Volba vyhlazovací matice pro jádrové odhady vícerozměrných hustot

Ivana Horová, Jan Koláček, Kamila Vopatová

Oddělení aplikované matematiky
Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita

Obsah

1. Úvod
2. Metody pro odhad H – Metody založené na MISE
3. Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE
4. Jiné metody pro odhad H
5. Simulovaná data
6. Reálná data
7. Reference

Obsah

1 Úvod

2 Metody pro odhad H – Metody založené na MISE

3 Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE

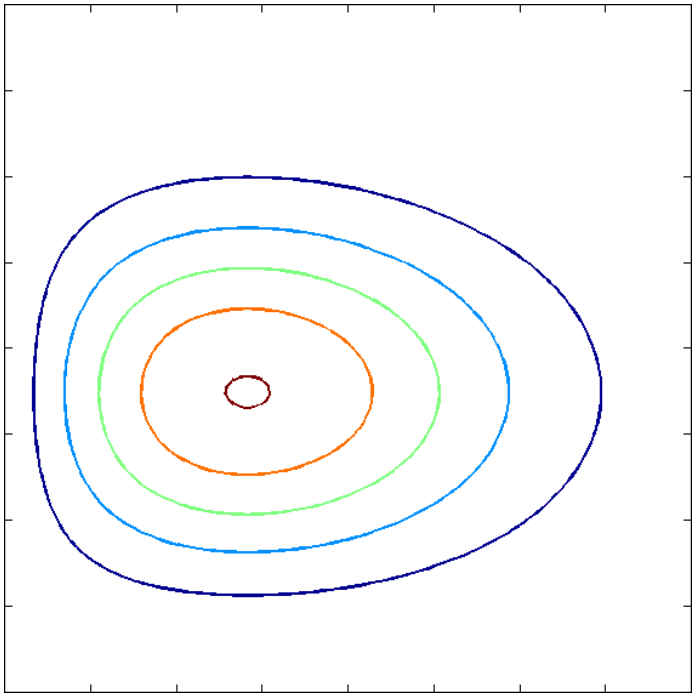
4 Jiné metody pro odhad H

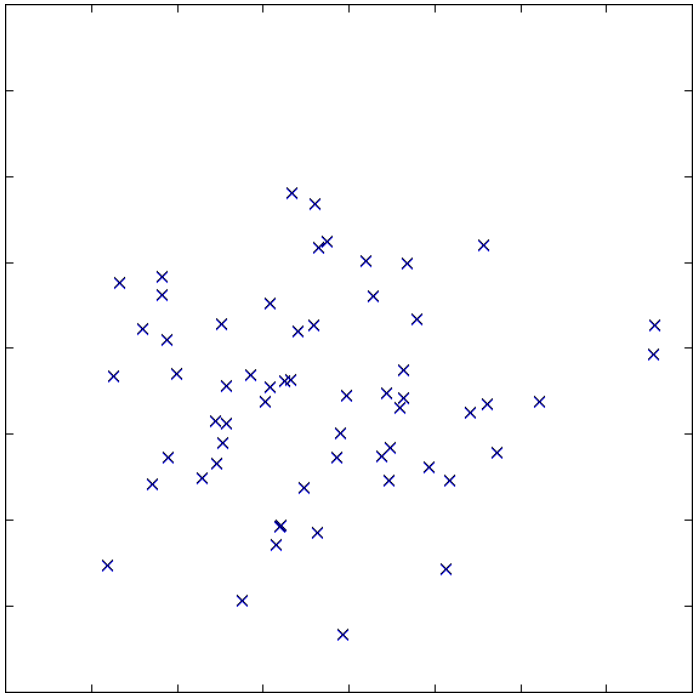
5 Simulovaná data

6 Reálná data

7 Reference

Motivace





Jádrový odhad vícerozměrné hustoty

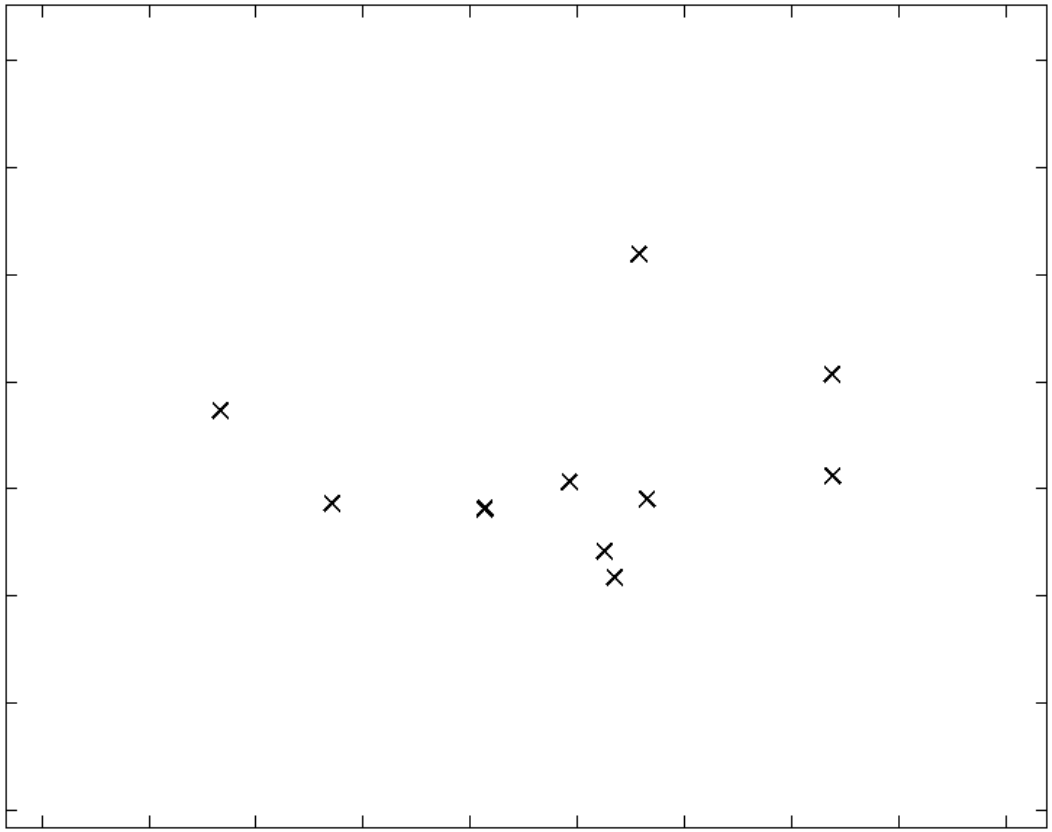
Pro d-rozměrný náhodný výběr $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_n$ z rozdělení s hustotou f definujeme jádrový odhad hustoty

$$\hat{f}(\mathbf{x}, H) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} K_H(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i) = \frac{1}{n} |H|^{-1/2} \sum_{i=1}^{n} K\left(H^{-1/2}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i)\right),$$

- K je d-rozměrná jádrová funkce, pro kterou platí $\int_{\mathbb{R}^d} K(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x} = 1$
- H je matice vyhlazovacích parametrů z množiny $\mathcal{F}$ symetrických pozitivně definitních matic typu $d \times d$
- $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d$

