotu t statistiky pro test hypotézy, že v daném modelu je koeficient u j-tého regresoru nulový. Zpravidla k rozhodování se používá čtverec této statistiky $F_j = t_j^2$. Končí se tehdy, když všechny tyto F statistiky pro vyloučení jsou větší, než nějaké předem zvolené kritické číslo F^{**}. Někdy se nevolí přímo toto číslo, ale spíš číslo α^{**}, z něhož se kritické číslo odvodí jako kritická hodnota $F^{**} = F_{1,n-k-1}(\alpha)$.

11.3.2. Vzestupný výběr

Jde o pravý opak předchozího postupu. Vyjde se z „prázdné“ množiny regresorů, do níž se pak v každém kroku přidá vždy ten z ještě nezařazených regresorů, který v daném kroku co možná nejlépe zlepší vysvětlení závisle proměnné. Představme si, že bychom zkusili jeden regresor vložit a jako F_j označíme čtverec t statistiky pro jeho vyloučení. V daném kroku vložíme takový regresor z dostupných kandidátů, u něhož je hodnota F největší. Skončíme, když toto F není dost velké, když je menší, než předem zvolené F^*. Také zde lze postup někdy řídit volbou α^*, z něhož se vlastní kritické číslo odvozuje.

11.3.3. Kroková regrese

Kroková (stepwise) regrese kombinuje oba právě popsané postupy. Vzestupný výběr je v každém kroku kombinován pokusem o zjednodušení pomocí sestupného výběru. Kdyby ovšem bylo $F^* \leq F^{**}$, mohlo by se stát, že dojde k zacyklení algoritmu, kdy bude právě vložený regresor okamžitě vyloučen, poté znovu vložen, vyloučen atd. Musí tedy být $F^* > F^{**}$, což je ekvivalentní s požadavkem $\alpha^* < \alpha^{**}$.

Každá z popsaných metod může dát jiný výsledný model, kromě jiného závisí také na volbě kritických čísel F^*, F^{**} resp. α^*, α^{**}. Výsledný model lze považovat nejvýše za doporučení, nikoliv za nějaký důkaz. Zejména u krokové regrese se doporučuje najít několik téměř optimálních modelů a pokusit se najít mezi nimi ten, který má nejlepší interpretaci.

11.3.4. Kroková volba modelu v R

V programu R je k dispozici procedura `step()`, která hledá model s nejmenší hodnotou AIC. Ve výstupu je však uváděna hodnota AIC z (11.12) zmenšená o konstantu $n + n\log(2\pi) + 2$. Jako ukázku hledejme v příkladu procento tuku nejlepší vysvětlení procenta tuku pomocí dostupných veličin:

```
> a<-step(lm(fat~1),
     scope=list(lower=~1,upper=~react+height+weight+pulse+diast))

Start:  AIC= 193.16
 fat ~ 1

         Df Sum of Sq     RSS     AIC
+ weight  1   1546.01  741.65  138.84
+ height  1    270.06 2017.60  188.88
+ react   1    129.92 2157.74  192.24
<none>                2287.66  193.16
+ pulse   1     21.06 2266.59  194.70
+ diast   1      0.57 2287.09  195.15

Step:  AIC= 138.84
 fat ~ weight

         Df Sum of Sq     RSS     AIC
+ pulse   1    111.52  630.14  132.70
+ height  1     87.32  654.33  134.58
<none>                741.65  138.84
+ diast   1      2.92  738.73  140.65
+ react   1      2.87  738.79  140.65
- weight  1   1546.01 2287.66  193.16

Step:  AIC= 132.7
 fat ~ weight + pulse

         Df Sum of Sq     RSS     AIC
+ height  1    101.53  528.61  125.91
<none>                630.14  132.70
+ diast   1      7.52  622.62  134.10
+ react   1      0.55  629.59  134.65
- pulse   1    111.52  741.65  138.84
- weight  1   1636.46 2266.59  194.70

Step:  AIC= 125.91
 fat ~ weight + pulse + height

         Df Sum of Sq     RSS     AIC
<none>                528.61  125.91
+ react   1      0.94  527.66  127.82
+ diast   1      0.78  527.82  127.84
- height  1    101.53  630.14  132.70
- pulse   1    125.73  654.33  134.58
- weight  1   1485.84 2014.44  190.80
> summary(a)

Call: lm(formula = fat ~ weight + pulse + height)
```

```
Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-5.17474 -2.89827  0.09504  1.47482  7.63024

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  6.66934   14.17048   0.471  0.64011
weight       0.55847    0.04911  11.371 5.85e-15
pulse        0.12020    0.03635   3.307  0.00184
height      -0.26330    0.08858  -2.973  0.00469

Residual standard error: 3.39 on 46 degrees of
freedom Multiple R-Squared: 0.7689,     Adjusted
R-squared: 0.7539 F-statistic: 51.03 on 3 and 46
DF,  p-value: 1.126e-14
```

Z výpisu je patrné, jak se algoritmus v každém kroku pokusil přidat postupně každou proměnnou mimo stávající model a také ubrat každou proměnnou ze stávajícího modelu. Skončil tehdy, když žádná taková *jednokroková* změna nevede ke zmenšení AIC. Standardně má totiž parametr `direction` hodnotu `"both"`. Lze však nastavit vzestupný (`"forward"`) i setupný (`"backward"`) výběr.

Je třeba upozornit, že dosažené hodnoty u jednotlivých proměnných v modelu získané pomocí `summary(a)` je třeba interpretovat velice opatrně. Kdybychom dokázali vzít v úvahu cestu, jakou jsme došli v výslednému modelu, byly by tyto hodnoty nepochybně větší.

11.4. Praxe hledání modelu

Pokud hledáme pouze možnost predikce hodnot závisle proměnné, zpravidla nám dobře poslouží ten nejbohatší model. Zde je vhodné připomenout tvrzení věty 10.1, podle které je velký rozdíl v přesnosti odhadů $\hat{\mathbf{Y}}$ a $\mathbf{b}$.

Velmi často nás však zajímá vliv zvoleného regresoru nebo chceme modelovat vzájemné vztahy veličin. Potom je naším cílem odhadnout některý regresní koeficient či některé regresní koeficienty.

11.4.1. Interakce a confounding

Velmi často je při vyšetřování závislosti nějaké veličiny y na regresoru x třeba vzít v úvahu také další veličiny, které budeme v tomto odstavci značit symbolem z. Je

při tom třeba rozlišovat dvě různé situace.

Interakce (effect modification) je taková situace, kdy skutečná hodnota veličiny z ovlivňuje závislost y na x. Interakce v tom nejjednodušším případě vyjadřují pomocí součinu $x \cdot z$. Příkladem by mohlo být například vyšetřování závislosti platu na délce praxe, když se zjistí, že směrnice příslušné přímky je jiná u mužů a jiná u žen. Kdyby byly přímky rovnoběžné, byl by vliv veličin *délka praxe* a *pohlaví* aditivní. Každý rok praxe by v průměru přidal stejnou částku k platu mužům i ženám. Vliv délky praxe by naopak byl modifikován proměnnou pohlaví, kdyby tyto průměrné přírůstky byly u mužů a u žen různé.

Jiná situace se popisuje anglickým slovem *confounding*. K matení dochází tehdy, když vedle nezávisle proměnné x a závisle proměnné y existuje jiná (matoucí) veličina z, která ovlivňuje y nezávisle na hodnotě x, přičemž sama z také souvisí s x. Neexistuje však příčinný řetězec $x \to z \to y$. Příkladem může být výskyt rakoviny jícnu y (měřený například počtem onemocnění na 100 000 obyvatel), který je ovlivňován podílem x kuřáků v populaci a současně spotřebou alkoholu z. Tyto dvě doprovodné veličiny spolu nepochybně také souvisí.

Jiným příkladem je tolikrát zmiňovaná závislost procenta tuku o mužů y v závislosti na výšce x a hmotnosti z. Dá se očekávat, že pro každou zvolenou hmotnost z bude s rostoucí výškou procento tuku klesat, takže jistě nejde o interakci. Ovšem, když vyšetřujeme závislost procenta tuku na výšce bez ohledu na hmotnost, skutečná závislost procenta tuku na výšce bude „překryta“ závislostí procenta na hmotnosti, protože hmotnost s výškou souvisí také.

Skutečnost, že se přihlédlo k závislosti na další veličině či veličinách se vyjadřuje slovy, že závislost byla adjustována vůči něčemu (adjusted for), že bylo přihlédnuto k závislosti ...

O nějaké veličině začneme uvažovat jako o matoucí teprve tehdy, když jsme vyloučili možnost interakcí.

11.4.2. Hierrarchicky dobře formulované modely (HWD)

S každou mocninou veličiny musí být v modelu všechny mocniny nižšího stupně, se součinem veličin musí být v modelu také všechny složky tohoto součinu.

Důvod k tomuto požadavku na hierarchicky dobře formulované hypotézy (Hierarchically Well-Formulated) je prostý. Zajistíme tak nezávislost na parametrizaci úlohy. Ukažme to na jednoduchém příkladu. Model kvadratické závislosti

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$$

vyjádříme pomocí nové nezávisle proměnné t zavedené vztahem $x = \delta(t - \varphi)$. Po dosazení postupně dostaneme

$$\begin{aligned} y &= \beta_0 + \beta_1 \delta(t - \varphi) + \beta_2 \left(\delta(t - \varphi)\right)^2 \\ &= (\beta_0 - \beta_1 \delta\varphi + \beta_2 \delta^2 \varphi^2) + (\beta_1 \delta - 2\beta_2 \delta^2 \varphi)t + \beta_2 \delta^2 t^2 \\ &= \gamma_0 + \gamma_1 t + \gamma_2 t^2. \end{aligned}$$

Kdybychom připustili model pouze s kvadratickým členem, bez členu lineárního, tj. s $\beta_1 = 0$, potom by se po netriviální lineární transformaci nezávisle proměnné tento člen v modelu znovu objevil. Podobnou úvahu bychom mohli udělat pro součin nezávisle proměnných.

11.4.3. Vyjádření nominální veličiny s více než dvěma hodnotami

Pokud střední hodnota závisle proměnné může být závislá na hodnotě nějakého nominálního znaku (faktoru), zpravidla v regresním modelu používáme umělé proměnné. U dvouhodnotového faktoru vystačíme s jedinou nula-jedničkovou veličinou, u faktoru s q různými hodnotami použijeme $q - 1$ umělých proměnných, z nichž j-tá je rovna jedničce právě, když faktor nabyl své $(j + 1)$. hodnoty. Koeficient u j-té umělé proměnné interpretujeme jako opravu absolutního členu, který popisuje závislost pro základní hodnotu faktoru (nepřísluší mu žádná umělá proměnná) na absolutní člen pro závislost při j-té hodnotě faktoru.

Při hledání modelu je třeba dodržovat pravidlo, že v modelu jsou a nebo nejsou současně zařazeny buď všechny umělé proměnné k jednomu faktoru nebo žádná z nich.

Čtenář si jistě uvědomil, že jsme právě použili reparametrizaci založenou na `contr.treatment`, která je u běžných faktorů v prostředí R nastavena standardně. Analogicky bychom mohli použít i jinou z nabízených reparametrizací.

11.4.4. Tři fáze (Kleinabaumův postup)

Podle Davida G. Kleinbauma (1994) se při hledání vhodného modelu použijí postupně tři fáze: najde se dobrý výchozí model, vyloučí se některé interakce, při vylučování dalších nezávisle proměnných se identifikují matoucí proměnné. Při zjednodušování modelu se dodržují obě dosud zmíněná pravidla: pravidlo hierarchicky dobře definovaného modelu a pravidlo o umělých proměnných.

Před provedením prvního kroku se samozřejmě seznámíme se všemi dostupnými modely, které se pokusily osvětlit vyšetřovanou závislost.

V prvním kroku zařadíme do modelu všechny dostupně proměnné, které by *mohly přispět* k vysvětlení variability závisle proměnné. Vedle proměnné x, jejíž vliv na střední hodnotu závisle proměnné nás zajímá, do modelu zařadíme také její druhou mocninu, pokud připouštíme možnost nelineární závislosti na x, dále všechny další doprovodné veličiny z, případně také součiny typu $x \cdot z$, které modelují možné interakce. Výjimečně se uvažují také mocniny veličin z, případně součiny typu $x \cdot z^2$. Při tom všem je třeba dbát na to, aby výsledek příliš neovlivnila multikolinearita. Další možností, jak sestavit vhodný výchozí model, je použít vhodně transformace závisle proměnné y a zejména x a z.

Ve druhém kroku se snažíme eliminovat interakční členy, tedy ty členy, které obsahují x a některá z. Při tom používáme standardní statistické testování. Dopo-

ručuje se nejprve se pokusit vyloučit naráz všechny takové členy.

Po ukončení druhého kroku si poznamenáme odhady regresních koeficientů u x a interakčních členů $x \cdot z$ a jejich střední chyby. Cílem třetího kroku je dál co nejvíc zjednodušit model, zmenšit střední chyby odhadů koeficientů u x a $x \cdot z$, ale jen tak, aby se odhad koeficientu u x číselně příliš nezměnil.

Pokud ve druhém kroku v modelu zůstal interakční člen, je situace složitější, protože příliš závisí na hodnotách doprovodné proměnné z z interakčního členu. Abychom se dostali k minimalizaci jedné střední chyby, zvolíme „typickou“ hodnotu veličin x a z z interakčního členu a zajímáme se o odhad střední hodnoty y pro tuto hodnotu.

Za přijatelnou změnu se považuje změna do pěti až deseti procent výsledného odhadu z druhého kroku. Při vlastním zjednodušování modelu ve třetím kroku se vůbec nezajímáme o statistickou významnost vylučovaných členů, zejména necháme v modelu ty „nevýznamné“ členy, po jejichž vyloučení by došlo k velké změně odhadů.

11.5. Transformace

Při práci s reálnými daty se mnohdy musíme uchýlit k transformacím. Pokud učiníme bohatším množinu možných středních hodnot tak, že jako regresor použijeme funkci některé nezávisle proměnné, nejde o nový problém. Ostatně polynomy patří mezi takové funkce také. Kvalitativně velmi odlišná situace nastane, když transformujeme závisle proměnnou.

11.5.1. Boxova-Coxova transformace

Boxova-Coxova transformace je pro kladné y zavedena předpisem

$$y^{(\lambda)} = \begin{cases} (y^\lambda - 1)/\lambda & \lambda \neq 0, \\ \log y & \lambda = 0. \end{cases} \tag{11.16}$$

Snadno se ověří, že funkce $y^{(\lambda)}$ je spojitou funkcí proměnné λ i v bodě 0.

Vektor se složkami $y_i^{(\lambda)}$ označíme symbolem $\mathbf{y}^{(\lambda)}$. Běžný lineární model modifikujeme tak, že předpokládáme (aspoň přibližnou) platnost

$$\mathbf{Y}^{(\lambda)} \sim \mathsf{N}\big(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I}\big). \tag{11.17}$$

Všechny parametry modelu (vedle $\boldsymbol{\beta}$ a σ^2 také λ) odhadneme metodou maximální věrohodnosti. Uvážíme-li, že platí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} y^{(\lambda)} = y^{\lambda-1},$$

je logaritmická věrohodnostní funkce netransformovaného náhodného vektoru $\mathbf{Y}$ rovna

$$\ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \lambda) = -\frac{n}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i^{(\lambda)} - (\mathbf{x}_{i\bullet})'\boldsymbol{\beta}\right)^2 + n(\lambda-1)\log\dot{Y},$$

kde $\dot{Y}$ je geometrický průměr hodnot $Y_1, \ldots, Y_n$. Pro pevné λ minimalizuje tuto funkci odhad metodou nejmenších čtverců $\mathbf{b}^{(\lambda)}$ v modelu (11.17).

Pokusme se však o poněkud jiné vyjádření, kde by v logaritmické věrohodnostní zmizel (nestandardní) poslední člen. Abychom jej zařadili do prvního členu se σ^2, musíme tento rozptyl nahradit výrazem

$$\left(\frac{\sigma}{\dot{Y}^{\lambda-1}}\right)^2.$$

Tomu ovšem odpovídá úprava součtu čtverců pomocí veličin $Z_i^{(\lambda)} = Y_i^{(\lambda)}/\dot{Y}^{\lambda-1}$ a nového vektoru parametrů $\boldsymbol{\gamma}^{(\lambda)} = (1/\dot{Y}^{\lambda-1})\boldsymbol{\beta}^{(\lambda)}$. Přejdeme tedy pro dané λ formálně k modelu

$$\mathbf{Z}^{(\lambda)} \sim \mathsf{N}\left(\mathbf{X}\boldsymbol{\gamma}^{(\lambda)}, \left(\frac{\sigma}{\dot{Y}^{\lambda-1}}\right)^2 \mathbf{I}\right)$$

a provedeme pouze jednorozměrnou minimalizaci reziduálního součtu čtverců $RSS_Z(\lambda)$ v posledním modelu. Reziduální součet čtverců původního modelu je dán jednoduchým vztahem

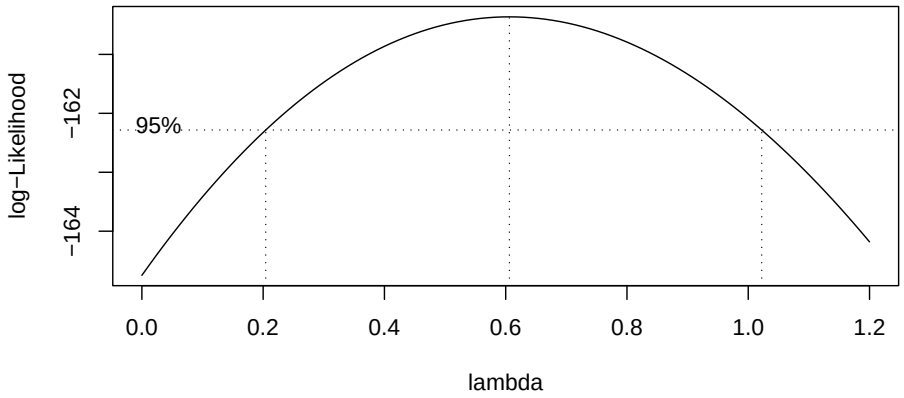
$$RSS_Y(\lambda) = \dot{Y}^{2(\lambda-1)} RSS_Z(\lambda),$$

který vyplývá například ze zvolené transformace z $Y^{(\lambda)}$ na $Z^{(\lambda)}$. Když použijeme asymptotickou vlastnost odhadu $\hat{\lambda}$ metodou maximální věrohodnosti a vyjádříme-li hodnotu věrohodnostní funkce pomocí reziduálního součtu čtverců (viz (A.28)), můžeme hledat řešením nerovnosti

$$RSS_Z(\lambda) \leq RSS_Z(\hat{\lambda})\exp(\chi_1^2(\alpha)/n),$$

kde $\chi_1^2(\alpha)$ je kritická hodnota rozdělení χ_1^2, přibližný interval spolehlivosti pro λ.

