NELINEÁRNA REGRESIA A ODHADY PARAMETROV KOVARIANČNÝCH FUNKCIÍ.

František Štulajter, KTPMŠ MFF UK, Bratislava

Úvod. Predpokladajme, že pozorujeme náhodný proces X v tvare

$$(1) \qquad X(t) = m_\beta(t) + \varepsilon(t) \; ; \; t\in T$$

kde stredná hodnota $m_\beta(.)$ náhodného procesu X spĺňa lineárny regresný model

$$m_\beta(t) = \sum_{i=1}^{k} \beta_i f_i(t); \; t\in T$$

a nech X je kovariančne stacionárny náhodný proces s (neznámou) kovariančnou funkciou $R(.)$ patriacou do danej parametrickej triedy $\mathcal{R} = \{ R_\theta \; ; \theta \in \Theta \}$ kovariančných funkcií, pričom $\Theta \subset E^p$ a závislosť R_θ na θ je nelineárna. Príkladmi takýchto tried kovariančných funkcií môžu byť kovariančné funkcie dané vzťahom

$$R_\theta(t) = \sigma^2 e^{-\alpha t} \cos\beta t, \quad \text{kde} \quad \theta = (\sigma^2,\alpha,\beta)', \; \Theta = (0,\infty) \times (0,\infty) \times [0,\pi),$$

alebo $R_\theta(t) = \dfrac{\sigma^2}{1-\rho^2} \rho^t \; ; \quad \theta = (\sigma^2,\rho)' \; ; \; \Theta = (0,\infty) \times (-1,1)$.

Nech $X = (X(1),\dots,X(n))'$ je konečné diskrétne pozorovanie dĺžky n takéhoto náhodného procesu, ktoré potom môžeme zapísať v tvare

$$X = F\beta + \varepsilon \; ; \quad E[\varepsilon] = 0 \; , \quad E[\varepsilon\varepsilon'] = \Sigma_\theta$$

kde $\Sigma_\theta(i,j) = R_\theta(|i-j|) \; ; \; i,j = 1,2,\dots,n$. Teda X spĺňa lineárny regresný model s neznámou kovariančnou maticou vektora chýb.

Našim cieľom je nájsť odhad neznámeho parametra θ kovariančnej funkcie R_θ založený na konečnom pozorovaní X náhodného procesu X.

Problematika "neparametrického" odhadu kovariančnej funkcie $R(.)$ náhodného procesu X spĺňajúceho model (1) bola riešená v článku Štulajter (1991), kde bolo ukázané, že MNŠ odhady $\hat{R}_n(t); \; t = 0,1,\dots,n-1$ definované vzťahom

$$(2) \qquad \hat{R}_n(t) = \frac{1}{n-t} \sum_{s=1}^{n-t} \hat{X}(s)\, \hat{X}(s+t) \; ; \; t = 0,1,\dots,n-1$$

kde $\hat{X}(t) = X(t) - m_{\hat{\beta}}(t)$; $t = 1,2,\ldots,n$ s $\hat{\beta} = (F'F)^{-1}F'X$, sú pre každé fixné t , za podmienky $\lim_{t\to\infty} R(t) = 0$ konzistentné odhady $R(.)$ pretože platí: $\lim_{n\to\infty} E\,[\,\hat{R}_n(t) - R(t)\,]^2 = 0$ pre každé fixné t.

Niektoré metódy odhadov parametrov kovariančných funkcií

Predpokladajme teraz, že odhadovaná kovariančná funkcia patrí do parametrickej triedy $\mathcal{R} = \{\, R_\theta \; ; \; \theta \in \Theta \,\}$. Našou úlohou je nájsť odhad neznámeho parametr θ . K tomu môžeme použiť napríklad konzistentné neparametrické odhady $\hat{R}_n(t)$; $t = 0,1,\ldots,m-1$, kde $m \le n$. Tieto odhady môžeme zapísať v tvare nelineárneho regresného modelu

$$\hat{R}_n(t) = R_\theta(t) + (\,\hat{R}_n(t) - R_\theta(t)\,) \; ; \; t = 0,1,\ldots,m-1$$

resp. vo vektorovom označení

$$(3) \quad \hat{R} = R_\theta + \kappa_\theta$$

kde pre $m\times 1$ náhodný vektor $\kappa_\theta = \hat{R} - R_\theta$ platí $E\,[\kappa_\theta] \ne 0$, $\lim_{n\to\infty} E\,[\kappa_\theta] = 0$ a $\lim_{n\to\infty} E\,[(\kappa_\theta - E\,[\kappa_\theta])(\kappa_\theta - E\,[\kappa_\theta])'] = 0$, ak $\lim_{t\to\infty} R_\theta(t) = 0$.
V modeli (3) (aj keď niede o klasický nelineárny regresný model vzhľadom na to, že stredná hodnota vektora chýb κ je nenulová a chyby sú korelované) môžeme nájsť MNŠ - odhad $\hat{\theta}_m$ neznámeho parametra θ použijúc klasickú (napríklad Marquardtovu) iteračnú metódu na výpočet $\hat{\theta}_m$. Problematike skúmania limitných vlastností (pri fixnom m) pre $n\to\infty$ odhadu $\hat{\theta}_m$ je venovaná práca Hudákovej (1992).