Příklad 11.1 (procento tuku) V příkladu 8.1 jsme se zabývali závislostí procenta tuku v těle mladých mužů na jejich výšce a hmotnosti. při podrobnější analýze řešení narazíme na možné problémy, kdy je téměř průkazná závislost rozptylu na výšce. Zkusme tedy hledat vhodnou mocninu procenta tuku, kterou bychom vysvětlovali. Použití funkce `boxcox(lm(fat~height+weight,data=Police),lambda=ll)` (kde `ll<-seq(0,1.2,length=101)`) z knihovny `MASS` dá obrázek 11.1, z něhož usuzujeme, že vhodnou volbou bude $\lambda = 0{,}6$, i když hodnota $\lambda = 1$, která znamená identickou transformaci, patří také do 95% intervalu spolehlivosti. Zmíněná knihovna `MASS` doprovází velmi pěknou knihu Venables, Ripley (1997). ◯



Obrázek 11.1: Maximálně věrohodný odhad parametru λ Boxovy-Coxovy transformace s vyznačeným 95% intervalem spolehlivosti

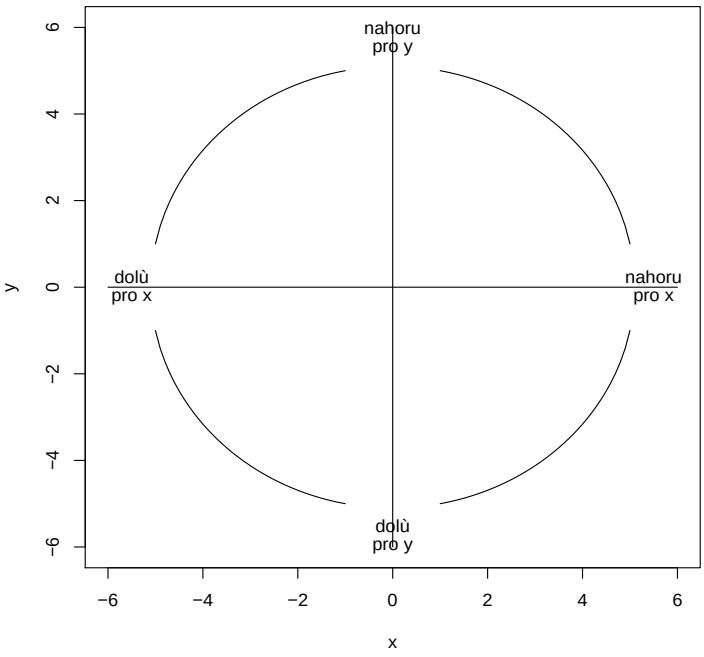
11.5.2. Žebřík transformací

Při hledání vhodné transformace pro závislost závisle proměnné s kladnými hodnotami na jediné nezávisle proměnné s kladnými hodnotami je užitečnou pomůckou posloupnost mocninných transformací

$$\ldots, -1/x^2, -1/x, -1/\sqrt{x}, \log x, \sqrt{x}, x, x^2, \ldots.$$

Po tomto žebříku transformací se můžeme pohybovat buď nahoru (k vyšším mocninám) nebo dolů. Cílem je především linearizace závislosti. Když dosáhneme pohybem po zvoleném žebříku (na ose x nebo ose y) přibližně lineární závislosti, potom současným pohybem po obou žebřících se pokusíme také o stabilizaci rozptylu.

Při volbě směru pohybu, který má vést k lineárnímu průběhu, je užitečný obrázek 11.2. Například když je závislost konvexní a rostoucí, k linearizaci vede zvyšování mocnin proměnné x nebo snižování mocnin proměnné y.



Obrázek 11.2: Linearizující transformace

12. Model nelineární regrese

Až doposud jsme se zabývali lineárním modelem, tedy takovým případem, kdy je množina všech možných středních hodnot vektoru $\mathbf{Y}$ lineární. Předpokládali jsme dokonce, že je $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$, i když v zásadě jsme mohli předpokládat, že platí $\mathsf{E}\,\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$ pro nějaké pevné známé $\boldsymbol{\mu}$.

12.1. Předpoklady

V dalším budeme předpokládat, že platí:

a) $\mathbf{Y} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) + \mathbf{e}$, kde $\mathbf{e} \sim \mathsf{N}\big(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}\big)$ a $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) = (f(x_1, \boldsymbol{\theta}), \ldots, f(x_n, \boldsymbol{\theta}))'$, přičemž $f(x, \boldsymbol{\theta})$ je známá *regresní* funkce,

b) $\boldsymbol{\theta} \in \Omega$, kde parametrický prostor $\Omega \in \mathbb{R}^k$ je otevřená konvexní množina,

c) funkce $f_j(x, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial}{\partial\theta_j} f(x, \boldsymbol{\theta})$ a $f_{jt}(x, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial^2}{\partial\theta_j \partial\theta_t} f(x, \boldsymbol{\theta})$ jsou pro všechna $x \in \mathcal{X}$ spojitou funkcí $\boldsymbol{\theta}$,

d) matice prvních derivací regresní funkce typu $n \times k$ daná vztahem $F(\boldsymbol{\theta}) = (f_j(x_i, \boldsymbol{\theta}))$ má přinejmenším v okolí správné hodnoty parametru $\boldsymbol{\theta}$ hodnost k.

Zaveďme funkci

$$\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - f(x_i, \boldsymbol{\theta})\right)^2 .$$

Odhad metodou nejmenších čtverců $\mathbf{t}$ je takový prvek Ω, který minimalizuje $S(\boldsymbol{\theta})$. Jako odhad rozptylu použijeme (podobně jako u lineárního modelu)

$$S^2 = \frac{\mathcal{S}(\mathbf{t})}{n - k}.$$

Protože jsme předpokládali normální rozdělení, je $\mathbf{t}$ odhadem metodou nejmenších čtverců a S^2 je asymptoticky ekvivalentní s odhadem rozptylu metodou maximální věrohodnosti daným $\mathcal{S}(\mathbf{t})/n$.

V bodě $\mathbf{t}$, který minimalizuje na otevřené množině Ω funkci $\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})$, by měl být vektor parciálních derivací nulový, což vede k *normální rovnici*

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta})'(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})) = \mathbf{0}. \tag{12.1}$$

Je dobré porovnat tuto rovnici s normální rovnicí (**??**) pro logistickou regresi, kde je rozdíl $\mathbf{Y} - \mathsf{E}\,\mathbf{Y}$ je násoben maticí konstant $\mathbf{X}'$, kdežto zde matice $\mathbf{F}(\theta)'$ je funkcí odhadovaného parametru. Stejně jednoduchou rovnici jako v případě logistické regrese dostaneme v každém zobecněném lineárním modelu s kanonickou spojovací funkcí (viz (**??**)).

12.2. Lineární aproximace

Pro $\boldsymbol{\theta}$, které je dostatečně blízko správné hodnoty $\boldsymbol{\theta}^*$, můžeme použít aproximace

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) \doteq \mathbf{f}^* + \mathbf{F}^*(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^*), \tag{12.2}$$

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}) \doteq \mathbf{F}^*, \tag{12.3}$$

když jsme zavedli stručný zápis

$$\mathbf{f}^* = \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^*), \qquad \mathbf{F}^* = \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^*).$$

Dosaďme uvedené aproximace do normální rovnice

$$\begin{aligned}\mathbf{0} &\doteq \mathbf{F}^{*'}(\mathbf{Y} - \mathbf{f}^* - \mathbf{F}^*(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^*)) \\ &\doteq \mathbf{F}^{*'}(\mathbf{e} - \mathbf{F}^*(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^*)).\end{aligned}$$

Odtud je

$$\mathbf{t} \doteq \boldsymbol{\theta}^* + (\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^*)^{-1}\mathbf{F}^{*'}(\mathbf{Y} - \mathbf{f}^*),$$

odkud máme aproximaci pro rozdělení odhadu $\mathbf{t}$

$$\mathbf{t} \mathrel{\dot\sim} \mathsf{N}\Big(\boldsymbol{\theta}^*, \sigma^2(\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^*)^{-1}\Big). \tag{12.4}$$

Pro reziduální součet čtverců $\mathcal{S}(\mathbf{t})$ dostaneme podobně

$$\begin{aligned}\mathcal{S}(\mathbf{t}) &= ||\mathbf{Y} - \mathbf{f}^* - \mathbf{F}^*(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^*)||^2 \\ &= ||(\mathbf{I} - \mathbf{F}^*(\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^*)^{-1}\mathbf{F}^{*'})\mathbf{e}||^2 \mathrel{\dot\sim} \sigma^2\chi^2_{n-k}.\end{aligned}$$

Protože jsou $\mathbf{t}$ a $\mathcal{S}(\mathbf{t})$ asymptoticky nezávislé a protože je $\mathbf{t}$ konzistentním odhadem $\boldsymbol{\theta}^*$, aproximuje se pro každé $j = 1, \ldots, k$ rozdělení výrazu

$$\frac{t_j - \theta_j^*}{S\sqrt{v_{jj}}}, \tag{12.5}$$

rozdělením t_{n-k}. Při tom jsme použili označení $\mathbf{V} = (\mathbf{F}(\mathbf{t})'\mathbf{F}(\mathbf{t}))^{-1}$.

12.3. Testování jednoduché hypotézy o θ

Věnujme se nyní testování hypotézy $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^0$, která úplně určuje vektor regresních koeficientů. V souvislosti s tím nalezneme konfidenční množiny pro tento vektor. Použití aproximací způsobí, že testy i konfidenční množiny budou pouze přibližné.

Pokud je regresní funkce $f(x, \boldsymbol{\theta})$ lineární v $\boldsymbol{\theta}$, jsou dále uvedené konfidenční množiny $\mathcal{K}_W, \mathcal{K}_{LR}$ totožné s konfidenční množinou (2.26).

Waldův test

Waldův test je založen na hodnocení toho, nakolik odhad $\mathbf{t}$ metodou maximální věrohodnosti vyhovuje omezení $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^0$, které klade testovaná hypotéza.

Z předchozího výkladu (zejména z (12.4)) plyne, že za platnosti nulové hypotézy má statistika

$$\frac{(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^0)' \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0)' \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0)(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^0)}{kS^2},$$

přibližně rozdělení $\mathsf{F}_{k,n-k}$. Proto je přibližný kritický obor dán nerovností

$$(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^0)' \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0)' \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0)(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^0) \geq k\ S^2 F_{k,n-k}(\alpha).$$

Chceme-li hledat interval spolehlivosti pro $\boldsymbol{\theta}$, nejjednodušší řešení dostaneme, když v matici $\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta})' \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta})$ použijeme konzistentní odhad $\mathbf{t}$ parametru $\boldsymbol{\theta}$. Odpovídající přibližná konfidenční množina má tedy tvar

$$\mathcal{K}_W = \left\{ \boldsymbol{\theta} \in \Omega : (\boldsymbol{\theta} - \mathbf{t})' \mathbf{F}(\mathbf{t})' \mathbf{F}(\mathbf{t})(\boldsymbol{\theta} - \mathbf{t}) < k\ S^2 F_{k,n-k}(\alpha) \right\}. \tag{12.6}$$

Pro každé $\mathbf{t}$ jde o elipsoid se středem v bodě $\mathbf{t}$.

Waldův test lze takto použít, jen když je nelinearita úlohy dostatečně zanedbatelná.

Test poměrem věrohodnosti

Test poměrem věrohodnosti porovnává hodnotu věrohodnostní funkce pro $\mathbf{t}$ a $\boldsymbol{\theta}^0$. Logaritmická věrohodnostní funkce je při předpokládaném normálním rozdělení rovna

$$\ell(\boldsymbol{\theta}, \sigma^2) = c - \frac{n}{2} \log \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}).$$

K testování hypotézy použijeme vlastnost testu poměrem věrohodnosti, podle které (při známém rozptylu σ^2) má rozdíl $2(\ell(\mathbf{t}, \sigma^2) - \ell(\boldsymbol{\theta}^0, \sigma^2))$ asymptoticky rozdělení χ^2_k. Nyní použijeme místo neznámého σ^2 jeho odhad S^2, takže za platnosti testované hypotézy přibližně platí

$$\frac{\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}^0) - \mathcal{S}(\mathbf{t})}{kS^2} \sim \mathsf{F}_{k,n-k}.$$

Proto je přibližný kritický obor dán nerovností

$$S(\boldsymbol{\theta}^0) \geq \mathcal{S}(\mathbf{t}) + kS^2 F_{k,n-k}(\alpha).$$

Když navíc vyjádříme odhad S^2 pomocí $\mathcal{S}(\mathbf{t})$, dostaneme přibližnou konfidenční množinu ve tvaru

$$\mathcal{K}_{LR} = \left\{ \boldsymbol{\theta} \in \Omega : \mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) < \mathcal{S}(\mathbf{t}) \left(1 + \frac{k}{n-k} F_{k,n-k}(\alpha) \right) \right\}. \tag{12.7}$$

Tato konfidenční množina má obecně složitější tvar. Obsahuje takové hodnoty $\boldsymbol{\theta}$, pro něž funkční hodnota $\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})$ nepřekračuje příliš minimální možnou hodnotu $\mathcal{S}(\mathbf{t})$. Dovolené překročení je určeno výrazem v kulaté závorce v (12.7).

Přesný test

V tomto oddílu naznačíme, jak by bylo možno sestavit kritický obor přesného testu. Jak ale uvidíme, metoda má jen velmi omezené použití.

Nechť platí nulová hypotéza $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^0$, nechť $\mathbf{H}$ je nějaká pevná idempotentní matice typu $n \times n$ hodnosti k. Potom má výraz

$$F_H = \frac{(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^0))' \mathbf{H} (\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^0))}{(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^0))' (\mathbf{I} - \mathbf{H}) (\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^0))} \frac{n-k}{k}$$

rozdělení $\mathsf{F}_{k,n-k}$. Snadno tedy sestrojíme kritický obor testu, který má *přesně* zvolenou hladinu α. Je však třeba, aby matice $\mathbf{H}$ byla zvolena tak, aby test měl také co největší sílu.

Jednou z možností je *nezávisle na* $\mathbf{Y}$ zvolit vektory $\boldsymbol{\theta}^1, \ldots, \boldsymbol{\theta}^k$ tak, aby matice

$$\mathbf{X} = \Big(\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^1) - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^0), \ldots, \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^k) - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^0) \Big)$$

měla hodnost k. Potom má matice

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$$

požadované vlastnosti. Lze ukázat, že test založený na F_H je citlivý vůči alternativám $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta}^j$, $j = 1, \ldots, k$.

Jinou možností je použít projekční matici

$$\mathbf{H}^0 = \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0)(\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0)'\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0))^{-1}(\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}^0))'.$$

12.4. Testování složené hypotézy

Rozdělme nyní parametr $\boldsymbol{\theta}$ na dvě složky jako $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\gamma}', \boldsymbol{\delta}')'$. Testujeme nulovou hypotézu $\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\delta}^0$, kde $\boldsymbol{\delta}^0 \in \mathbb{R}^q$ je pevný vektor.

První řešení založíme na Waldově postupu. Podobně jako $\boldsymbol{\theta}$ rozdělme odhad metodou nejmenších čtverců $\mathbf{t} = (\mathbf{c}', \mathbf{d}')'$ a také přibližnou varianční matici odhadu

$$\sigma^2 \mathbf{V} = \sigma^2 \left((\mathbf{F}(\mathbf{t}))' \mathbf{F}(\mathbf{t}) \right)^{-1} = \sigma^2 \begin{pmatrix} \mathbf{V}_{\gamma\gamma} & \mathbf{V}_{\gamma\delta} \\ \mathbf{V}_{\delta\gamma} & \mathbf{V}_{\delta\delta} \end{pmatrix}.$$

Speciálním případem přibližného rozdělení $\mathbf{t}$ z (12.4) je $\mathbf{d} \sim \mathsf{N}\big(\boldsymbol{\delta}, \sigma^2 \mathbf{V}_{\delta\delta}\big)$ a zejména přibližný interval spolehlivosti pro $\boldsymbol{\delta}$ (protějšek eliptické konfidenční množiny podle (12.6))

$$\left\{ \boldsymbol{\delta} : (\mathbf{d} - \boldsymbol{\delta})' \mathbf{V}_{\delta\delta}^{-1} (\mathbf{d} - \boldsymbol{\delta}) < q S^2 F_{q,n-k}(\alpha) \right\}.$$

Speciálním případem pro $q = 1$ jsou přibližné intervaly spolehlivosti

$$\big(t_j - S\sqrt{v_{jj}} t_{n-k}(\alpha), t_j + S\sqrt{v_{jj}} t_{n-k}(\alpha) \big)$$

založené na přímém použití (12.5).

Další možné řešení, které vychází z testu poměrem věrohodnosti, je výpočetně náročnější. Nechť $\tilde{\mathbf{c}}(\boldsymbol{\delta})$ je odhad vektoru $\boldsymbol{\gamma}$ pro dané $\boldsymbol{\delta}$. Označme $\tilde{\mathbf{t}} = \tilde{\mathbf{t}}(\boldsymbol{\delta}) = (\tilde{\mathbf{c}}(\boldsymbol{\delta})', \boldsymbol{\delta}')'$. Platí-li nulová hypotéza $\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\delta}^0$, pak má statistika

$$2 \left(\ell(\mathbf{t}) - \ell(\tilde{\mathbf{t}}(\boldsymbol{\delta}^0)) \right) = \frac{1}{\sigma^2} \left(\mathcal{S}(\tilde{\mathbf{t}}(\boldsymbol{\delta}^0)) - \mathcal{S}(\mathbf{t}) \right)$$

asymptoticky rozdělení χ^2_q. Použijeme-li opět konzistentní odhad S^2 parametru σ^2, dostaneme přibližný kritický obor

$$\mathcal{S}\left(\tilde{\mathbf{t}}(\boldsymbol{\delta}^0)\right) \geq \mathcal{S}(\mathbf{t}) + q S^2 F_{q,n-k}(\alpha)$$

tj.

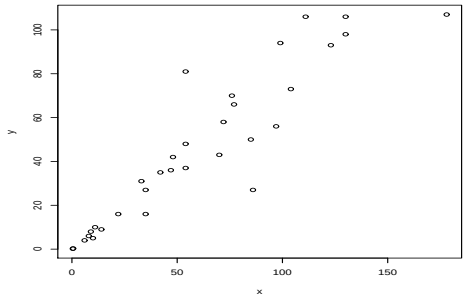
$$\mathcal{S}\left(\tilde{\mathbf{t}}(\boldsymbol{\delta}^0)\right) \geq \mathcal{S}(\mathbf{t}) \left(1 + \frac{q}{n-k} F_{q,n-k}(\alpha) \right).$$

Interval spolehlivosti by tedy byl

$$\left\{ \boldsymbol{\delta} : \mathcal{S}\left(\tilde{\mathbf{t}}(\boldsymbol{\delta})\right) < \mathcal{S}(\mathbf{t}) \left(1 + \frac{q}{n-k} F_{q,n-k}(\alpha) \right) \right\}.$$

Speciálně pro $q = 1$ označme $\tilde{\mathbf{t}}_j(\theta)$ vektor parametrů, který minimalizuje $\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})$ za podmínky, že $\theta_j = \theta$. Potom má výraz

$$\tau(\theta) = \frac{\sqrt{\mathcal{S}(\tilde{\mathbf{t}}_j(\theta)) - \mathcal{S}(\mathbf{t})}}{S} \operatorname{sign}(\theta - t_j)$$



Obrázek 12.1: Farmakologická závislost

přibližně rozdělení $\mathtt{t}_{n-k}$. V normálním lineárním modelu s úplnou hodností to platí přesně, jak plyne z (3.18).

Odtud lze opět nalézt přibližný interval spolehlivosti pro θ_j. Míra nelinearity je patrná z *profilového diagramu*, který znázorňuje body $[\theta, \tau(\theta)]$ (případně $[\theta, |\tau(\theta)|]$) v okolí bodového odhadu t_j parametru θ_j.