Iná možnosť je založená na hľadaní odhadu $\tilde{\theta}_m$ spĺňajúceho vzťah

$$(4) \quad \tilde{\theta}_m = \arg\min_\theta \sum_{t=0}^{m-1} \sum_{s=1}^{n-t} (\,\hat{X}(s)\,\hat{X}(s+t) - R_\theta(t)\,)^2$$

na rozdiel od $\hat{\theta}_m$, pre ktorý platí

$$(5) \quad \hat{\theta}_m = \arg\min_\theta \sum_{t=0}^{m-1} (\,\hat{R}(t) - R_\theta(t)\,)^2 =$$

$$= \arg\min_\theta \|\,\hat{R} - R\,\|^2 .$$

Po krátkych úpravách je ľahko vidieť, že pre $n=m$,teda pre $\tilde{\theta}_n$ platí:

$$(6) \quad \tilde{\theta}_n = \arg\min_{\theta} \sum_{t=0}^{n-1} (1 - t/n) (\hat{R}_n(t) - R_\theta(t))^2 =$$

$$= \arg\min_{\theta} \| \hat{R}_n - R_\theta \|_A^2$$

kde $A = (A_{ij})_{i,j=1}^{n}$ s $A_{ij} = \delta_{ij} (1 - \frac{i-1}{n})$; $i,j = 1,2,\dots,n$ a

$$\| a \|_A^2 = \sum_{i,j=1}^{n} a_i a_j A_{ij} .$$

Vidime teda, že MNŠ odhad $\tilde{\theta}_n$, založený priamo na rezíduách $\hat{X}(.)$ a nie na odhadoch $\hat{R}_n(t)$; $t = 0,1,\dots,n-1$, dostaneme rovnakým spôsobom ako odhad $\hat{\theta}_n$, avšak nepoužijeme euklidovskú normu,ale normu definovanú pomocou kladne definitnej diagonálnej matice A .Vzniká otázka, ako sa od seba líšia odhady $\hat{\theta}_m$ a $\tilde{\theta}_m$ a ktorý z nich je lepší. V nasledujúcej časti skúmame tento problém pre autoregresný AR(1) proces prvého rádu.

Odhad parametrov kovariančnej funkcie AR(1) procesu

Je veľmi dobre známe, že kovariančná funkcia AR(1) procesu závisí na parametri $\theta = (\sigma^2, \rho)'$, kde σ^2 je disperzia bieleho šumu a ρ je autoregresný parameter a je daná vzťahom:

$$R_\theta(t) = \frac{\sigma^2}{1 - \rho^2} \rho^t \quad ; \; t = 0,1,\dots .$$

Dá sa ľahko ukázať (vyplýva to z normálnych rovníc), že ak na odhad parametra θ použijeme len hodnoty $\hat{R}(0)$ a $\hat{R}(1)$, teda ak $m=2$, tak pre MNŠ-odhad $\hat{\theta}_2 = (\hat{\sigma}_2^2 , \hat{\rho}_2)'$ platí:

$$(7) \quad \hat{\sigma}_2^2 = \frac{\hat{R}(0)^2 - \hat{R}(1)^2}{\hat{R}(0)} \quad \text{a} \quad \hat{\rho}_2 = \frac{\hat{R}(1)}{\hat{R}(0)}$$

Dá sa ľahko overiť, že platí nasledujúce tvrdenie.

Tvrdenie: Nech $\tilde{\theta}_2$ je odhad definovaný v (4) s $m=2$ a nech $\hat{\theta}_2$ je MNŠ-odhad definovaný v (7). Potom platí $\hat{\theta}_2 = \tilde{\theta}_2$.

Všeobecne, ak na odhod θ použijeme hodnoty $\hat{R}(0),\dots,\hat{R}(m)$, kde

$2 < m \leq n-1$, tak nevieme povedať, ktorý z odhadov $\hat{\theta}_m$ a $\tilde{\theta}_m$ je lepším odhadom neznámeho parametra θ . Nasledujúce simulačné štúdie však ukazujú, že tieto odhady sa od seba odlišujú len veľmi málo.

Simulačné výsledky.