Příklad 12.1 Farmakolog vyšetřuje u dat znázorněných na obrázku 12.1 závislost tvaru

$$f(x;\beta,\gamma) = \frac{1}{\gamma}\left(x + (625-x)\left(1-\exp(\beta x/(625-x))\right)\right).$$

Výpočet pomocí standardní knihovny `stat` programu R dal

```
> a.Kan<-nls(y~(x+(625-x)*(1-exp(-b*x/(625-x))))/c,
                                    start=list(b=5,c=10),data=In.Kan)
> summary(a.Kan)

Formula: y ~ (x + (625 - x) * (1 - exp(-b * x/(625 - x))))/c

Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b    2.417      1.317   1.836  0.07629 .
c    3.881      1.081   3.591  0.00116 **
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 13.34 on 30 degrees of freedom

Correlation of Parameter Estimates:
       b
c 0.9883
```

```
> plot(profile(a.Kan))
```

Z výstupu je vidět, že je-li platná použitá lineární aproximace, parametr β není průkazně nenulový. Za hypotézy $\beta = 0$ bychom dostali přímku. O případné silné nelinearitě se můžeme přesvědčit na profilových diagramech (obr. 12.2), které jsme připravili posledním příkazem, když jsme před jeho použitím nastavili výstupní grafické okno programu R tak, aby si jednotlivé obrázky systém zapamatoval. Z grafů je patrné, že v úloze silně se projevuje nelinearita. Například intervaly spolehlivosti pro γ budou velmi nesymetrické vzhledem k bodovému odhadu. (Na obrázku jsou znázorněny intervaly spolehlivosti se spolehlivostí po řadě 99 %, 95 %, 90 %, 80 % a 50 %).

O hypotéze, že $\beta = 0$ můžeme rozhodovat také pomocí přibližného F-testu, který porovná reziduální součty čtverců.

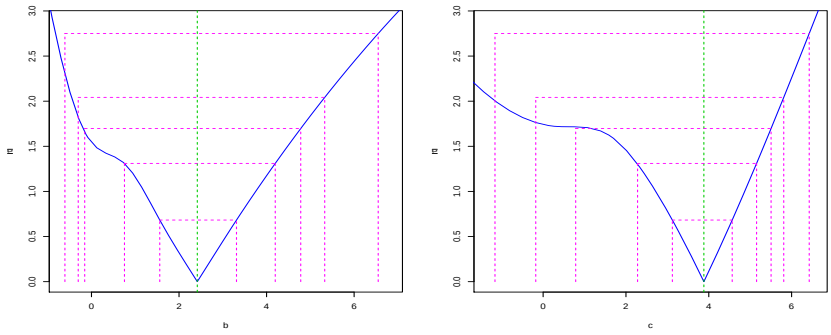
```
> ap.Kan<-nls(y~x/c,start=list(c=1),data=In.Kan)
> summary(ap.Kan)

Formula: y ~ x/c

Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
c  1.34890    0.05897   22.87   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 13.71 on 31 degrees of freedom

> anova(ap.Kan,a.Kan)
Analysis of Variance Table

Model 1: y ~ x/c
Model 2: y ~ (x + (625 - x) * (1 - exp(-b * x/(625 - x))))/c
  Res.Df Res.Sum Sq Df Sum Sq F value Pr(>F)
1     31     5829.6
2     30     5341.0  1  488.6  2.7447  0.108
```

Jak je patrno, přímka je možným modelem pro naše data.

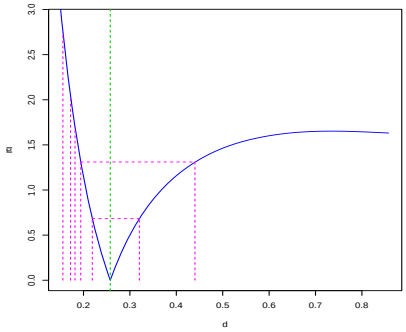
Původně byla úloha parametrizována jinak, místo γ byl v definici regresní funkce parametr $\delta = 1/\gamma$, takže regresní funkce byla v δ lineární. Přesto bylo chování odhadů δ mnohem méně lineární, jak naznačuje obrázek 12.3. ◯

12.5. Inverzní predikce

V kapitole 4.4 jsme se zabývali úlohou nalézt k dané hodnotě závisle proměnné odpovídající hodnotu (v modelu jediné) závisle proměnné. S podobným požadav-



Obrázek 12.2: Profilové diagramy pro parametry β (vlevo) a γ (vpravo)



Obrázek 12.3: Profilový diagram pro parametry $\delta = 1/\gamma$

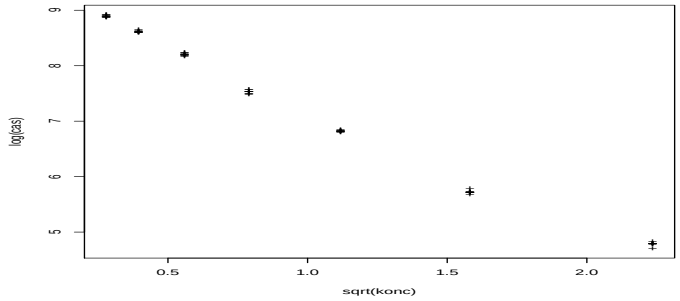
kem se lze setkat i v nelineární regresi, ovšem za předpokladu, že regresní funkce je monotonní v jediné nezávisle proměnné. Nejspíš se s takovou úlohou setkáme u kalibrace.

Na obrázku 12.4 jsou znázorněny časové odezvy na různé koncentrace zkoumané látky. Měřítka byla zvolena tak, aby hodnoty závisle proměnné měly přibližně konstantní rozptyl a závislost byla přibližně lineární. Na diagramu reziduí se snadno ukáže, že i po těchto transformacích nebude závislost lineární. Mírně esovitý průběh vedl k modifikované logistické funkci

$$f(x;\boldsymbol{\beta}) = \beta_1 + \frac{\beta_2}{1+\exp(\beta_3 x + \beta_4)}. \tag{12.8}$$

Abychom mohli použít funkci `nls()`, definovali jsme nejprve odpovídající regresní funkci příkazem

```
> regf4 <- deriv(~b1+b2/(1+exp(b3*x+b4)),
```



Obrázek 12.4: Závislost logaritmu času na odmocnině koncentrace

```
c("x","b1","b2","b3","b4"),fun=function(x,b1,b2,b3,b4){}).
```

Výsledný model dal příkaz

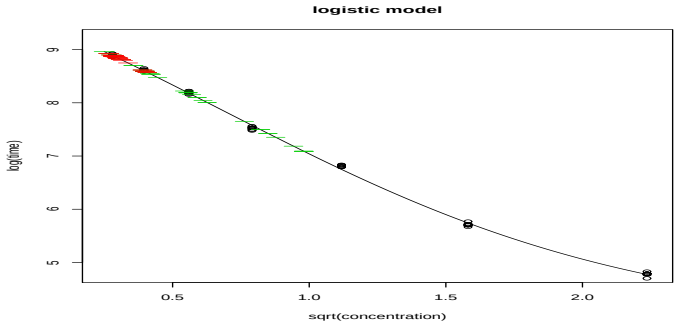
```
g.nls <- nls(logCas~c(regf4(sqrtKonc,b1,b2,b3,b4)),
           start=c("b1"=4.5,"b2"=4.5,"b3"=-1,"b4"=1),
           data=d,subset=soubor==0)
```

Podrobnosti o odhadu udává

```
> summary(g.nls)

Formula: logCas ~ c(regf4(sqrtKonc, b1, b2, b3, b4))

Parameters:
   Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b1 11.87310    0.35612  33.340  < 2e-16 ***
b2 -8.04184    0.44667 -18.004  < 2e-16 ***
b3 -1.30171    0.07204 -18.069  < 2e-16 ***
b4  0.89198    0.11811   7.552 1.68e-10 ***
---

Residual standard error: 0.04184 on 66 degrees of freedom

Correlation of Parameter Estimates:
        b1      b2      b3
b2 -0.9955
b3  0.9783 -0.9919
b4 -0.9988  0.9925 -0.9768
```

Odhadnutou závislost použijeme k určení neznámých koncentrací, u nichž jsme zjistili časové odezvy. Jde tedy o odhad hodnoty nezávisle proměnné při známé

realizaci závisle proměnné. V původní úloze šlo navíc o porovnání placeba se skutečným léčivem. Na obrázku 12.5 jsou znázorněny zejména přibližné 95% intervaly spolehlivosti pro hledané logaritmy koncentrací.



Obrázek 12.5: Intervaly spolehlivosti pro neznámé koncentrace

13. Parametrizace v NLR

V nelineární regresi se setkáme s novým jevem v porovnání s regresí lineární. Když použijeme aproximace jemnější, než lineární, zjistíme, že odhad vektoru parametrů $\boldsymbol{\theta}$ obecně není nestranný a že jeho vychýlení závisí na tom, jak jsme regresní funkci vyjádřili pomocí parametrů.

13.1. Označení

Rozšiřme označení zavedené v odstavci 12.2. Symbolem $\ddot{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\theta})$ označíme trojrozměrnou matici typu $n \times k \times k$ danou vztahem

$$\ddot{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{\theta}'}\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) \tag{13.1}$$

$$= \left(\ddot{\mathbf{F}}_{i\bullet\bullet}(\boldsymbol{\theta})\right)_{i=1,\ldots,n} = \left(\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{\theta}'} f(x_i,\boldsymbol{\theta})\right)_{i=1,\ldots,n} \tag{13.2}$$

$$= \left(\ddot{\mathbf{f}}_{\bullet jr}(\boldsymbol{\theta})\right)_{j,r=1,\ldots,k} = \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta_j\partial\theta_r}\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})\right)_{j,r=1,\ldots,k}. \tag{13.3}$$

Matici $\ddot{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\theta})$ si můžeme představit jako trojrozměrný objekt se čtvercovou základnou a výškou n, jehož i-tá vrstva je tvořena maticí $\ddot{\mathbf{F}}_{i\bullet\bullet}$ a jr-tý sloupec vektorem $\ddot{\mathbf{f}}_{\bullet jr}$. Podobně jako dříve označíme $\ddot{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\theta}^*)$ symbolem $\ddot{\mathbf{F}}^*$.

Jako kvadratickou aproximaci vektoru $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})$ použijeme

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) \doteq \mathbf{f}^* + \mathbf{F}^*(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}^*) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}^*)'\ddot{\mathbf{F}}^*(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}^*). \tag{13.4}$$

Jde o rozšíření lineární aproximace (12.3) o kvadratický člen, v němž se při násobení trojrozměrné matice $\ddot{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\theta})$ provádí součin přes druhý a třetí rozměr.

Ukažme si budoucí problémy na dvou velmi jednoduchých příkladech.

Příklad 13.1 Mějme regresní funkci $f(x,\theta) = \mathrm{e}^{x\theta}$. Zvolíme-li $\beta = \mathrm{e}^{\theta}$, můžeme stejnou funkci zapsat jako $\tilde{f}(x,\beta) = \beta^x$. Je tedy

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\theta} f(x,\theta) &= x\mathrm{e}^{x\theta} \;=\; x f(x,\theta),\\
\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} f(x,\theta) &= x^2\mathrm{e}^{x\theta} \;=\; x^2 f(x,\theta),\\
\frac{\partial}{\partial\beta} \tilde{f}(x,\beta) &= x\beta^{x-1} \;=\; \frac{x}{\beta}\tilde{f}(x,\beta),\\
\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} f(x,\beta) &= x(x-1)\beta^{x-2} \;=\; \frac{x(x-1)}{\beta^2}\tilde{f}(x,\beta).
\end{aligned}$$

Zvolíme-li $x_1 = 0$, $x_2 = 1$, bude

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(\theta) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{e}^{\theta} \end{pmatrix}, & \mathbf{F}(\theta) &= \begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{e}^{\theta} \end{pmatrix}, & \ddot{\mathbf{F}}(\theta) &= \begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{e}^{\theta} \end{pmatrix},\\
\tilde{\mathbf{f}}(\beta) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \end{pmatrix}, & \tilde{\mathbf{F}}(\beta) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \ddot{\tilde{\mathbf{F}}}(\beta) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Zvolíme $\theta^\star = 0$, čemuž odpovídá $\beta^\star = 1$. Výsledné *lineární* aproximace jsou

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(\theta) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{e}^{\theta} \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\theta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1+\theta \end{pmatrix},\\
\tilde{\mathbf{f}}(\beta) &= \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}(\beta - 1) = \begin{pmatrix} 1 \\ \beta \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Zatímco v prvním případě jde skutečně o aproximaci, ve druhém případě máme místo aproximace identitu. Zvolíme-li $\theta \neq 0$ a odpovídající $\beta = \mathrm{e}^{\theta}$, budou vektory $\mathbf{f}(\theta)$ a $\tilde{\mathbf{f}}(\beta)$ neshodné. Dále stojí za povšimnutí, že množina aproximujících vektorů je v obou případech stejná. ◯

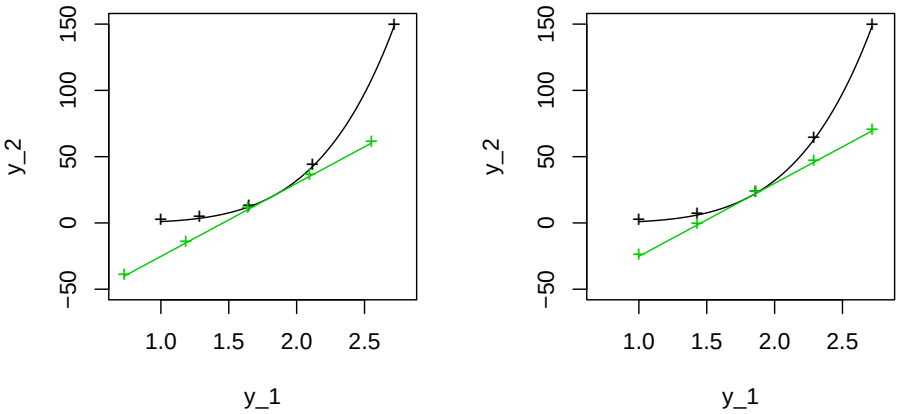
Příklad 13.2 Zvolme nyní pro stejné funkce $f, \tilde{f}$ jako v příkladu 13.1, ale $x_1 = 1$ a $x_2 = 3$, dostaneme poněkud jiné matice

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(\theta) &= \begin{pmatrix} e^{\theta} \\ \mathrm{e}^{3\theta} \end{pmatrix}, & \mathbf{F}(\theta) &= \begin{pmatrix} e^{\theta} \\ 3\mathrm{e}^{3\theta} \end{pmatrix}, & \ddot{\mathbf{F}}(\theta) &= \begin{pmatrix} e^{\theta} \\ 9\mathrm{e}^{3\theta} \end{pmatrix},\\
\tilde{\mathbf{f}}(\beta) &= \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^3 \end{pmatrix}, & \tilde{\mathbf{F}}(\beta) &= \begin{pmatrix} 1 \\ 3\beta^2 \end{pmatrix}, & \ddot{\tilde{\mathbf{F}}}(\beta) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 6\beta \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

a také jiné aproximace

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(\theta) &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\theta} \\ \mathrm{e}^{3\theta} \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}\theta = \begin{pmatrix} 1+\theta \\ 1+3\theta \end{pmatrix},\\
\tilde{\mathbf{f}}(\beta) &= \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^3 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}(\beta - 1) = \begin{pmatrix} \beta \\ 3\beta - 2 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Na obrázku 13.1 jsou znázorněny části množin možných středních hodnot. Zvlášť jsou vyznačeny střední hodnoty pro lineárně se měnící parametry θ (vlevo) a β (vpravo). Všimněte si, že odstupy těchto bodů nejsou stejné, na pravém obrázku se tolik nemění. Dále je zajímavé porovnat, jak si navzájem odpovídají dvojice bodů na křivce (množina možných středních hodnot) a aproximující přímce. Parametrizace pomocí β vypadá lépe, vzdálenosti mezi sobě odpovídajícími body nejsou tak veliké. ◯



Obrázek 13.1: Množiny možných středních hodnot z příkladu 13.2

13.2. Odhad vychýlení

Nyní se pokusíme vyjádřit vychýlení odhadu $\mathbf{t}$. Učiníme to nepřímo tak, že porovnáme lineární a kvadratickou aproximaci.

Další postup založíme na následujícím předpokladu: *Střední hodnota průmětu vektoru* $\mathbf{f}(\mathbf{t})$ *do tečné nadroviny k množině možných středních hodnot v bodě* $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^*)$ *je rovna* $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^*)$.

Použijme nyní kvadratickou aproximaci (13.4) na odhad $\mathbf{t}$ a vynásobme rozdíl $\mathbf{f}(\mathbf{t}) - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^*)$ maticí $\mathbf{H}^* = \mathbf{F}^* \left(\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^*\right)^{-1} \mathbf{F}^{*'}$. Aplikujeme-li na tento součin střední

hodnotu, dostaneme

$$\mathbf{0} \doteq \mathbf{F}^* \mathsf{bias}\,(\mathbf{t}) + \frac{1}{2}\mathbf{H}^* \mathsf{E}\,(\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)' \ddot{\mathbf{F}}^* (\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)\,.$$

Spočítejme nyní i-tou složku vektoru $\mathsf{E}\,(\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)' \ddot{\mathbf{F}}^* (\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)$.

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}\,(\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)' \ddot{\mathbf{F}}^*_{i\bullet\bullet} (\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*) &= \mathsf{E}\,(\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)' \ddot{\mathbf{F}}^*_{i\bullet\bullet} (\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*) \\
&= \mathsf{tr}\, \ddot{\mathbf{F}}^*_{i\bullet\bullet} \mathsf{E}\,(\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)(\mathbf{t}-\boldsymbol{\theta}^*)' \\
&\doteq \sigma^2\, \mathsf{tr}\, \ddot{\mathbf{F}}^*_{i\bullet\bullet} \sigma^2 \left(\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^*\right)^{-1} \\
&= \sigma^2\, \mathsf{tr}\, \ddot{\mathbf{F}}^*_{i\bullet\bullet} \left(\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^*\right)^{-1} \\
&= \sigma^2 m_i.
\end{aligned}$$

Výslednou aproximaci pro vychýlení můžeme pomocí právě zavedeného vektoru $\mathbf{m}$ zapsat jako

$$\mathsf{bias}\,\boldsymbol{\theta} = -\frac{\sigma^2}{2}\left(\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^*\right)^{-1} \mathbf{F}^{*'}\mathbf{m}. \tag{13.5}$$

Příklad 13.3 (pokračování) Pokračujme v příkladu 13.1. Postupně spočítáme

$$\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^* = \mathrm{e}^{2\theta^*}, \qquad \mathbf{m}(\theta^*) = \mathrm{e}^{-2\theta^*}\begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{e}^{\theta^*} \end{pmatrix},$$

takže vychýlení odhadu t je dáno vztahem

$$\mathsf{bias}\, t = -\frac{\sigma^2}{2}\mathrm{e}^{-2\theta^*}.$$

Pro naše $\theta^* = 0$ vyjde $\mathsf{bias}\, t = -\sigma^2/2$. Parametrizace pomocí β vede k nestrannému odhadu parametru β bez ohledu na jeho hodnotu, neboť je nutně $\mathbf{m} = \mathbf{0}$. ◯

Příklad 13.4 (pokračování) Pokračujme v příkladu 13.2. Snadno zjistíme, že je

$$\mathbf{F}^{*'}\mathbf{F}^* = \mathrm{e}^{2\theta^*} + 9\mathrm{e}^{6\theta^*}$$

a také

$$\mathbf{m}(\theta^*) = \frac{1}{\mathrm{e}^{2\theta^*} + 9\mathrm{e}^{6\theta^*}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\theta^*} \\ 9\mathrm{e}^{3\theta^*} \end{pmatrix},$$

takže nakonec aproximace pro vychýlení je dána vztahem

$$\mathsf{bias}\, t = -\frac{\sigma^2}{2}\frac{\mathrm{e}^{2\theta^*} + 27\mathrm{e}^{6\theta^*}}{\left(\mathrm{e}^{2\theta^*} + 9\mathrm{e}^{6\theta^*}\right)^2}.$$

Speciálně pro $\theta^* = 0$ vyjde

$$\mathsf{bias}\, t = -\frac{\sigma^2}{2}\frac{28}{100}.$$

Analogické výpočty pro regresní funkci parametrizovanou pomocí β vede k aproximaci vychýlení

$$\mathsf{bias}\, b = -\frac{\sigma^2}{2}\frac{18\beta^{*3}}{(1+9\beta^{*4})^2},$$

což pro $\beta^* = 1$ vede k aproximaci vychýlení

$$\mathsf{bias}\, b = -\frac{\sigma^2}{2}\frac{18}{100}.$$

○

13.3. Dvojí parametrizace

V obou příkladech jsme porovnávali dvě parametrická vyjádření téže regresní funkce. Proveďme tuto úvahu obecněji.