Simulačné štúdie boli robené pre model (1) avšak so strednou hodnotou $m_\beta(t)$ spĺňajúcou nelineárny regresný model. Problematika skúmania vlastností MNŠ-odhadu parametrov β bola študovaná v článku Štulajter (1992a) a problematika odhadovania kovariančnej matice v nelineárnom regresnom modeli v Štulajter (1992b). "Neparametrické" hady $\hat{R}_n(.)$ definované vzťahom (2) , pričom $\hat{\beta}$ je teraz MNŠ-odhad parametra nelineárnej regresie, sú opäť (pri splnemí určitých podmienok) konzistentné odhady pre $R(.)$.

V nasledujúcich tabuľkách sú hodnoty odhadov $\hat{\theta}_m$ a $\tilde{\theta}_m$ parametra $\theta = (\sigma^2,\rho)'$ pre AR(1) proces so strednou hodnotou rovnou lineárnej kombinácii goniometrických funkcií s neznámymi frekvenciami a amplitúdami, teda spĺňajúcou nelineárny regresný model. Každý odhad bol vypočítaný z jednej realizácie dĺžky n simulácie AR(1) náhodného procesu so zadanými hodnotami parametra θ.

$n=19$ $\sigma^2=0.1$ $\rho=0.5$

m	$\hat{\sigma}_m$	$\tilde{\sigma}_m$	$\hat{\rho}_m$	$\tilde{\rho}_m$
2	0.0287	0.0287	0.0535	0.0535
3	0.0138	0.0155	0.0535	0.0535
4	0.0129	0.0148	0.0535	0.0535
5	0.0129	0.0148	0.0535	0.0535

$n=30$ $\sigma^2=0.1$ $\rho=0.5$

m	$\hat{\sigma}_m$	$\tilde{\sigma}_m$	$\hat{\rho}_m$	$\tilde{\rho}_m$
2	0.0725	0.0725	0.3621	0.3621
3	0.0956	0.0963	0.3618	0.3618
4	0.0904	0.0918	0.3619	0.3619
5	0.0952	0.0959	0.3618	0.3618

$n=99$ $\sigma^2=1$ $\rho=0.2$

m	$\hat{\sigma}_m$	$\tilde{\sigma}_m$	$\hat{\rho}_m$	$\tilde{\rho}_m$
2	1.1563	1.1563	0.2282	0.2282
3	1.1513	1.1518	0.2294	0.2293
4	1.1425	1.1432	0.2319	0.2318
5	1.1406	1.1414	0.2325	0.2323
6	1.1406	1.1415	0.2325	0.2323

$n=99$ $\sigma^2=0.5$ $\rho=0.7$

m	$\hat{\sigma}_m$	$\tilde{\sigma}_m$	$\hat{\rho}_m$	$\tilde{\rho}_m$
2	0.5721	0.5721	0.6592	0.6592
3	0.5696	0.5701	0.6583	0.6587
4	0.5651	0.5659	0.6575	0.6580
5	0.5633	0.5643	0.6572	0.6578
6	0.5644	0.5654	0.6567	0.6573

Ako vidíme z týchto tabuliek, odhady $\hat{\theta}_m$ a $\tilde{\theta}_m$ sa líšia od seba len veľmi málo, takže pre skúmaný prípad AR(1) procesu je jedno, ktorý z odhadov $\hat{\theta}_m$ a $\tilde{\theta}_m$ použijeme. Z uvedených tabuliek môžeme tiež vyvodiť záver, že na odhad parametra $\theta = (\sigma^2, \rho)'$ nám stačia len odhady hodnôt $\hat{R}(0)$ a $\hat{R}(1)$. Pridanie ďalších hodnôt $\hat{R}(t); t = 2,3,\dots,n-1$ podstatne nezlepšuje odhady $\hat{\theta}_m$ a $\tilde{\theta}_m$ (pre $m = 3,4,\dots,n-1$).

Literatúra.

[1] Guido del Pino (1989). The unifying role of iterative least squares algorithms. Statistical Science 4, 394-408.

[2] Hudáková, J. (1992). Odhady parametrov kovariančných funkcií.Kandid. dizert. práca.

[3] Hudáková, J., Štulajter, F. (1991). An approximate least squares estimator in nonlinear regression and some of its properties.Zborník konferencie Probastat' 91.

[4] Štulajter, F. (1989). Odhady v náhodných procesoch. Bratislava,Alfa.

[5] Štulajter, F. (1991). Consistency of linear and quadratic least squares estimators in regression models with covariance stationary errors. Appl. Math. 36, 149-155.

[6] Štulajter, F. (1992a). Mean square error matrix of an approximate least squares estimator in a nonlinear regression model with correlated errors. Výjde v AMUC.

[7] Štulajter, F. (1992b). On estimation of a covariance function of stationary errors in a nonlinear regression model. Zaslané na publikovanie.