Nechť $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{g}(\boldsymbol{\theta})$ je regulární a prosté zobrazení jednoho parametrického prostoru na druhý. To znamená, že existuje také inverzní zobrazení $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\beta})$ a že čtvercová matice řádu k

$$\mathbf{G}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}'}\mathbf{g}(\boldsymbol{\theta})$$

je regulární. Souvislost mezi dvěma parametrickými vyjádřeními lze popsat jako

$$f(x,\boldsymbol{\theta}) = f(x,\mathbf{g}^{-1}(\boldsymbol{\beta}) \equiv \tilde{f}(x,\boldsymbol{\beta}) = \tilde{f}(x,\mathbf{g}(\boldsymbol{\theta})).$$

Souvislost derivací podle parametrů v obou parametrických vyjádřeních je dána vztahem

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\theta_j}f(x,\boldsymbol{\theta}) &= \frac{\partial}{\partial\theta_j}\tilde{f}(x,\mathbf{g}(\boldsymbol{\theta})) \\ &= \sum_{r=1}^{k}\frac{\partial}{\partial\beta_r}\tilde{f}(x,\boldsymbol{\beta})\frac{\partial}{\partial\theta_j}g_r(x,\boldsymbol{\theta}).\end{aligned}$$

Pro matice prvních parciálních derivací pro $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{g}(\boldsymbol{\theta})$ odtud dostáváme

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}) = \tilde{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\beta})\mathbf{G}(\boldsymbol{\theta}). \tag{13.6}$$

Lineární obaly matic $\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta})$ a $\tilde{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\beta})$ jsou tedy totožné.

Odhad vektoru $\boldsymbol{\beta}$ metodou nejmenších čtverců je zřejmě roven $\mathbf{b} = \mathbf{g}(\mathbf{t})$. Podobně jako v (13.4) použijeme kvadratickou aproximaci a dostaneme

$$\mathbf{b} = \mathbf{g}(\mathbf{t}) \doteq \mathbf{g}(\boldsymbol{\theta}^*) + \frac{\partial \mathbf{g}(\boldsymbol{\theta}^*)}{\partial \boldsymbol{\theta}'} (\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^*) + \frac{1}{2} (\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^*)' \frac{\partial^2 \mathbf{g}(\boldsymbol{\theta}^*)}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}'} (\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}^*) .$$

Když aplikujeme na obě strany operátor střední hodnoty a použijeme vlastnost stopy matice, dostaneme po úpravách

$$\operatorname{bias} \mathbf{b} \doteq \mathbf{G}(\boldsymbol{\theta}^*) \operatorname{bias} \mathbf{t} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \operatorname{tr} \dfrac{\partial^2 g_1(\boldsymbol{\theta}^*)}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}'} \operatorname{var} \mathbf{t} \\ \vdots \\ \operatorname{tr} \dfrac{\partial^2 g_k(\boldsymbol{\theta}^*)}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}'} \operatorname{var} \mathbf{t} \end{pmatrix} .$$

Příklad 13.5 Tentokrát budeme vyšetřovat úlohu, klasicky řešenou dvouvýběrovým t testem. Mějme regresní funkci

$$f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 x + \theta_2 (1 - x),$$

přičemž $\theta_1 \neq 0$ a

$$x_i = \begin{cases} 1, & 1 \leq i \leq m, \\ 0, & m + 1 \leq i \leq n. \end{cases}$$

Máme vlastně dva nezávislé výběry z normálního rozdělení se středními hodnotami θ_1 a θ_2. Uvažujme vedloe toho ještě jiné parametrické vyjádření, totiž

$$\beta_1 = g_1(\theta_1, \theta_2) = \theta_1 \qquad \beta_2 = g_2(\theta_1, \theta_2) = \frac{\theta_2}{\theta_1}.$$

Matice prvních derivací transformačních funkcí $g_1(\boldsymbol{\theta}), g_2(\boldsymbol{\theta})$ má tedy tvar

$$\mathbf{G}(\theta_1, \theta_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\theta_2/\theta_1^2 & 1/\theta_1 \end{pmatrix} .$$

Vektory možných středních hodnot mají tvar

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} \theta_1 \mathbf{1} \\ \theta_2 \mathbf{1} \end{pmatrix}, \qquad \tilde{\mathbf{f}}(\boldsymbol{\beta}) = \begin{pmatrix} \beta_1 \mathbf{1} \\ \beta_1 \beta_2 \mathbf{1} \end{pmatrix} .$$

Protože vektory prvních parciálních derivací jsou

$$\frac{\partial f(x, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \begin{pmatrix} x \\ 1 - x \end{pmatrix}, \qquad \frac{\partial \tilde{f}(x, \boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} x + \beta_2 (1 - x) \\ \beta_1 (1 - x) \end{pmatrix},$$

můžeme matice prvních parciálních derivací zapsat jako

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}. \qquad \tilde{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\beta}) = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \beta_2\mathbf{1} & \beta_1\mathbf{1} \end{pmatrix},$$

Snadno se ověří, že náš předpoklad $\theta_1 \neq 0$ stačí k tomu, aby obě poslední matice generovaly týž prostor.

Pokusme se nyní určit aproximaci pro vychýlení odhadu $\mathbf{b}$ parametru $\boldsymbol{\beta}$ metodou nejmenších čtverců. Využijeme přitom vlastností odhadu θ, který je v naší úloze nestranný, jeho dvě složky jsou stochasticky nezávislé po řadě s rozptyly σ^2/m a σ^2/n. Snadno zjistíme, že je

$$\frac{\partial^2 g_1(\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{\theta}'} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \frac{\partial^2 g_2(\boldsymbol{\theta})}{\partial\boldsymbol{\theta}\partial\boldsymbol{\theta}'} = \begin{pmatrix} 2\theta_2/\theta_1^3 & -1/\theta_1^2 \\ -1/\theta 1^2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nás zajímá ještě výpočet

$$\mathsf{tr} \begin{pmatrix} 2\dfrac{\theta_2}{\theta_1^3} & -\dfrac{1}{\theta_1^2} \\ \dfrac{-1}{\theta_1^2} & 0 \end{pmatrix} \sigma^2 \begin{pmatrix} \dfrac{1}{m} & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{n-m} \end{pmatrix} = 2\sigma^2 \frac{\theta_2}{m\theta_1^3},$$

takže aproximace pro vychýlení odhadu $\mathbf{b}$ je rovna

$$\mathsf{bias} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \doteq \sigma^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \dfrac{\theta_2^*}{m\theta_1^{*3}} \end{pmatrix}.$$

Doporučuji zamyslet se nad skutečností, že vychýlení odhadu b_2 závisí na volbě měřítka, v němž provádíme měření. ◯

13.4. Míry křivosti

Křivost (nelinearitu) je třeba měřit. Uvedeme tedy míry křivosti a popíšeme jejich těsné spojení se skutečnou spolehlivostí konfidenčních množin (12.6) a (12.7).

Vlastní měření křivosti spočívá v porovnání lineární a kvadratické aproximace. Pro malé vektory $\mathbf{h}$ uvažujme bvektor středních hodnot v bodě $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta} + \tau\mathbf{h})$. Porovnejme tento vektor s jeho lineární a kvadratickou aproximací:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta} + \mathbf{h}) &\doteq \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) + \tau\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{h} + \frac{\tau^2}{2}\mathbf{h}'\ddot{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{h} \\ &\doteq \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) + \tau\dot{\mathbf{f}}_h + \frac{\tau^2}{2}\ddot{\mathbf{f}}_h, \end{aligned} \tag{13.7}$$

kde jsme zavedli označení pro vektor oprav lineární a kvadratické aproximaci. Oba vektory závisí na volbě nenulového vektoru $\mathbf{h}$.

Poznámka Udělejme malou odbočku a připomeňme eliptickou přibližnou konfidenční množinu pro θ (12.6) založenou na Waldově testu. Lineární aproximace vektoru středních hodnot $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})$ počítaná v bodě $\mathbf{f}(\mathbf{t})$ má tvar

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) \doteq \mathbf{f}(\mathbf{t}) + \mathbf{F}(\mathbf{t})(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta}).$$

Rozdíl $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) - \mathbf{f}(\mathbf{t})$ je tedy přibližně roven $\mathbf{F}(\mathbf{t})(\mathbf{t} - \boldsymbol{\theta})$, takže zmíněnou přibližnou konfidenční množinu (leží v *parametrickém* prostoru) lze přibližně vyjádřit také jako

$$||\boldsymbol{\mu} - \hat{\boldsymbol{\mu}}||^2 = ||\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) - \mathbf{f}(\mathbf{t})||^2 \leq kS^2 F_{k,n-k}(\alpha).$$

Ve *výběrovém* prostoru tedy jde o n-rozměrnou kouli s poloměrem $S\sqrt{k}\sqrt{F_{k,n-k}(\alpha)}$.

Vydělme tedy obě strany rovnice (13.7) konstantou $c = \sqrt{k}\sigma$ tak, abychom dostali kouli o poloměru $\sqrt{F_{k,n-k}(\alpha)}$. Použili jsme populační charakteristiku σ, abychom zavedli na datech nezávislou charakteristiku. Při reálném výpočtu samozřejmě neznámé σ nahradí jeho odhad S. Dosáhli jsme toho, že model nezávisí na fyzikálním rozměru proměnné Y.

Vyšetřovaná aproximace má nyní tvar

$$\frac{1}{c}\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta} + \tau\mathbf{h}) \doteq \frac{1}{c}\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) + \frac{\tau}{c}\dot{\mathbf{f}}_h + \frac{\tau^2}{2c}\ddot{\mathbf{f}}_h.$$

Vraťme se k porovnání lineární a kvadratické aproximace. Hodnotu konstanty τ zvolme tak, aby v lineární aproximaci byly body $(1/c)\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}+\tau\mathbf{h})$ a $(1/c)\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})$ byly od sebe v jednotkové vzdálenosti, tj. zvolme

$$\tau = \frac{c}{||\dot{\mathbf{f}}_h||}.$$

Dvojnásobek opravy kvadratické aproximace vůči lineární aproximaci bude tedy

$$\left(\frac{c}{||\dot{\mathbf{f}}_h||}\right)^2 \frac{1}{2c}\ddot{\mathbf{f}}_h = \frac{c}{||\dot{\mathbf{f}}_h||^2}\ddot{\mathbf{f}}_h = \frac{\sigma\sqrt{k}}{||\dot{\mathbf{f}}_h||^2}\ddot{\mathbf{f}}_h$$

Rozložíme jej do dvou složek, z nichž jedna je ortogonální vůči tečné nadrovině (označená horním indexem N) a rovnoběžné s touto nadrovinou (označená horním indexem T). Po dosazení za c dostaneme

$$\frac{\sigma\sqrt{k}}{||\dot{\mathbf{f}}_h||^2}\ddot{\mathbf{f}}_h^N + \frac{\sigma\sqrt{k}}{||\dot{\mathbf{f}}_h||^2}\ddot{\mathbf{f}}_h^T.$$

Velikosti těchto složek nazveme po řadě jako *vnitřní křivost* (intrinsic curvature) ve směru $\mathbf{h}$ (viz Bates, Watts (1980))

$$K_h^N = \frac{\sigma\sqrt{k}}{||\dot{\mathbf{f}}_h||^2}||\ddot{\mathbf{f}}_h^N||$$

a jako *parametrická křivost* (parameter-effects curvature) ve směru $\mathbf{h}$

$$K_h^T = \frac{\sigma\sqrt{k}}{||\dot{\mathbf{f}}_h||^2}||\ddot{\mathbf{f}}_h^T||.$$

Pracuje se zpravidla s maximálními hodnotami těchto křivostí

$$K^N = \max K_h^N, \qquad K^T = \max K_h^T,$$

kde se hledá maximum přes všechny nenulové vektory $\mathbf{h}$.

Když si uvědomíme, že $\dot{\mathbf{f}}_h$ je lineární funkcí vektoru $\mathbf{h}$, kdežto $\ddot{\mathbf{f}}_h$ je kvadratickou funkcí tohoto vektoru, je zřejmé, že stačí hledat maximum přes všechny vektory splňující $||\mathbf{h}|| = 1$.

Z diferenciální geometrie je známo, že $||\ddot{\mathbf{f}}_h^N||$ je úměrná převrácené hodnotě poloměru oskulační kružnice a ten nezávisí na parametrickém vyjádření. Proto také hodnota vnitřní křivosti je na parametrickém vyjádření nezávislá.

Velikost křivosti se někdy hodnotí porovnáním s hodnotou $(F_{k,n-k}(\alpha))^{-1/2}$, což odpovídá volbě standardního poloměru $\sigma\sqrt{k}\sqrt{F_{k,n-k}(\alpha)}$. V rozsáhlém simulačním experimentu založeném na datech z reálných úloh zjistili Donaldsonová a Schnabel (viz Donaldson, Schnabel (1987)), že skutečná spolehlivost elipsoidické konfidenční množiny (12.6) těsně souvisí s hodnotou

$$\log(K^T\sqrt{F_{k,n-k}(\alpha)}).$$

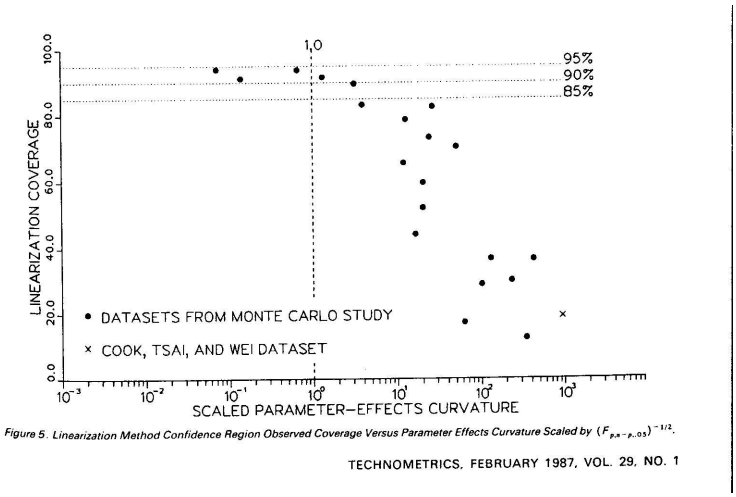
Pro parametrickou křivost K^T větší, než uvedená mezní hodnota, skutečná spolehlivost této eliptické konfidenční množiny velmi rychle klesá s rostoucí hodnotou parametrické křivosti (viz obr. 13.2). Na druhé straně spolehlivost konfidenční množiny založené na poměru věrohodnosti se zdá být blízká nominální (obr. 13.3).

Příklad 13.6 Vraťme se k příkladu 13.1, ale zvolme $x_1 = 2, x_2 = 8$. Zvolíme-li dále $\sigma = 1/\sqrt{(2)}$, dostaneme v bodě $\theta = -0{,}3$ vnitřní křivost 2,1 a parametrickou křivost 2,9. Přejdeme-li k druhé parametrizaci, vyjde parametrická křivost 2,1, vnitřní křivost zůstane stejná. Na obrázku 13.4 je znázorněn rozklad vektoru druhých derivací. Je patrné, že ve druhém parametrickém vyjádření je průmět tohoto vektoru do tečné nadroviny kratší. Tečná nadrovina se dotýká množiny možných středních hodnot v bodě A. Lineární aproximací bodu D je bod B, jeho kvadratickou aproximací bod C. Vektor BC je rozložen na dvě složky: BCt leží v tečné přímce, úsečka BCn je na tuto přímku kolmá. ◯

Příklad 13.7 Navažme na příklad 13.4 a spočítejme i v tomto případě míru křivosti pro obě parametrická vyjádření. Zvolme přitom $\theta = \theta^* = 0$ resp. $\beta = \beta^* = 1$. Dostaneme postupně

$$\dot{\mathbf{f}} = \begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}, \qquad \ddot{\mathbf{f}} = \begin{pmatrix}1\\9\end{pmatrix}, \qquad \ddot{\mathbf{f}}^T = \frac{14}{5}\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}, \qquad \ddot{\mathbf{f}}^N = \frac{3}{5}\begin{pmatrix}-3\\1\end{pmatrix},$$

$$\dddot{\mathbf{f}} = \begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}, \qquad \ddot{\dot{\mathbf{f}}} = \begin{pmatrix}0\\6\end{pmatrix}, \qquad \ddot{\dot{\mathbf{f}}}^T = \frac{9}{5}\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}, \qquad \ddot{\dot{\mathbf{f}}}^N = \frac{3}{5}\begin{pmatrix}-3\\1\end{pmatrix},$$

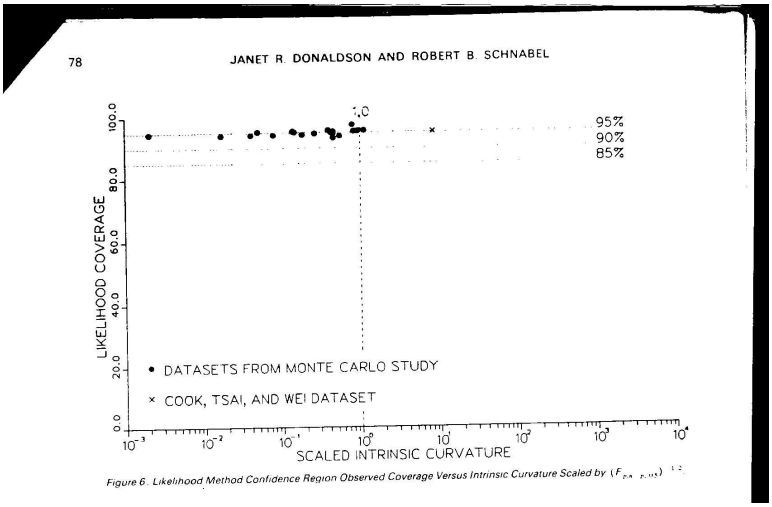


Obrázek 13.2: Souvislost odhadnuté spolehlivosti elipsoidické konfidenční množiny s vnitřní křivostí

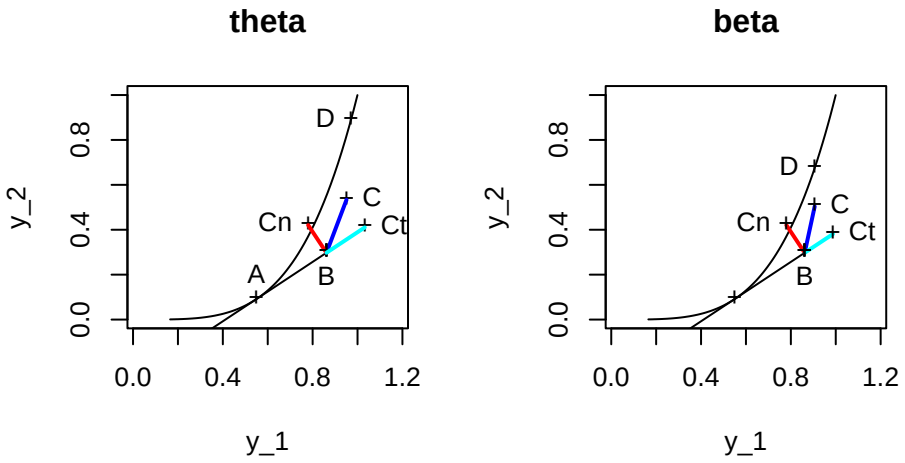
takže hledané křivosti jsou (pro jednoduchost $\sigma = 1$)

$$K^T = \frac{14}{50}\sqrt{10}, \qquad K^N = \frac{3}{50}\sqrt{10}$$
$$\tilde{K}^T = \frac{9}{50}\sqrt{10}, \qquad \tilde{K}^N = \frac{3}{50}\sqrt{10}$$

Nepřehlédněte, že vnitřní křivost opravdu vyšla v obou případech shodná. ◯



Obrázek 13.3: Souvislost odhadnuté spolehlivosti elipsoidální konfidenční množiny s vnitřní křivostí



Obrázek 13.4: Množiny možných středních hodnot a rozklad vektoru druhých derivací z příkladu 13.6

14. Výpočet odhadů v NLR

I když vyčíslení odhadu $\mathbf{t}$ patří spíše do numerické matematiky, statistik by měl mít aspoň rámcovou představu o této úloze. Odhad metodou nejmenších čtverců, tedy bod minima funkce

$$\mathcal{S}(\theta) = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - f(x_i, \theta))^2,$$

hledáme mezi *stacionárními body* funkce $\mathcal{S}()$, tedy takovými prvky parametrického prostoru Ω, které splňují požadavek

$$\nabla\mathcal{S}(\mathbf{t}^+) = \left(\frac{\partial\mathcal{S}(\mathbf{t}^+)}{\partial\boldsymbol{\theta}}\right) = \mathbf{0}. \tag{14.1}$$

Zpravidla se konstuuje posloupnost aproximací vektoru $\mathbf{t}^+$ tvaru

$$\mathbf{t}^{(\nu+1)} = \mathbf{t}^{(\nu)} + \rho_\nu \mathbf{d}^{(\nu)}, \tag{14.2}$$

kde vektor $\mathbf{d}^{(\nu)}$ určuje *směr opravy*, hodnota ρ_ν určuje *velikost kroku*. K rozhodování o ukončení iterací se požívá několik algoritmů. Hodnotí se například relativní velikost opravy $\rho_\nu\mathbf{d}^{(\nu)}$ nebo relativní velikost poklesu $\mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu+1)}) - \mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu)})$, pokud vůbec k poklesu dojde.

Zabývejme se nejprve obecně volbou směru opravy. Snadno zjistíme, že platí

$$\frac{\partial}{\partial\rho}\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta} + \rho\mathbf{d}) = \mathbf{d}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}). \tag{14.3}$$

Řekneme, že vektor $\mathbf{d}$ určuje v bodě $\boldsymbol{\theta}$ *přípustný směr*, když je derivace (14.3) záporná, takže aspoň pro malé kladné ρ funkce $\mathcal{S}$ klesá. Není-li bod $\boldsymbol{\theta}$ stacionární, pak množinu všech přípustných směrů lze charakterizovat pomocí následujícího tvrzení:

Věta 14.1. Je-li $\nabla\mathcal{S}(\theta) \neq \mathbf{0}$, pak je směr $\mathbf{d}$ v bodě $\boldsymbol{\theta}$ přípustný, právě když existuje pozitivně definitní matice $\mathbf{A}$ splňující $\mathbf{d} = -\mathbf{A}\nabla\mathcal{S}(\theta)$.

D ů k a z: O přípustnosti vektoru $\mathbf{d} = -\mathbf{A}\nabla\mathcal{S}(\theta)$ se přesvědčíme snadno, když spočítáme příslušný skalární součin a využijeme skutečnost, že matice $\mathbf{A}$ je pozitivně definitní

$$-\mathbf{d}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) = -(\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}))'\mathbf{A}\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) < 0.$$

Nyní ověříme, že matice

$$\mathbf{A} = \mathbf{I} - \frac{1}{||\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})||^2}\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})\,(\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}))' - \frac{1}{\mathbf{d}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})}\mathbf{d}\mathbf{d}'$$

má požadované vlastnosti.

Přímým výpočtem se přesvědčíme, že je $-\mathbf{A}\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{d}$, okamžitě je také vidět, že je matice $\mathbf{A}$ symetrická. Vezměme nyní libovolný nenulový vektor $\mathbf{x}$. Platí

$$\begin{aligned}\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} &= ||\mathbf{x}||^2 - \frac{\left(\mathbf{x}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})\right)^2}{||\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})||^2} + \frac{(\mathbf{x}'\mathbf{d})^2}{-\mathbf{d}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})} \\ &= \frac{1}{||\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})||^2}\left(||\mathbf{x}||^2||\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})||^2 - \left(\mathbf{x}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})\right)^2\right) + \frac{(\mathbf{x}'\mathbf{d})^2}{-\mathbf{d}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})}. \qquad (14.4)\end{aligned}$$

První sčítanec je podle Cauchyovy nerovnosti nezáporný, totéž platí pro předpokládaný přípustný směr i pro druhý sčítanec. Zbývá dokázat, že pravá strana nemůže být ani nulová. K tomu by musely být nuloví oba sčítanci. Rovnost v Cauchyově nerovnosti nastává právě tehdy, když je jeden z vektorů násobkem druhého, tedy když existuje (nutně nenulové) λ, pro něž je $\mathbf{x} = \lambda\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})$. V takovém případě je ovšem

$$\mathbf{x}'\mathbf{d} = \lambda\mathbf{d}'\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) \neq 0,$$

takže druhý sčítanec už nulový být nemůže. □

Zvolíme-li vektor $\mathbf{d}$ přípustný v bodě $\boldsymbol{\theta}$, pak zbývá řešit podstatně jednodušší úlohu jednorozměrné minimalizace funkce proměnné ρ, totiž $\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta} + \rho\mathbf{d})$. Zpravidla stačí najít takové kladné ρ, pro které platí $\mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu)} + \rho\mathbf{d}^{(\nu)}) < \mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu)})$. Například procedura `nls` knihovny `stats` vychází z hodnoty $\gamma = 1$, kterou podle potřeby (opakovaně) násobí hodnotou 0,5. Armijo (1966) navrhl následující jemnější postup: Zvolme konstanty α, β, γ (např. $\alpha = 0{,}4$, $\beta \in (0{,}5; 0{,}8)$, $\gamma = 1$). Jako ρ použijeme první z hodnot $\lambda = \gamma, \beta\gamma, \beta^2\gamma, \ldots$, pro kterou platí

$$\mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu)} + \lambda\mathbf{d}^{(\nu)}) < \mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu)}) + \alpha\lambda\mathbf{d}'\nabla\mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu)}).$$

Hledá tedy hodnotu λ, která zaručí pokles menší, než je dolní jeho hranice daná poněkud pomaleji klesající přímkou, než je tečna k funkci $\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta} + \lambda\mathbf{d})$ proměnné λ.

14.1. Zobecněná Newtonova metoda

Zobecněnou Newtonovu metodu dostaneme, když je směr oprav dán vztahem

$$\begin{aligned}\mathbf{d} &= -\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta})\nabla\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) \qquad (14.5)\\ &= 2\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta})(\mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}))'(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})), \qquad (14.6)\end{aligned}$$

kde $\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta})$ je matice, jejíž prvky jsou spojitými funkcemi $\boldsymbol{\theta}$. Jak víme, je-li matice $\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta})$ pozitivně definitní, půjde o přípustný směr oprav.

Nejjednodušší je *gradientní metoda* určená volbou $\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{I}$. Efektivnost gradientní metody silně závisí na volbě délky kroku. Prakticky nepřijatelná je volba $\rho = 1$, nejvhodnější je nějaká robustní metoda jednorozměrné minimalizace.

Bezprostřední aplikace Newtonovy metody řešení soustavy nelineárních rovnic by vyžadovala druhé parciální derivace funkce $\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})$, které by vytvořily matici $(\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}))^{-1}$. Prvek jr této matice je roven

$$\frac{\partial \mathcal{S}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j \partial \theta_r} = 2\sum_{i=1}^{n} f_j(x_i, \boldsymbol{\theta}) f_r(x_i, \boldsymbol{\theta}) - 2\sum_{i=1}^{n} (Y_i - f(x_i, \boldsymbol{\theta})) f_{jr}(x_i, \boldsymbol{\theta}). \tag{14.7}$$

Pro skutečnou hodnotu parametru $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^*$ je střední hodnota druhého členu na pravé straně nulová. Lze tedy očekávat, že pro hodnoty $\boldsymbol{\theta}$ blízké jeho skutečné hodnotě, zvláště při malém rozptylu σ^2, bude druhý člen v porovnání s prvním členem zanedbatelný, takže vzniklá matice $\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta})$ bude pozitivně definitní. Iterační proces to však nezaručuje, takže se použití této Newtonovy metody příliš nedoporučuje.

Obě dosud popsané metody mají zajímavou geometrickou interpretaci v parametrickém prostoru. Představme si „vrstevnici“ funkce $\mathcal{S}$ procházející bodem $\mathbf{t}^{(\nu)}$, tedy množinu hodnot $\boldsymbol{\theta}$ takových, že je $\mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{S}(\mathbf{t}^{(\nu)})$. Směr opravy gradientní metody je kolmý k tečné nadrovině v bodě $\mathbf{t}^{(\nu)}$. Newtonova metoda vychází z kvadratické aproximace zmíněné množiny v bodě $\mathbf{t}^{(\nu)}$. Ta má rozumný tvar, jen když je matice $\mathbf{D}(\mathbf{t}^{(\nu)})$ pozitivně definitní. Pak jde o elipsoid a směr opravy směřuje do jeho středu. Jak jsme se už zmínili, pozitivní definitnost matice $\mathbf{D}(\mathbf{t}^{(\nu)})$ není u Newtonovy metody zaručena.

14.2. Gaussova metoda

Vraťme se k (14.7). Když vynecháme druhý sčítanec, který by měl mít pro správné $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^*$ nulovou střední hodnotu, dostaneme *Gaussovu metodu* s pozitivně definitní maticí $(\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}))^{-1} = (\mathbf{F}(\mathbf{t}))'\mathbf{F}(\mathbf{t})$. Předpis pro iterační výpočet odhadu metodou nejmenších čtverců je pak

$$\mathbf{t}^{(\nu+1)} = \mathbf{t}^{(\nu)} + \rho_\nu((\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))^{-1}(\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\mathbf{t}^{(\nu)})). \tag{14.8}$$

Vlastně opět pracujeme s kvadratickou aproximací množiny $\{\boldsymbol{\theta} : \mathcal{S}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{f}(\mathbf{t}^{(\nu)})\}$, tentokrát založenou na lineární aproximaci regresní funkce. Příslušná matice kvadratické formy je tentokrát pozitivně definitní.

Často vystačíme s triviální volbou $\rho_\nu = 1$, přičemž iterační postup s touto volbou můžeme odvodit i jinak. Máme-li aproximaci $\mathbf{t}^{(\nu)}$, kterou se snažíme vylepšit

na $\mathbf{t}^{(\nu)} + \mathbf{d}$, a použijeme-li lineární aproximaci regresní funkce v bodě $\mathbf{t}^{(\nu)}$, budeme hledat opravu $\mathbf{d}$, která bude minimalizovat

$$||\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\mathbf{t}^{(\nu)} + \mathbf{d})||^2 \doteq ||\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\mathbf{t}^{(\nu)}) - \mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)})\mathbf{d})||^2.$$

Vzpomeneme-li si na odhad parametru $\boldsymbol{\beta}$ v lineárním modelu s úplnou hodností, okamžitě můžeme napsat řešení:

$$\mathbf{d} = \left((\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)})\right)^{-1} (\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\mathbf{t}^{(\nu)})),$$

což je právě (14.8) pro $\rho_\nu = 1$.

V praxi se často stává, že je matice $\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)})$ špatně podmíněná. Směry určené Gaussovou a gradientní metodou bývají téměř ortogonální. Pak se používá postup zvaný *Marquardtův kompromis*. V porovnání s Gaussovou metodou se posiluje hlavní diagonála matice $(\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)})$, takže se směr oprav určuje pomocí

$$\mathbf{d} = \left((\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}) + \lambda_\nu \mathrm{diag}\,(\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)})\right)^{-1} (\mathbf{F}(\mathbf{t}^{(\nu)}))'(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\mathbf{t}^{(\nu)})),$$

kde λ_ν je malé číslo zvolené podle speciálního iteračního algoritmu. Čím je hodnota parametru λ_ν větší, tím je směr $\mathbf{d}$ bližší směru gradientní metody.

Příklad 14.1 Mějme regresní funkci

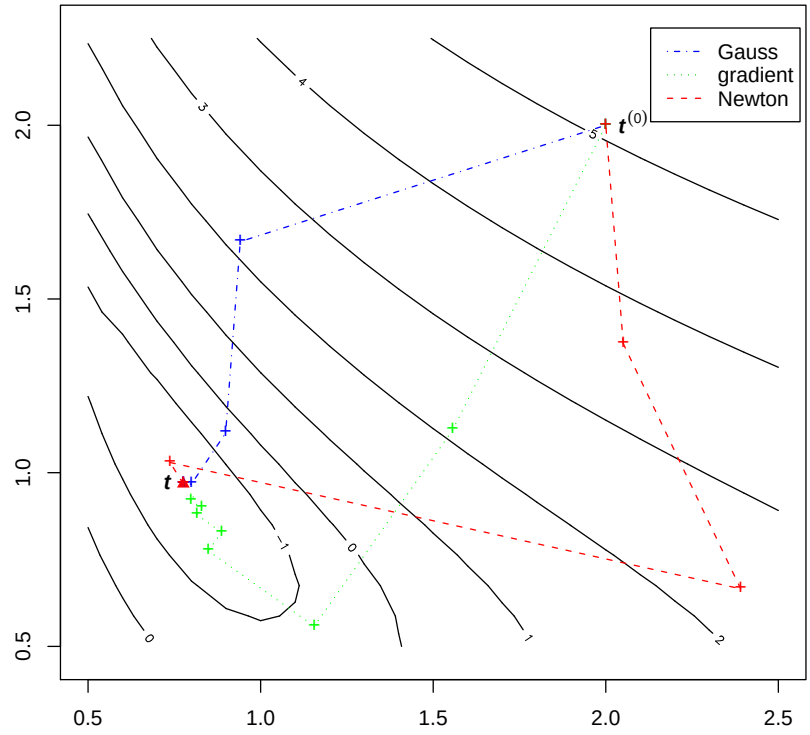
$$f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 \exp(x\theta_2).$$

Pro jednoduchost budiž $\mathbf{x} = (-1, 0, 1)', \mathbf{y} = (0, 1, 2)'$. Jako výchozí aproximaci zvolme $\mathbf{t}^{(0)} = (2, 2)'$. Několik prvních iterací je znázorněno na obrázku 14.1. V případě Newtonovy metody byla matice $\mathbf{D}$ pozitivně definitní až při výpočtu $\mathbf{t}^{(3)}$. Délka kroku ρ byla u Gaussovy metody vždy rovna 1, u ostatních metod byla provedena jednorozměrná minimalizace. ◯

14.3. Metody nevyžadující výpočet derivací

Někdy může být problémem potřeba výpočtu derivací regresní funkce. Buď je tato funkce příliš složitá nebo ani nemá explicitní vyjádření, neboť je například řešením soustavy diferenciálních rovnic, které se mění podle hodnoty nějakého parametru. Pak je možno derivace aproximovat numerickým výpočtem, když se pro malé ε použije

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} f(x, \boldsymbol{\theta}) \doteq \frac{f(x, \boldsymbol{\theta} + \varepsilon \mathbf{j}_j) - f(x, \boldsymbol{\theta})}{\varepsilon}$$



Obrázek 14.1: Iterační výpočet odhadu v nelineární regresi (pro názornost je znázorňován logaritmus funkce $\mathcal{S}$)

nebo

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} f(x, \boldsymbol{\theta}) \doteq \frac{f(x, \boldsymbol{\theta} + \varepsilon \mathbf{j}_j) - f(x, \boldsymbol{\theta} - \varepsilon \mathbf{j}_j)}{2\varepsilon}.$$

Numerickému derivování se vyhnuli Nelder, Mead (1965), kteří navrhli *simplexovou metodu*, jež je velice robustní, takže dokáže konvergovat i z velmi nevhodných hodnot výchozí aproximace pro $\mathbf{t}^+$, byť poněkud pomaleji. Například procedura `optim()` knihovny `stats` programu R standardně používá právě tuto proceduru, i když nabízí (R verze 2.2) ještě čtyři další algoritmy.

Výchozí aproximací budiž $\mathbf{t}_{(0)}$. Zvolme ještě k dalších aproximací takových, že $(k+1)$-tice $\mathbf{t}_{(0)}, \mathbf{t}_{(1)}, \ldots, \mathbf{t}_{(k)}$ tvoří v k-rozměrném euklidovském prostoru simplex.

To znamená, že například vektory $\mathbf{t}_{(1)} - \mathbf{t}_{(0)}, \ldots, \mathbf{t}_{(k)} - \mathbf{t}_{(0)}$ jsou lineárně nezávislé. Předpokládejme, že aproximace jsou očíslovány tak, že platí

$$\mathcal{S}(\mathbf{t}_{(0)}) \leq \mathcal{S}(\mathbf{t}_{(1)}) \leq \ldots \leq \mathcal{S}(\mathbf{t}_{(k)}). \tag{14.9}$$

V následujícím kroku je třeba aproximaci $\mathbf{t}_{(k)}$ nahradit novou aproximací $\mathbf{t}_{(\Delta)}$ tak, aby hodnota $\mathcal{S}(\mathbf{t}_{(\Delta)})$ byla co nejmenší a nová $(k+1)$-tice opět tvořila simplex.

Standardním krokem je určit těžiště $\bar{\mathbf{t}}$ aproximací $\mathbf{t}_{(0)}, \ldots, \mathbf{t}_{(k-1)}$ a přesunout aproximaci $\mathbf{t}_{(k)}$ za toto těžiště:

$$\mathbf{t}_{(\Delta)} = \bar{\mathbf{t}} + \alpha(\bar{\mathbf{t}} - \mathbf{t}_{(k)}), \qquad \bar{\mathbf{t}} = \frac{1}{k}\sum_{j=0}^{k-1} \mathbf{t}_{(j)}.$$

Velikost posunutí od těžiště α se vybírá zejména z hodnot 1, 2, případně 0,5. Může se stát, že někdy je třeba zvolit $\alpha < 0$, abychom hodnotu funkce $\mathcal{S}$ dokázali snížit.

Popsaný postup lze zdokonalit tak, že získáme také aproximaci asymptotické varianční matice odhadu $\mathbf{t}$. Takovou *metodu DUD* (Doesn't Use Derivatives) navrhli Ralston, Jennrich (1978).

Podobně jako u simplexové metody použijeme aproximace $\mathbf{t}_{(0)}, \mathbf{t}_{(1)}, \ldots, \mathbf{t}_{(k)}$, které tvoří simplex a které jsou očíslovány tak, aby splňovaly (14.9). Předpokládejme, že jde o výsledný simplex, kdy jsme už postupné úpravy ukončili. Každý prvek parametrického prostoru lze vyjádřit ve tvaru

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{t}_{(0)} + \mathbf{T}\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\theta}),$$

kde matice

$$\mathbf{T} = \left(\mathbf{t}_{(1)} - \mathbf{t}_{(0)}, \ldots, \mathbf{t}_{(k)} - \mathbf{t}_{(0)}\right)$$

je nutně regulární, neboť předpokládáme, že aproximace $\mathbf{t}_{(0)}, \mathbf{t}_{(1)}, \ldots, \mathbf{t}_{(k)}$ tvoří simplex. Je tedy

$$\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{T}^{-1}(\boldsymbol{\theta} - \mathbf{t}_{(0)}). \tag{14.10}$$

Jako lineární aproximaci vektoru středních hodnot $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})$ použijeme vektor

$$\mathbf{f}_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\theta})) = \mathbf{f}(\mathbf{t}_{(0)}) + \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\theta}), \tag{14.11}$$

kde matice $\mathbf{B}$ typu $n \times k$ má na místě ij prvek $\mathbf{f}(x_i, \mathbf{t}_{(j)}) - \mathbf{f}(x_i, \mathbf{t}_{(0)})$. K danému vektoru $\mathbf{Y}$ je vektor $\mathbf{f}_{\mathrm{L}}(\alpha(\boldsymbol{\theta}))$ nejblíže, když místo $\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\theta})$ zvolíme řešení $\mathbf{a}$ rovnice

$$\mathbf{B}'\mathbf{B}\mathbf{a} = \mathbf{B}'\left(\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\mathbf{t}_{(0)})\right).$$

Novou aproximací odhadu $\mathbf{t}$ je pak vektor

$$\mathbf{t}_{(\Delta)} = \mathbf{t}_{(0)} + \mathbf{T}\mathbf{a}. \tag{14.12}$$

Touto aproximací nahradíme některou aproximací $\mathbf{t}_{(0)}, \mathbf{t}_{(1)}, \ldots, \mathbf{t}_{(k)}$ tak, aby nová matice $\mathbf{B}'\mathbf{B}$ byla i v příštím kroku co možná dobře podmíněná.

Dosaďme nyní řešení z (14.10) do lineární aproximace $\mathbf{f}_{\mathrm{L}}(\alpha(\boldsymbol{\theta}))$. Dostaneme tak vyjádření

$$\mathbf{f}_{\mathrm{L}}(\alpha(\boldsymbol{\theta})) = \mathbf{f}(\mathbf{t}_{(0)}) + \mathbf{B}\mathbf{T}^{-1}\left(\boldsymbol{\theta} - \mathbf{t}_{(0)}\right),$$

takže (viz například (12.2)) můžeme matici $\mathbf{B}\mathbf{T}^{-1}$ považovat za aproximaci matice prvních derivací $\mathbf{F}(\mathbf{t}_{(0)})$. Proto se jako aproximace asymptotické varianční matice odhadu $\mathbf{t}$ někdy používá matice

$$S^2\left(\mathbf{T}'^{-1}\mathbf{B}'\mathbf{B}\mathbf{T}^{-1}\right)^{-1} = S^2\mathbf{T}\left(\mathbf{B}'\mathbf{B}\right)^{-1}\mathbf{T}'.$$

A. Pomocná tvrzení, označení

Zde jsou uvedena některá tvrzení (například o maticích), užitečná v ostatních kapitolách.

A.1. Tvrzení o maticích

Chceme-li označit j-tý sloupec (i-tý řádek) matice $\mathbf{A}$, použijeme symbol $\mathbf{a}_{\bullet j}$ ($\mathbf{a}'_{i\bullet}$) Chceme-li vyjádřit, že matice vznikla z $\mathbf{A}$ vynecháním jejího j-tého sloupce, napíšeme $\mathbf{A}_{\bullet -j}$, když vznikla vynecháním i-tého řádku, pak píšeme $\mathbf{A}_{-i\bullet}$. Je tedy například

$$\mathbf{A} = (\mathbf{a}_{\bullet 1}, \mathbf{A}_{\bullet -1}) = \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_{1\bullet} \\ \mathbf{A}_{-1\bullet} \end{pmatrix} \tag{A.1}$$

Speciálně r-tý sloupec jednotkové matice $\mathbf{I}$ označíme symbolem $\mathbf{j}_r$, vektor ze samých jedniček symbolem $\mathbf{1}$, případně $\mathbf{1}_n$, pokud chceme explicitně vyjádřit počet složek.

Nechť $\mathbf{X}_{n\times k}$ je pevná matice. Symbolem $\mathcal{M}(\mathbf{X})$ označíme podprostor $\mathbb{R}^n$ tvořený všemi lineárními kombinacemi sloupců matice $\mathbf{X}$. Tento prostor, nazývaný **lineární obal sloupců matice X**, vlastně splňuje

$$\mathcal{M}(\mathbf{X}) = \{\mathbf{Xt} : \mathbf{t} \in \mathbb{R}^k\}.$$

Je-li matice $\mathbf{X}$ nějaká matice typu $n \times k$, pak **pseudoinverzní matice** k matici $\mathbf{X}$ je libovolná matice $\mathbf{X}^-$ typu $k \times n$, která vyhovuje vztahu $\mathbf{XX}^-\mathbf{X} = \mathbf{X}$. Pseudoinverzní matice obecně není dána jednoznačně.

Jednoznačně je však dána **Mooreova-Penroseho pseudoinverzní matice**, která musí vyhovovat požadavkům:

$$\mathbf{XX}^+\mathbf{X} = \mathbf{X}, \qquad \mathbf{X}^+\mathbf{XX}^+ = \mathbf{X}^+, \tag{A.2}$$

$$(\mathbf{XX}^+)' = \mathbf{XX}^+, \qquad (\mathbf{X}^+\mathbf{X})' = \mathbf{X}^+\mathbf{X}. \tag{A.3}$$

Věta A.1. (Spektrální rozklad) Nechť $\mathbf{A}$ je symetrická matice řádu n. Potom existují ortonormální matice $\mathbf{Q}$ a diagonální matice $\mathbf{\Lambda}$ s diagonálními prvky $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_n$ tak, že platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}'. \tag{A.4}$$

Je zřejmé, že λ_i jsou vlastní čísla matice $\mathbf{A}$ a že sloupce $\mathbf{q}_{\bullet i}$ matice $\mathbf{Q}$ jsou odpovídající ortonormální vlastní vektory s jednotkovou délkou. Matici $\mathbf{A}$ lze vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mathbf{q}_{\bullet i}\mathbf{q}'_{\bullet i}. \tag{A.5}$$

Věta A.2. (SVD – rozklad podle singulárních hodnot) Nechť $\mathbf{X}_{n\times k}$, kde je $n \geq k$ je matice s kladnou hodností r. Potom existují matice s ortonormálními sloupci $\mathbf{U}^0_{n\times r}, \mathbf{V}^0_{k\times r}$ a diagonální matice $\mathbf{D}^0_{r\times r}$ s reálnými čísly $d_1 \geq \ldots \geq d_r > 0$ na diagonále tak, že platí

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}^0\mathbf{D}^0\mathbf{V}^{0\prime} \tag{A.6}$$

D ů k a z: Uvažujme zřejmě pozitivně semidefinitní matici $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ s vlastními čísly $d_1^2 \geq \ldots \geq d_r^2 > d_{r+1}^2 = \ldots = d_k^2 = 0$ a jim odpovídajícími ortonormálními vlastními vektory $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_k$. Pro $1 \leq i \leq r$ zaveďme vektory

$$\mathbf{u}_i = \frac{1}{d_i}\mathbf{X}\mathbf{v}_i. \tag{A.7}$$

Snadno zjistíme, že tyto vektory jsou ortonormální:

$$\mathbf{u}'_i\mathbf{u}_j = \frac{1}{d_i d_j}\mathbf{v}'_i\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{v}_j = \frac{d_j^2}{d_i d_j}\mathbf{v}'_i\mathbf{v}_j = \begin{cases} 0 & \text{pro } i \neq j, \\ 1 & \text{pro } i = j. \end{cases}$$

Vztah z (A.7) lze přepsat jako

$$\mathbf{u}_i d_i = \mathbf{X}\mathbf{v}_i,$$

a to dokonce pro všechna $1 \leq i \leq k$, když libovolně přidáme vektory $\mathbf{u}_{r+1}, \ldots, \mathbf{u}_k$ tak, aby sloupce matice $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_k)$ měla ortonormální sloupce. Zavedeme-li ještě čtvercovou matici $\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_k)$ a diagonální matici $\mathbf{D}$ s diagonálními prvky $d_1, \ldots, d_k$, můžeme všech k vztahů souhrnně zapsat jako $\mathbf{U}\mathbf{D} = \mathbf{X}\mathbf{V}$. Odtud přímo plyne vztah

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}' = \sum_{i=1}^{k} d_i\mathbf{u}_i\mathbf{v}'_i = \sum_{i=1}^{r} d_i\mathbf{u}_i\mathbf{v}'_i. \tag{A.8}$$

Přitom je vidět, že vystačíme s prvními r sloupci matic $\mathbf{U}, \mathbf{D}, \mathbf{V}$. Označíme-li horním indexem 0 odpovídající podmatice, dostaneme vztah (A.6). □

Věta A.3. (QR rozklad) Nechť $\mathbf{X}_{n\times k}$ je matice konstant. Potom existují matice $\mathbf{Q}_{n\times k}$ s ortonormálními sloupci a horní trojúhelníková čtvercová matice $\mathbf{R}$ řádu k tak, že platí

$$\mathbf{X} = \mathbf{Q}\mathbf{R}. \tag{A.9}$$

Je-li hodnost r matice $\mathbf{X}$ kladná, existují matice $\mathbf{Q}^0_{n\times r}$ s ortonormálními sloupci a matice $\mathbf{R}^0$ s r řádky a k sloupci taková, že je $r^0_{ij} = 0$ pro $i > j$ a že platí

$$\mathbf{X} = \mathbf{Q}^0\mathbf{R}^0. \tag{A.10}$$

Je-li hodnost matice $\mathbf{X}$ rovna počtu jejích sloupců, pak existuje jediná matice $\mathbf{R}$ splňující (A.9), která má kladné diagonální prvky, nazývá se *Choleského faktor*.

Existence rozkladu (A.9) je dokázána v oddílu 1b.2 (VII) knihy Rao (1978). V jednotlivých sloupcích matice $\mathbf{R}$ jsou souřadnice odpovídajících sloupců matice $\mathbf{X}$ v ortonormální bázi tvořené sloupci matice $\mathbf{Q}$. Pokud nemá matice $\mathbf{X}$ lineárně nezávislé sloupce, pak se v součinu (A.9) nesmí projevit některé sloupce matice $\mathbf{Q}$. To je zajištěno, když jsou odpovídající řádeky $\mathbf{R}$ nulové. Jednoznačnost $\mathbf{R}$ v případě matice $\mathbf{X}$ s lineárně nezávislými sloupci lze dokázat indukcí ((Zvára, 1989, věta 12.1)). Z jednoznačnosti $\mathbf{R}$ plyne v tomto případě také jednoznačnost matice $\mathbf{Q}$.

Věta A.4. (Odmocninová matice) Nechť $\mathbf{A}$ je pozitivně semidefinitní matice. Pak existuje pozitivně semidefinitní matice $\mathbf{C}$ taková, že platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{CC}.$$

D ů k a z: Nechť $\mathbf{A} = \mathbf{Q\Lambda Q}'$ je spektrální rozklad matice $\mathbf{A}$. Pozitivní semidefinitnost $\mathbf{A}$ je ekvivalentní se stejnou vlastností $\mathbf{\Lambda}$. Označme jako $\mathbf{\Lambda}^{1/2}$ diagonální matici, která má na diagonále odmocniny ze stejných prvků matice Λ. Snadno se ověří, že matice $\mathbf{C} = \mathbf{Q\Lambda}^{1/2}\mathbf{Q}'$ má požadované vlastnosti. □

Pozitivně semidefinitní matice budeme značit $\mathbf{A} \geq 0$, podobně zápis $\mathbf{A} \geq \mathbf{B}$ znamená, že matice $\mathbf{A} - \mathbf{B}$ je pozitivně semidefinitní. Analogicky použijeme symbol $>$ k vyjádření pozitivní definitnosti.

Věta A.5. (Porovnání kvadratických forem) Nechť $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ jsou dvě pozitivně definitní matice. Potom platí

$$\mathbf{A} \geq \mathbf{B} \Leftrightarrow \mathbf{B}^{-1} \geq \mathbf{A}^{-1}, \tag{A.11}$$

$$\mathbf{A} > \mathbf{B} \Leftrightarrow \mathbf{B}^{-1} > \mathbf{A}^{-1}. \tag{A.12}$$

Věta A.6. (Projekce do podprostoru) Nechť $\mathbf{X}_{n\times k}$ je matice, jejíž hodnost r je kladná. Potom

a) rozklad $\mathbf{y} = \mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2$, kde $\mathbf{y}_1 \in \mathcal{M}(\mathbf{X})$ a $\mathbf{y}_2 \perp \mathcal{M}(\mathbf{X})$, je dán jednoznačně;

b) nechť $\mathbf{P} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N})$ je ortonormální matice taková, že je $\mathcal{M}(\mathbf{X}) = \mathcal{M}(\mathbf{Q})$. Projekční matice $\mathbf{H}_X$ a $\mathbf{M}_X$, které zajišťují průměty $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2$, jsou dány jednoznačně a platí

$$\mathbf{H}_X = \mathbf{QQ}', \tag{A.13}$$

$$\mathbf{M}_X = \mathbf{NN}'. \tag{A.14}$$

c) Platí

$$\mathbf{H}_X = \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}', \tag{A.15}$$
$$\mathbf{M}_X = \mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}'; \tag{A.16}$$

d) matice $\mathbf{H}_X, \mathbf{M}_X$ jsou symetrické a idempotentní.

e) Platí

$$\mathsf{tr}\,(\mathbf{H}_X) = r, \tag{A.17}$$
$$\mathsf{tr}\,(\mathbf{M}_X) = n - r. \tag{A.18}$$

Věta A.7. (Porovnání délky vektoru s jedničkou) Pro matici $\mathbf{A}_{m\times n}$ a vektor $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ platí nerovnost $\|\mathbf{Ac}\|^2 \leq 1$ právě tehdy, když je matice

$$\mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-}\mathbf{A}' - \mathbf{Acc}'\mathbf{A}' \tag{A.19}$$

pozitivně semidefinitní.

D ů k a z: Pro $\mathbf{Ac} = \mathbf{0}$ je tvrzení triviální. Nechť je tedy $\mathbf{Ac} \neq \mathbf{0}$. Potom platí $\mathcal{M}(\mathbf{Ac}) \subset \mathcal{M}(\mathbf{A})$, takže rozdíl projekčních matic na $\mathcal{M}(\mathbf{A})$ a na $\mathcal{M}(\mathbf{Ac})$ je projekční maticí na ortogonální doplněk $\mathcal{M}(\mathbf{Ac})$ prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{A})$. Pozitivně semidefinitní je tedy

$$0 \leq \mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-}\mathbf{A}' - \mathbf{Ac}(\mathbf{c}'\mathbf{A}'\mathbf{Ac})^{-1}\mathbf{c}'\mathbf{A}'. \tag{A.20}$$

Předpoklad $\|\mathbf{Ac}\|^2 \leq 1$ je však ekvivalentní s $-(\mathbf{c}'\mathbf{A}'\mathbf{Ac})^{-1} \leq -1$, takže pravou stranu nerovnosti (A.20) můžeme shora omezit maticí $\mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-}\mathbf{A}' - \mathbf{Acc}'\mathbf{A}'$, která je tedy nutně pozitivně semidefinitní a je dokázána implikace jedním směrem.

Obráceně, nechť je matice (A.19) pozitivně semidefinitní. Když ji vynásobíme zprava vektorem $\mathbf{Ac}$ a zleva transpozicí tohoto vektoru, dostaneme po malé úpravě (použitím definice pseudoinverzní matice)

$$0 \leq \|\mathbf{Ac}\|^2 - \|\mathbf{Ac}\|^4 = \|\mathbf{Ac}\|^2(1 - \|\mathbf{Ac}\|^2),$$

což je ekvivalentní s dokazovanou nerovností $\|\mathbf{Ac}\|^2 \leq 1$. □

Věta A.8. (Porovnání délky vektoru s jedničkou*) Nechť $\mathbf{V}$ je pozitivně definitní matice řádu k, nechť $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^k$ je libovolný vektor. Potom platí nerovnost $\mathbf{b}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{b} \leq 1$ právě tehdy, když je matice $\mathbf{V} - \mathbf{bb}'$ pozitivně semidefinitní.

D ů k a z: Pozitivně definitní matici $\mathbf{V}^{-1}$ lze zapsat pomocí symetrické a regulární odmocninové matice (viz větu A.4) jako $\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{AA}$. Kvadratickou formu $\mathbf{b}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{b}$ lze tedy přepsat jako

$$\mathbf{b}'\mathbf{AAb} = ||\mathbf{Ab}||^2.$$

Podle věty A.7 je tedy nerovnost $\mathbf{b}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{b} \leq 1$ ekvivalentní s tím, že je pozitivně semidefinitní matice

$$\mathbf{A}(\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{b}\mathbf{b}'\mathbf{A} = \mathbf{A}\left(\mathbf{V} - \mathbf{b}\mathbf{b}'\right)\mathbf{A}.$$

Protože je matice $\mathbf{A}$ regulární, je ona nerovnost ekvivalentní s pozitivní semidefinitností matice $\mathbf{V} - \mathbf{b}\mathbf{b}'$, což bylo dokázat. □

Když pracujeme s vektory označenými dvojitými indexy (například v modelech analýzy rozptylu dvojného třídění), je užitečný pojem **Kroneckerova součinu**. Jsou-li $\mathbf{A}$ typu $m \times n$ a $\mathbf{B}$ typu $p \times q$, pak označíme jako $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ matici typu $mp \times nq$, jejíž blok (i, j) je roven $a_{ij}\mathbf{B}$, tedy

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} & \cdots & a_{1n}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} & \cdots & a_{2n}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}\mathbf{B} & a_{m2}\mathbf{B} & \cdots & a_{mn}\mathbf{B} \end{pmatrix}. \tag{A.21}$$

Následující vlastnosti lze snadno dokázat.

Věta A.9. (Vlastnosti Kroneckerova součinu) Pro Kroneckerův součin platí

$$\begin{aligned}
\mathbf{O} \otimes \mathbf{A} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{O} &= \mathbf{O}, \\
(\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2) \otimes \mathbf{B} &= (\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{B}) + (\mathbf{A}_2 \otimes \mathbf{B}), \\
\mathbf{A} \otimes (\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2) &= (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}_1) + (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}_2). \\
c\mathbf{A} \otimes d\mathbf{B} &= cd(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}), \\
\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2 \otimes \mathbf{B}_1\mathbf{B}_2 &= (\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{B}_1)(\mathbf{A}_2 \otimes \mathbf{B}_2), \\
(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^{-1} &= \mathbf{A}^{-1} \otimes \mathbf{B}^{-1}, \quad \text{pokud inverze existují}, \\
(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})^{-} &= \mathbf{A}^{-} \otimes \mathbf{B}^{-}, \quad \text{pro libovolné pseudoinverze}, \\
(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})' &= \mathbf{A}' \otimes \mathbf{B}', \\
(\mathbf{A}, \mathbf{B}) \otimes \mathbf{C} &= (\mathbf{A} \otimes \mathbf{C}, \mathbf{B} \otimes \mathbf{C}),
\end{aligned}$$

po vhodném přerovnání sloupců jsou matice $(\mathbf{A} \otimes \mathbf{C}, \mathbf{A} \otimes \mathbf{D})$ a $\mathbf{A} \otimes (\mathbf{C}, \mathbf{D})$ shodné.

Věta A.10. (Poincaréova věta o separaci) Nechť $\mathbf{R}$ je matice typu $n \times q$ s ortonormálními sloupci, nechť $\alpha_1 \geq \ldots \geq \alpha_n$ jsou vlastní čísla nějaké symetrické matice $\mathbf{A}$, nechť $\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_q$ jsou vlastní čísla matice $\mathbf{R}'\mathbf{A}\mathbf{R}$. Potom platí

$$\lambda_i \leq \alpha_i, \qquad 1 \leq i \leq q, \tag{A.22}$$

$$\lambda_{q-i+1} \geq \alpha_{n-i+1}, \qquad 1 \leq i \leq q. \tag{A.23}$$

Platí-li navíc pro vlastní vektor $\mathbf{q}_n$ matice $\mathbf{A}$ odpovídající jejímu vlastnímu číslu α_n vztah $\mathbf{R}'\mathbf{q}_n = \mathbf{0}$, lze nerovnost (A.23) upravit na

$$\lambda_{q-i+1} \geq \alpha_{n-i}, \qquad 1 \leq i \leq q. \tag{A.24}$$

Tvrzení lze nalézt v 1. kapitole knihy Rao (1978) resp. ve cvičeních 1.4, 1.5 2. kapitoly knihy Zvára (1989).

A.2. Některé vlastnosti náhodných veličin

Věta A.11. (Vlastnosti kvadratické formy) Nechť $e_1, \dots, e_n$ jsou nezávislé náhodné veličiny se stejným rozdělením, nechť $\mathsf{E}\, e_i = 0, \mathsf{E}\, e_i^2 = \sigma^2, \mathsf{E}\, e_i^4 = \sigma^4(\gamma_2+3)$. Nechť $\mathbf{A}$ je symetrická matice. Potom platí

$$\mathsf{E}\, \mathbf{e}'\mathbf{A}\mathbf{e} = \sigma^2 \operatorname{tr} \mathbf{A}, \tag{A.25}$$

$$\operatorname{var} \mathbf{e}'\mathbf{A}\mathbf{e} = \sigma^4 \left(\gamma_2 \sum a_{ii}^2 + 2 \operatorname{tr} \mathbf{A}^2 \right). \tag{A.26}$$

Věta A.12. (Vlastnost normálního rozděleni) Nechť měřitelná funkce $T(\mathbf{x})$ splňuje $T(c\mathbf{x}) = T(\mathbf{x})$ pro každé $c > 0$ a pro každé $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Má-li náhodný vektor $\mathbf{X}$ rozdělení $\mathsf{N}_n\left(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}\right)$, pak jsou náhodné veličiny $T(\mathbf{X})$ a $||\mathbf{X}||$ nezávislé.

D ů k a z: Stačí přejít k polárním souřadnicím. Potom vzdálenost náhodného bodu od počátku a jeho směr od počátku jsou nezávislé. Ovšem vzdálenost od počátku je rovna $||\mathbf{X}||$ a funkční hodnota $T(\mathbf{X})$ je vzhledem k požadované vlastnosti závisí pouze na směru od počátku. □

Věta A.13. (Bonferroniho nerovnost) Pro náhodné jevy $A_1, \dots, A_n$ platí

$$\mathsf{P}\left(\cup_{i=1}^n A_i\right) \le \sum_{i=1}^n \mathsf{P}\left(A_i\right),$$

$$\mathsf{P}\left(\cap_{i=1}^n A_i\right) \ge 1 - \sum_{i=1}^n \left(1 - \mathsf{P}(A_i)\right).$$

A.3. Metoda maximální věrohodnosti

Nechť má náhodný vektor $\mathbf{X}$ hustotu $f_\theta(\mathbf{x})$, která závisí na parametru $\boldsymbol{\theta} \in \Omega$, přičemž Ω je parametrický prostor. V případě diskrétního rozdělení míníme pod hustotou pravděpodobnostní funkci (hustotu vůči čítací míře). Jako logaritmickou věrohodnostní funkci označíme funkci

$$\ell(\boldsymbol{\theta}) = \log(f_\theta(\mathbf{X})), \tag{A.27}$$

je tedy pro každé $\boldsymbol{\theta}$ náhodnou veličinou.

Odhad $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ metodou maximální věrohodnosti je takový prvek parametrického prostoru, v němž je logaritmická věrohodnostní funkce maximální. Například v lineárním modelu $\mathbf{Y} \sim \mathsf{N}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I})$ dá metoda maximální věrohodnosti odhady

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{b}, \qquad \hat{\sigma^2} = \frac{RSS}{n}.$$

Logaritmická věrohodnostní funkce je rovna

$$\ell(\hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\sigma^2}) = -\frac{n}{2} - \frac{n}{2}\log(2\pi) - \frac{n}{2}\log(RSS/n). \tag{A.28}$$

Pokud bychom považovali rozptyl σ^2 za známý (neodhadovaný), vyšla by logaritmická věrohodnostní funkce

$$\ell(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = -\frac{n}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}RSS \tag{A.29}$$

Jsou-li splněny podmínky regularity, potom lze dokázat mnohé užitečné vlastnosti odhadu $\hat{\boldsymbol{\theta}}$. Asymptoticky má rozdělení $\mathsf{N}(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{J}^{-1})$, kde $\mathbf{J}$ je *Fisherova informační matice* s prvky

$$J_{jt}(\boldsymbol{\theta}) = \mathsf{E}\,\frac{\partial\ell(\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_j}\frac{\partial\ell(\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_t} = -\mathsf{E}\,\frac{\partial^2\ell(\boldsymbol{\theta})}{\partial\theta_j\partial\theta_t}. \tag{A.30}$$

Ke zmíněným podmínkám regularity patří požadavek, aby množina $\{\mathbf{x} : f_\theta(\mathbf{x}) > 0\}$ nezávisela na parametru $\boldsymbol{\theta}$ nebo požadavek, aby parametrický prostor byl otevřená množina.

Podmodel je určen vlastním podprostorem $\omega \subset \Omega$. Odhad $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ v podmodelu je takovým prvkem ω, který maximalizuje logaritmickou věrohodnostní ℓ na ω. Testování podmodelu lze založit na některé ze tří statistik, které mají všechny stejné asymptotické rozdělení. Je jím rozdělení χ^2_q, kde q je rozdíl dimenze prostorů Ω a ω, resp. počet nezávislých omezení, jejichž aplikace vede k náhradě parametrického prostoru Ω parametrickým prostorem ω.

Test poměrem věrohodnosti (Wilksův test) porovnává hodnoty logaritmické věrohodnostní funkce pro $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ a $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ pomocí statistiky

$$LR = 2\left(\ell(\hat{\boldsymbol{\theta}}) - \ell(\tilde{\boldsymbol{\theta}})\right). \tag{A.31}$$

Platí-li podmodel, pak za předpokladu splnění podmínek regularity má statistika LR asymptoticky rozdělení χ^2_q.

Waldův test předpokládá, že se od Ω dostaneme k ω tak, že požadujeme, aby parametr $\boldsymbol{\theta}$ vyhovoval omezením $g_j(\boldsymbol{\theta}) = 0, j = 1, \ldots, q$. Tato omezení lze psát vektorově jako $\mathbf{g}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}$. Myšlenka je založena na zjištění, nakolik odhad $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ vyhovuje uvedeným omezením.

Označme jako $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})$ matici parciálních derivací $\partial \mathbf{g}(\boldsymbol{\theta})/\partial \boldsymbol{\theta}'$. Asymptotická varianční matice vektoru $\mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ je rovna výrazu $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta})^{-1}\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})'$. Prakticky sem musíme za neznámý parametr dosadit jeho odhad. Asymptoticky má výraz

$$W = \mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{\theta}})' \left(\mathbf{A}(\hat{\boldsymbol{\theta}})\mathbf{J}(\hat{\boldsymbol{\theta}})^{-1}\mathbf{A}(\hat{\boldsymbol{\theta}})'\right)^{-1} \mathbf{g}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \tag{A.32}$$

rozdělení χ^2_q.

Metoda skórů (Lagrangeova multiplikátoru) využívá na rozdíl od Waldova testu pouze odhad v podmodelu. Maximálně věrohodný odhad, protože maximalizuje logaritmickou věrohodnostní funkci, musí anulovat vektor parciálních derivací $\partial \ell/\partial \boldsymbol{\theta}$. Vyzkoušíme tedy, nakolik také odhad v podmodelu $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ anuluje tento vektor.

Zaveďme náhodný vektor (*vektor skórů*)

$$\mathbf{U}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{\partial \ell(\tilde{\boldsymbol{\theta}})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \left.\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right|_{\boldsymbol{\theta}=\tilde{\boldsymbol{\theta}}}. \tag{A.33}$$

Platí-li podmodel, má tento vektor nutně nulovou střední hodnotu, takže jeho varianční matice je právě rovna Fisherově informační matici, jak je zřejmé z definice (A.30) prvků této matice. Proto má, platí-li podmodel, statistika

$$LM = \frac{\partial \ell(\tilde{\boldsymbol{\theta}})}{\partial \boldsymbol{\theta}'} \left(\mathbf{J}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})\right)^{-1} \frac{\partial \ell(\tilde{\boldsymbol{\theta}})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \tag{A.34}$$

asymptoticky rozdělení χ^2_q.

B. Prostředí R

V této části shrneme některé informace spíše technického charakteru o programovém prostředí R. Pro podrobnou informaci a získání jeho volně šiřitelného kódu doporučuji především internetovou adresu `http://www.r-project.org/`, kde lze nalézt program, jednotlivé knihovny i manuály. Pro začátek je velmi instruktivní projít si ukázkovou lekci.

B.1. Procedura `lm()`

V prostředí R metodě nejmenších čtverců odpovídá procedura `lm`, věnujme se jí podrobněji. Viděli jsme, že metodu nejmenších čtverců můžeme do značné míry vyjádřit pomocí ortogonálního rozkladu regresní matice. Základem procedury `lm()` je rozklad matice $\mathbf{X}$ na součin matice $\mathbf{Q}$ s ortonormálními sloupci a horní trojúhelníkové matice $\mathbf{R}$, která obsahuje „souřadnice“ jednotlivých sloupců matice $\mathbf{X}$, vyjádřených pomocí sloupců matice $\mathbf{Q}$:

$$\mathbf{X} = \mathbf{QR}. \tag{B.1}$$

Existence tohoto *QR rozkladu* je dokázána například v oddílu 1b.2 (VII) knihy Rao (1978). Samotný výpočet je založen na Householderových transformacích, kdy matice $\mathbf{P} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N})$ vzniká jako součin ortonormálních matic tvaru $\mathbf{I} - 2\mathbf{qq}'$, kde $\mathbf{q}$ je vhodný vektor jednotkové délky. Zajímavý výklad poskytne oddíl 2.7 knihy Antoch, Vorlíčková (1992).

V případě, že matice $\mathbf{X}$ nemá lineárně nezávislé sloupce, není matice $\mathbf{Q}$ z QR rozkladu totožná s maticí $\mathbf{Q}$ z úvodu této kapitoly, jejíž sloupce tvoří ortonormální bázi prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})$, nýbrž generuje větší lineární prostor. Abychom dostali z QR rozkladu skutečnou bázi $\mathcal{M}(\mathbf{X})$, musíme z matice $\mathbf{Q}$ použít jen ty sloupce, jimž odpovídající řádky matice $\mathbf{R}$ jsou nenulové. To znamená použít rozklad (A.10). Algoritmus QR rozkladu v R je modifikací procedury DQRDC souboru programů LINPACK.

Možno říci, že matice $\mathbf{Q}$ (přesněji by to byla matice $\mathbf{Q}^0$ z (A.10)) vypovídá o lineárním prostoru $\mathcal{M}(\mathbf{X})$, kde se hledá odhad $\hat{\mathbf{Y}}$. Tato matice rozhoduje o varianční

matici zmíněného odhadu. Na druhé straně matice $\mathbf{R}$ (přesněji $\mathbf{R}^0$ z (A.10)) zachycuje vztahy mezi sloupci matice $\mathbf{X}$, rozhoduje tedy o rozptylu každé odhadnutelné funkce β, v případě úplné hodnosti o varianční matici $\mathbf{b}$.

Ukažme si funkci `lm()` na primitivním příkladu s následujícími daty:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{X}_a \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} -9 \\ -11 \\ 1 \\ 19 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{B.2}$$

přičemž diagonální matice $\mathbf{W}$ má na diagonále prvky vektoru $\mathbf{w}$. Začneme však bez vážení, tedy bez $\mathbf{W}$ resp. $\mathbf{w}$.

B.1.1. Úloha bez vah

Provedeme-li standardní Gramovu-Schmidtovu ortogonalizaci sloupců matice $\mathbf{X}$ a přidáme zbývající vektor, dostaneme ortonormální matici, jejíž sloupce tvoří bázi $\mathbb{R}^4$. Je třeba mít na paměti, že tato matice není dána jednoznačně, že když například vynásobíme některé (nebo všechny) sloupce konstantou -1, dostaneme matici se stejnými vlastnostmi. Následující vyjádření má znaménka zvolena tak, aby bylo konzistentní s výsledkem programu R.

$$\mathbf{P} = (\mathbf{Q}, \mathbf{N}) = \left(\begin{pmatrix} -1/2 & 3/\sqrt{20} & 1/2 \\ -1/2 & 1/\sqrt{20} & -1/2 \\ -1/2 & -1/\sqrt{20} & -1/2 \\ -1/2 & -3/\sqrt{20} & 1/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1/\sqrt{20} \\ -3/\sqrt{20} \\ 3/\sqrt{20} \\ -1/\sqrt{20} \end{pmatrix} \right).$$

Souřadnice jednotlivých sloupců matice $\mathbf{X}$ obsahuje matice $\mathbf{R}$

$$\mathbf{R} = \mathbf{Q}'\mathbf{X} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & -10 \\ 0 & -\sqrt{20} & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}. \tag{B.3}$$

Souřadnice vektoru $\mathbf{y}$ v bázi tvořené sloupci matice $\mathbf{P}$ jsou dány vztahem

$$\mathbf{P}'\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ -96/\sqrt{20} \\ 10 \\ 8/\sqrt{20} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -21{,}466253 \\ 10 \\ 1{,}788854 \end{pmatrix}.$$

Odtud je pomocí prvních tří složek vektoru $\mathbf{P}'\mathbf{y}$

$$\hat{\mathbf{y}} = 0 \begin{pmatrix} -1/2 \\ -1/2 \\ -1/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} - \frac{96}{\sqrt{20}} \begin{pmatrix} 3/\sqrt{20} \\ 1/\sqrt{20} \\ -1/\sqrt{20} \\ -3/\sqrt{20} \end{pmatrix} + 10 \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/2 \\ -1/2 \\ +1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -9{,}4 \\ -9{,}8 \\ -0{,}2 \\ 19{,}4 \end{pmatrix} \tag{B.4}$$

a podobně s použitím poslední složky $\mathbf{P}'\mathbf{y}$

$$\mathbf{u} = \frac{8}{\sqrt{20}} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{20} \\ -3/\sqrt{20} \\ 3/\sqrt{20} \\ -1/\sqrt{20} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}4 \\ -1{,}2 \\ 1{,}2 \\ -0{,}4 \end{pmatrix}. \tag{B.5}$$

Protože sloupce matice $\mathbf{P}$ mají jednotkovou délku a v našem případě je vektor reziduí $\mathbf{u}$ násobkem jediného (posledního) sloupce matice $\mathbf{P}$, je koeficient $8/\sqrt{20}$ nutně roven odmocnině S reziduálního rozptylu S^2.

Snadno ověříme, že vektor $\hat{\mathbf{y}}$ můžeme vyjádřit jako

$$\hat{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} -9{,}4 \\ -9{,}8 \\ -0{,}2 \\ 19{,}4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -6{,}25 \\ 4{,}80 \\ 1{,}25 \end{pmatrix},$$

takže je $\mathbf{b} = (-6{,}25, 4{,}8, 1{,}25)'$.

Místo matice $\mathbf{X}$ při vyvolání funkce `a <- lm(y~Xa)` použijeme pouze $\mathbf{X}_a$, protože absolutní člen je do modelu vkládán standardně. Kdybychom chtěli použít celou matici $\mathbf{X}$, zvolili bychom příkaz `a <- lm(y~X-1)`, abychom zabránili standardnímu přidávání absolutního členu. (Pozor, objekt `X` resp. `Xa` musí být matice!)

Výsledkem je objekt `a`, který je složen z řady položek. Jejich názvy lze získat příkazem `names(a)`:

```
> names(a)
 [1] "coefficients"  "residuals"     "effects"       "rank"
 [5] "fitted.values" "assign"        "qr"            "df.residual"
 [9] "xlevels"       "call"          "terms"         "model"
```

V položce `a$qr` je uložen zašifrovaný QR rozklad matice $\mathbf{X}$, souřadnice $\mathbf{P}'\mathbf{y}$ vektoru $\mathbf{y}$ v ortonormální bázi obsahuje `a$effects`. Vektor reziduí $\mathbf{u}$ je uložen v `a$residuals`, vektor $\hat{\mathbf{y}}$ vyrovnaných hodnot je v `a$fitted.values`. Koeficienty vyjádření $\hat{\mathbf{y}}$ pomocí sloupců matice $\mathbf{X}$ jsou v `a$coefficients`. Pokud by matice $\mathbf{X}$ neměla sloupce lineárně nezávislé (platí `a$rank<ncol(X)`), nebudou některé souřadnice tohoto vektoru definovány – stačí tam doplnit nuly. Matice vstupních dat $(\mathbf{y}, \mathbf{X}_a)$ je součástí objektu `a` jako `a$model`. Některé z uvedených statistik lze z objektu `a` získat použitím funkcí `coefficients(a)`, `effects(a)`, `residuals(a)` a `fitted.values(a)`. Existují i zkrácená volání, jako např. `coef()`, `resid()` nebo `fitted()`.

Použijeme-li příkaz `print(a)`, dostaneme text:

```
Call:
lm(formula = y ~ Xa)

Coefficients:
(Intercept)       Z2       Z3
     -0.625    0.500    0.125
```

V řádku `coefficients` jsou uvedeny složky vektoru **b**. Příkaz `summary(a)` vytiskne podrobnější informaci o lineárním modelu:

```
Call:
lm(formula = y ~ Xa)

Residuals:
   1    2    3    4
 0.4 -1.2  1.2 -0.4

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  -6.2500     1.4318  -4.365   0.1434
Xa1           4.8000     0.4000  12.000   0.0529 .
Xa2           1.2500     0.2236   5.590   0.1127
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 1.789 on 1 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9943,     Adjusted R-squared: 0.983
F-statistic: 87.2 on 2 and 1 degrees of freedom,       p-value: 0.07532
```

V odstavci `Coefficients` je vždy vedle bodového odhadu b_j uvedena střední chyba tohoto odhadu $S\sqrt{v_{jj}}$, testová statistika T_j podle (2.25) pro test nulové hypotézy $\mathsf{H}_0 : \beta_j = 0$ a odpovídající dosažená hladina testu při oboustranné alternativě. Případná významnost testových statistik je označena běžným způsobem pomocí hvězdiček. Pod označením `Residual standard error` je statistika S, dále následují koeficient determinace R^2 a upravený koeficient determinace R^2_{adj}, o kterých bude řeč později. Později podrobněji uvedeme testy podmodelu, k nimž se vztahuje také F statistika a dosažená hladina testu.

Abychom vypsali rozklad matice **X** na součin **QR**, použijeme příkaz `a$qr`:

```
> a$qr
$qr
  X.1       X.2          X.3
1 -2.0  0.0000000 -1.000000e+01
2  0.5 -4.4721360 -8.881784e-16
3  0.5  0.4472136  8.000000e+00
4  0.5  0.8944272 -9.296181e-01
$qrattr("assign")
[1] 1 1 1

$qraux
[1] 1.500000 1.000000 1.368524

$pivot
[1] 1 2 3

$tol
[1] 1e-07
```

```
$rank
[1] 3
```

Zcela stejný výsledek bychom dostali pomocí funkce `qr(cbind(1,Xa))` nebo `qr(X)`. Pod označením `$qr` jsme dostali matici stejného rozměru jako **X**, jejíž horní trojúhelníková část obsahuje horní trojúhelník matice **R**. Zbytek matice spolu s vektorem `$qraux` obsahuje informaci potřebnou k rekonstrukci matice **Q**. Zjištěná hodnost matice **X** uvedena jako `$rank`. Tato hodnota do jisté míry (v případě špatné podmíněnosti matice **X**) závisí na volbě tolerance `$tol`.

Matice **Q** a **R** získáme, když na kompaktní zápis použijeme funkce `qr.Q()` a `qr.R()`:

```
> qr.Q(a$qr)
     [,1]       [,2] [,3]
[1,] -0.5  0.6708204  0.5
[2,] -0.5  0.2236068 -0.5
[3,] -0.5 -0.2236068 -0.5
[4,] -0.5 -0.6708204  0.5
> qr.R(a$qr)
   X.1       X.2           X.3
1   -2  0.000000 -1.000000e+01
2    0 -4.472136 -8.881784e-16
3    0  0.000000  8.000000e+00
```

Lze si nechat spočítat celou čtvercovou ortonormální matici **P**. Stačí ve funkci `qr.Q()` nastavit volitelný parametr `complete=T`:

```
> qr.Q(qr(X),complete=T)
     [,1]       [,2] [,3]       [,4]
[1,] -0.5  0.6708204  0.5  0.2236068
[2,] -0.5  0.2236068 -0.5 -0.6708204
[3,] -0.5 -0.2236068 -0.5  0.6708204
[4,] -0.5 -0.6708204  0.5 -0.2236068
```

Vraťme se ještě k příkazu `summary.lm()`. Výsledkem je objekt, složený z dalších zajímavých informací:

```
> names(s<-summary(a))
 [1] "call"          "terms"         "residuals"     "coefficients"
 [5] "sigma"         "df"            "r.squared"     "adj.r.squared"
 [9] "fstatistic"    "cov.unscaled"
```

Upozorňuji zejména na informace o odhadech regresních koeficientů

```
> s$coefficients
            Estimate Std. Error   t value   Pr(>|t|)
(Intercept)    -6.25  1.4317821 -4.365189 0.14336634
Xa1             4.80  0.4000000 12.000000 0.05292935
Xa2             1.25  0.2236068  5.590170 0.11269007
```

a na (odhadnutou) varianční matici těchto koeficientů:

```
> s$cov.unscaled
             (Intercept)           Xa1           Xa2
(Intercept)  6.406250e-01  1.551584e-17 -7.812500e-02
Xa1          1.551584e-17  5.000000e-02 -3.103168e-18
Xa2         -7.812500e-02 -3.103168e-18  1.562500e-02
```

B.1.2. Úloha s vahami

V oddílu 2.8 jsme ukázali, jak převedeme lineární model $\mathbf{Y} \sim \left(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{W}^{-1}\right)$ s obecnější varianční maticí na model s varianční maticí $\sigma^2\mathbf{I}$. Procedura `lm` s parametrem `weights=w` použije QR rozklad matice $\mathbf{X}^*$. Proto dostaneme poněkud jiné bodové odhady, než v modelu bez vah

```
> summary(a.w <- lm(y~Xa,weight=w))

Call:
lm(formula = y ~ Xa, weights = w)

Residuals:
      1       2       3       4
 0.6038 -1.8113  0.9057 -0.6038

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  -5.4858     1.1680  -4.697   0.1335
        Xa1   4.8679     0.4773  10.198   0.0622 .
        Xa2   1.1651     0.2326   5.009   0.1255
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 2.198 on 1 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9915,     Adjusted R-squared: 0.9744
F-statistic:  58.06 on 2 and 1 degrees of freedom,       p-value: 0.0924
```

Samozřejmě, dostaneme poněkud jiný QR rozklad:

```
> qr.Q(a.w$qr)
           [,1]       [,2]       [,3]
[1,] -0.3779645 -0.7357672  0.4902222
[2,] -0.3779645 -0.3065697 -0.2896767
[3,] -0.7559289  0.2452557 -0.4456565
[4,] -0.3779645  0.5518254  0.6907676
> qr.R(a.w$qr)
        XX1       XX2       XX3
1 -2.645751 -1.133893 -8.693183
2  0.000000  4.659859 -1.471534
3  0.000000  0.000000  9.447918
```

Protože máme

$$\mathbf{X}^* = \mathbf{W}^{1/2}\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix},$$

vyjde skutečně například normováním prvního sloupce matice $\mathbf{X}^*$ první sloupce matice $\mathbf{Q}$ jako

$$\pm\frac{1}{\sqrt{7}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} 0{,}377964 \\ 0{,}377964 \\ 0{,}755929 \\ 0{,}377964 \end{pmatrix}.$$

Porovnáme-li nyní vektory `fitted(aw)` a `X%*%coefficients(aw))`, zjistíme, že jsou totožné:

```
> cbind(fitted(a.w),X%*%coefficients(a.w),y-residuals(a.w))
        [,1]       [,2]       [,3]
1 -9.6037736 -9.6037736 -9.6037736
2 -9.1886792 -9.1886792 -9.1886792
3  0.5471698  0.5471698  0.5471698
4 19.6037736 19.6037736 19.6037736
```

Je tedy zřejmé, že vyrovnané hodnoty odpovídají modelu s vahami, jsou vyjádřené v původním modelu, nikoliv v modelu s hvězdičkami.

B.2. Vlastní procedury

Zde uvedeme souhrnně drobné vlastní procedury, které si autor připravil sám.

B.2.1. Inverzní predikce

```
fieller.int <- function(x,y,y0,fixed=F,approx=F,alpha=0.05){
#   vypocet intervalu spolehlivosti pro x0,
#   ktere odpovida danemu y0
#   x,y  data, z nichz odhadnuta primka
#   fixed   zda je y0 pevna hodnota (F) či realizace nah. vel. (T)
#   approx  zda se pozaduje priblizne (T) nebo Fiellerovo (F) reseni
x <- x[complete.cases(x,y)]
y <- y[complete.cases(x,y)]
b1 <- coef(a<-lm(y~x))[2]
```

```
S2 <- deviance(a)/a$df.residual
n <- length(x)
x.bar <- mean(x); y.bar <- mean(y)
Txx <- sum((x-x.bar)^2)
t2 <- qt(1-alpha/2,n-2)^2
x.Hat <- x.bar+(y0-y.bar)/b1
if (approx==F){
  A <- b1^2-S2*t2/Txx
  B <- -2*b1*(y0-y.bar)
  C <- (y0-y.bar)^2-S2*t2*((fixed==F)+1/n)
  if (A>0) {
    diskr.sqrt <- sqrt(B^2-4*A*C)
    xL <- x.bar+(-B-diskr.sqrt)/2/A
    xU <- x.bar+(-B+diskr.sqrt)/2/A
     } else {
    xL <- -Inf; xU <- Inf
    }
  } else {
  xL <- x.Hat-sqrt(S2*t2*((fixed==F)+1/n+(x.Hat-x.bar)^2/Txx))/abs(b1)
  xU <- x.Hat+sqrt(S2*t2*((fixed==F)+1/n+(x.Hat-x.bar)^2/Txx))/abs(b1)
  }
out <- c(x.Hat,xL,xU)
names(out) <- c("x.Hat","xL","xU")
return(out)
}
```

B.2.2. D'Agostinovy testy normality

```
DAgostino.test <- function(x)
{
   DNAME <- deparse(substitute(x))
   x <- x[complete.cases(x)]
   n <- length(x)
   if (n<6) stop("sample size must be at least 6")
   meanX <- mean(x)
   s<- sqrt(mean((x-meanX)**2))
   a3 <- mean((x-meanX)**3)/s**3
   a4 <- mean((x-meanX)**4)/s**4
   SD3 <- sqrt(6*(n-2)/((n+1)*(n+3)))
   SD4 <- sqrt(24*(n-2)*(n-3)*n/((n+1)**2*(n+3)*(n+5)))
   U3 <- a3/SD3
   U4 <- (a4-3+6/(n+1))/SD4
   b <-(3*(n**2+27*n-70)*(n+1)*(n+3))/((n-2)*(n+5)*(n+7)*(n+9))
   W2 <- sqrt(2*(b-1))-1
   delta <- 1/sqrt(log(sqrt(W2)))
   a <- sqrt(2/(W2-1))
```

```
   Z3 <- delta*log((U3/a)+sqrt((U3/a)**2+1))
   B <- (6*(n*n-5*n+2)/((n+7)*(n+9)))*sqrt((6*(n+3)*(n+5))/(n*(n-2)*(n-3)))
   A <- 6+(8/B)*((2/B)+sqrt(1+4/(B**2)))
   jm <- sqrt(2/(9*A))
   pos <- ((1-2/A)/(1+U4*sqrt(2/(A-4))))**(1/3)
   Z4 <- (1-2/(9*A)-pos)/jm
   omni <- Z3**2+Z4**2
   pZ3 <- 2*(1-pnorm(abs(Z3),0,1))
   pZ4 <- 2*(1-pnorm(abs(Z4),0,1))
   pomni <- 1-pchisq(omni,2)
   skewness <- c(Z3,pZ3)
   kurtosis <- c(Z4,pZ4)
   omnibus <- c(omni,pomni)
   DA <- cbind(skewness,kurtosis,omnibus)
   row.names(DA)<-c("statistics","p-value")
   return(DA)
}
skewness.test <- function(x)
{
   DNAME <- deparse(substitute(x))
   x <- x[complete.cases(x)]
   n <- length(x)
   if (n<8) stop("sample size must be at least 8")
   meanX <- mean(x)
   s<- sqrt(mean((x-meanX)**2))
   a3 <- mean((x-meanX)**3)/s**3
   SD3 <- sqrt(6*(n-2)/((n+1)*(n+3)))
   U3 <- a3/SD3
   b <-(3*(n**2+27*n-70)*(n+1)*(n+3))/((n-2)*(n+5)*(n+7)*(n+9))
   W2 <- sqrt(2*(b-1))-1
   delta <- 1/sqrt(log(sqrt(W2)))
   a <- sqrt(2/(W2-1))
   Z3 <- delta*log((U3/a)+sqrt((U3/a)**2+1))
   pZ3 <- 2*(1-pnorm(abs(Z3),0,1))
   names(Z3) <- "Z3"
   RVAL <- list(statistic=Z3,
method="D'Agostino skewness normality test",
p.value=pZ3,
data.name=DNAME)
   class(RVAL) <- "htest"
   return(RVAL)
}
kurtosis.test <- function(x)
{
   DNAME <- deparse(substitute(x))
   x <- x[complete.cases(x)]
   n <- length(x)
   if (n<20) stop("sample size must be at least 20")
```

```
   meanX <- mean(x)
   s<- sqrt(mean((x-meanX)**2))
   a4 <- mean((x-meanX)**4)/s**4
   SD4 <- sqrt(24*(n-2)*(n-3)*n/((n+1)**2*(n+3)*(n+5)))
   U4 <- (a4-3+6/(n+1))/SD4
   B <- (6*(n*n-5*n+2)/((n+7)*(n+9)))*sqrt((6*(n+3)*(n+5))/(n*(n-2)*(n-3)))
   A <- 6+(8/B)*((2/B)+sqrt(1+4/(B**2)))
   jm <- sqrt(2/(9*A))
   pos <- ((1-2/A)/(1+U4*sqrt(2/(A-4))))**(1/3)
   Z4 <- (1-2/(9*A)-pos)/jm
   pZ4 <- 2*(1-pnorm(abs(Z4),0,1))
   names(Z4) <- "Z4"
   RVAL <- list(statistic=Z4,
method="D'Agostino kurtosis normality test",
p.value=pZ4,
data.name=DNAME)
   class(RVAL) <- "htest"
   return(RVAL)
}
omnibus.test <- function(x)
{
   DNAME <- deparse(substitute(x))
   x <- x[complete.cases(x)]
   n <- length(x)
   if (n<20) stop("sample size must be at least 20")
   meanX <- mean(x)
   s<- sqrt(mean((x-meanX)**2))
   a3 <- mean((x-meanX)**3)/s**3
   a4 <- mean((x-meanX)**4)/s**4
   SD3 <- sqrt(6*(n-2)/((n+1)*(n+3)))
   SD4 <- sqrt(24*(n-2)*(n-3)*n/((n+1)**2*(n+3)*(n+5)))
   U3 <- a3/SD3
   U4 <- (a4-3+6/(n+1))/SD4
   b <-(3*(n**2+27*n-70)*(n+1)*(n+3))/((n-2)*(n+5)*(n+7)*(n+9))
   W2 <- sqrt(2*(b-1))-1
   delta <- 1/sqrt(log(sqrt(W2)))
   a <- sqrt(2/(W2-1))
   Z3 <- delta*log((U3/a)+sqrt((U3/a)**2+1))
   B <- (6*(n*n-5*n+2)/((n+7)*(n+9)))*sqrt((6*(n+3)*(n+5))/(n*(n-2)*(n-3)))
   A <- 6+(8/B)*((2/B)+sqrt(1+4/(B**2)))
   jm <- sqrt(2/(9*A))
   pos <- ((1-2/A)/(1+U4*sqrt(2/(A-4))))**(1/3)
   Z4 <- (1-2/(9*A)-pos)/jm
   omni <- Z3**2+Z4**2
   pomni <- 1-pchisq(omni,2)
   df <- c(2)
   names(omni) <- "Chi2"
   names(df) <- "df"
```

```
   RVAL <- list(statistic=omni,
method="D'Agostino omnibus normality test",
parameter=df,
p.value=pomni,
data.name=DNAME)
   class(RVAL) <- "htest"
   return(RVAL)
}
```

C. Data

Příklad C.1 (Protoconid) Sleduje se velikost plochy jistého hrbolku dolní sedmičky (Protoconid) a její celková plocha ve třech skupinách archeologických nálezů, které odpovídají různým vývojovým stádiím, zde značeným symboly *r, m, s*. Použitá data jsou uvedena v tabulce C.1.

○

skup.	celková plocha	plocha Metaconid	skup.	celková plocha	plocha Metaconid
r	89,66	19,97	r	82,68	19,23
r	81,11	18,57	r	86,32	19,18
r	85,19	18,60	r	83,72	18,73
r	78,81	15,69	r	91,37	19,10
r	97,23	19,92	r	85,75	21,72
r	87,19	20,02	r	92,84	21,25
r	76,53	18,88	r	81,58	17,96
r	98,51	23,81	r	80,95	17,01
r	87,35	19,51	r	77,56	21,04
r	92,83	21,78	r	89,48	19,70
r	77,33	18,55	r	93,11	17,58
r	92,15	20,83	r	91,78	21,07
r	77,92	14,98	r	86,22	19,56
m	102,87	19,23	m	87,01	18,03
m	113,85	23,70	m	119,73	27,67
m	105,15	21,02	m	117,65	24,65
m	99,77	20,90	m	104,72	25,90
m	93,53	21,15	m	90,15	18,58
s	146,09	28,22	s	125,33	28,68
s	112,32	21,66	s	98,54	19,98
s	96,26	20,22	s	120,03	23,58
s	132,51	27,36	s	104,73	24,59

Tabulka C.1: Velikosti ploch dolních sedmiček

Literatura

J. Anděl (1978). *Matematická statistika.* SNTL, Praha.

J. Anděl (1998). *Statistické metody.* MATFYZPRESS, Praha.

J. Anděl (2005). *Základy matematické statistiky.* MATFYZPRESS, Praha.

F. J. Anscombe (1961). Examination of residuals. Sborník *Proc. 4th Berkeley Symp.*, volume 1, str. 1–36.

J. Antoch, D. Vorlíčková (1992). *Vybrané metody statistické analýzy dat.* Academia, Praha.

L. Armijo (1966). Minimization of functions having continuous partial derivatives. *Pacific. J. Math.*, 16, 1–3.

M. Atiqullah (1962). The estimation of residual variance in quadraticall balanced least-squares problems and the robustness of the F-test. *Biometrika*, 49, 83–91.

D. M. Bates, D. G. Watts (1980). Relative curvature measures of nonlinearity. *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B*, 42, 1–25.

G. E. Box, G. S. Watson (1962). Robustness to non-normality of regression tests. *Biometrika*, 62, 93–106.

T. S. Breusch, A. R. Pagan (1979). A simple test for heteroscedasticity and random coefficient variation. *Econometrice*, 47, 1287–1294.

W. J. Conover, M. E. Johnson, M. M. Johnson (1981). A comparative study of tests for homogeneity of variances, with applications to the outer continental shelf bidding data. *Technometrics*, 23, 351–361.

R. D. Cook (1993). Exploring partial residual plots. *Technometrics*, 35, 351–362.

R. D. Cook, S. Weisberg (1983). Diagnostics for heteroscedasticity in regression. *Biometrika*, 70, 1–10.

J. R. Donaldson, R. B. Schnabel (1987). Computational experience with confidence regions and confidence intervals for nonlinear least squares. *Technometrics*, 29, 67–82.

J. Durbin, G. S. Watson (1971). Testing for serial correlation and least squares regression. *Biometrika*, 58, 1–19.

M. Ezekiel, K. A. Fox (1959). *Methods of correlation and regression analysis.* Wiley, New York.

R. W. Farebrother (1980). Algorithm as 153: Pan's procedure for the tail probabilities of the durbin-watson statistics. *Applied Statistics*, 29, 224–227.

R. W. Farebrother (1984). Remark as r53: A remark on algorithm as 106, as 153 and as 155: The distribution of a linear combination of χ^2 random variables. *Applied Statistics*, 33, 366–369.

F. Galton (1886a). Family likeness in stature. *Proc. Roy. Soc.*, 40, 42–63.

F. Galton (1886b). Regression towards mediocrity in hereditary stature. *Journ. Anthrop. Inst.*, 15, 246–263.

W. P. Gardiner (1997). *Statistics for Biosciences.* Prentice Hall.

G. J. Hahn, S. S. Shapiro (1967). *Statistical Models in Engineering.* Wiley, New York. Existuje ruský překlad.

A. C. Harvey, P. Collier (1977). Testing for functional misspecification in regression analysis. *Journal of the Econometrics*, 6, 103–119.

T. Havránek (1993). *Statistika pro biologické a lékařské vědy.* Academia, Praha.

W. W. Howells (1996). Howells' craniometric data on the internet. *American Journal of Physical Anthropology*, str. 441–442.

S. Jeyaratnam (1982). A sufficient condition on the covariance matrix for F tests in linear models to be valid. *Biometika*, 69, 679–680.

M. Jílek (1988). *Toleranční meze.* SNTL, Praha.

D. G. Kleinbaum (1994). *Logistic regression: a self-learning text.* Springer, New York.

R. Koenker (1981). A note on studentizing a test for heteroscedasticity. *Journal of Econometrics*, 17, 107–112.

J. Likeš, J. Laga (1978). *Základní statistcké tabulky.* SNTL, Praha.

J. D. Lyon, Chih-Ling Tsai (1996). A comparison of tests for heteroscedasticity. *The Statistician*, 45, 337–349.

F. W. McElroy (1967). A necessary and sufficient condition that ordinary least-squares estimators be best linear unbiased. *Journal of the Americal Statistical Association*, 62, 1302–1304.

J. A. Nelder, R. Mead (1965). A simplex algorithm for function minimization. *Computer Journal*, 7, 308–313.

J. Netter, W. Wasserman, M. H. Kutner (1985). *Applied linear statistical models.* Irwin, Homewood, Illinois.

V. Petráčková, J. Kraus, kol. (1995). *Akademický slovník cizích slov II.* Academia, Praha.

M. R. Ralston, R. I. Jennrich (1978). Dud, a derivative-free algorithm for nonlinear least squares. *Technometrics*, 20, 7–14.

C. R. Rao (1978). *Lineární metody statistické indukce a jejich aplikace.* Academia, Praha.

M. Štefek (1994). Porušení předpokladu o normálním rozdělení v lineárním modelu. Diplomová práce, MFF UK, Praha.

W. N. Venables, B. D. Ripley (1997). *Modern applied statistics with S-PLUS.* Springer, New York, second edition.

K. Zvára (1979). On exact confidence regions for linear regression functions. *Math. Operationsforsch. Statist., Ser. Statistics*, 10, 55–62.

K. Zvára (1989). *Regresní analýza.* Academia, Praha.

K. Zvára (1998). *Biostatistika.* Karolinum, Praha.

Rejstřík