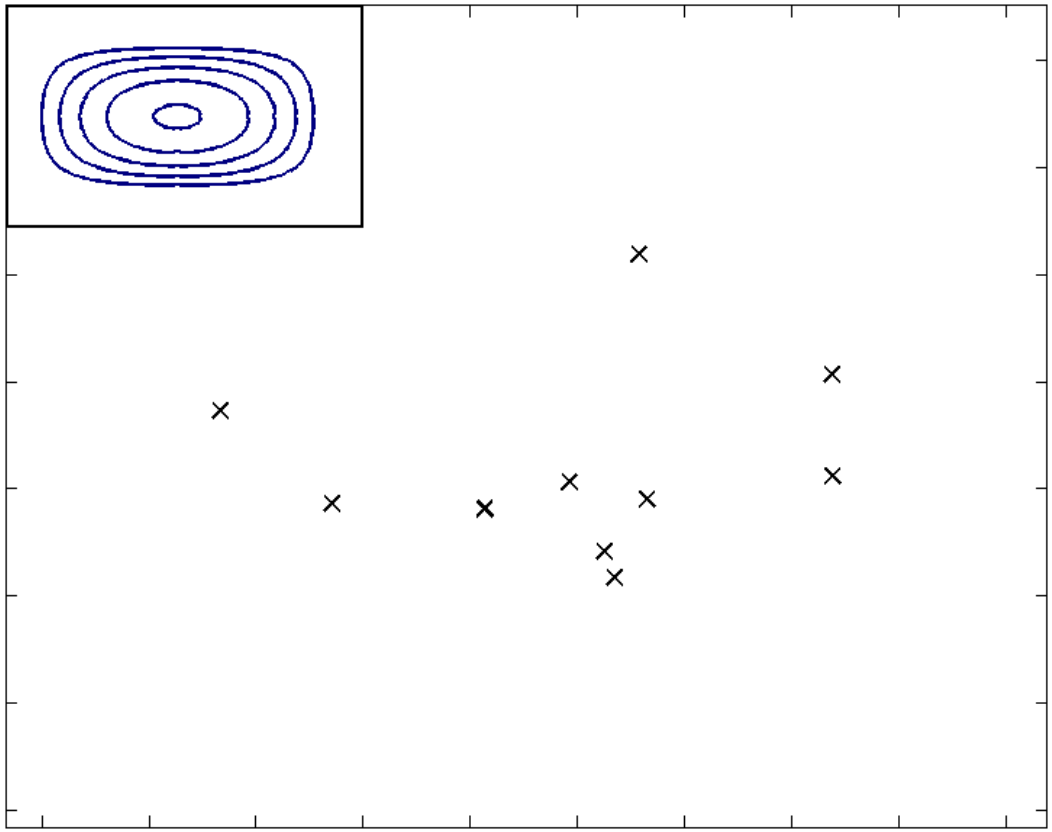
Data – Jádro – Hustota

Pro daná data



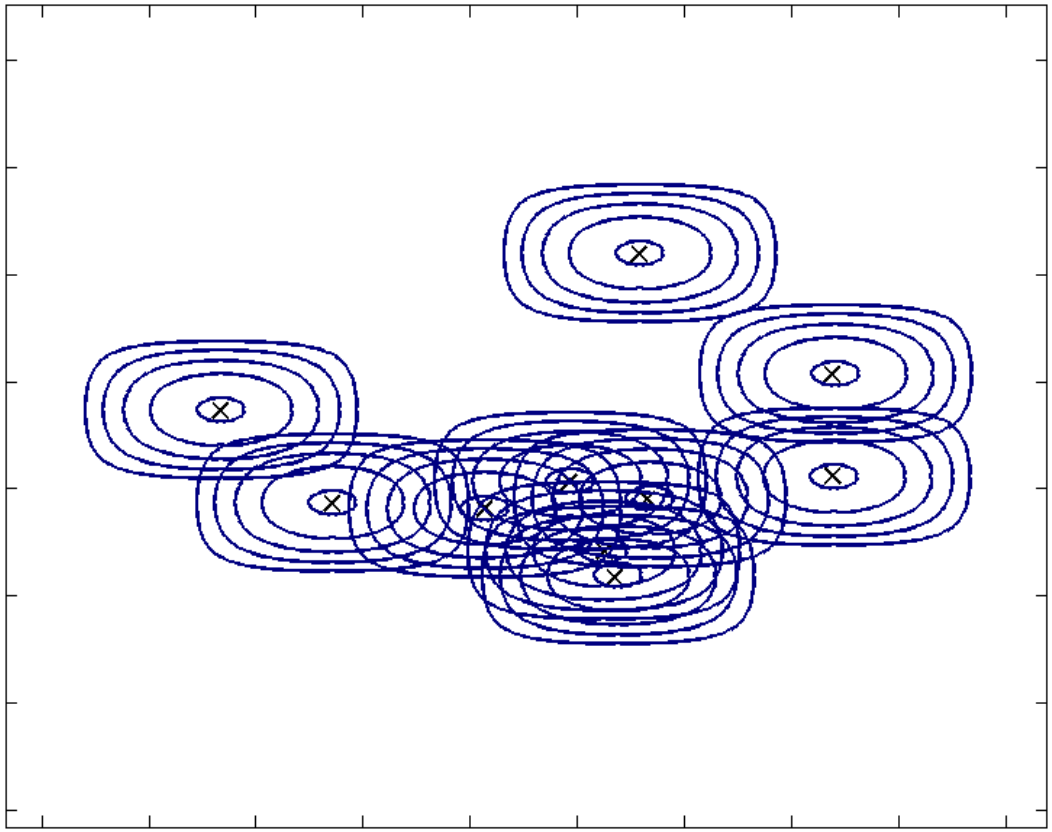
Data – Jádro – Hustota

vybereme jádro, např. Epanečnikovo



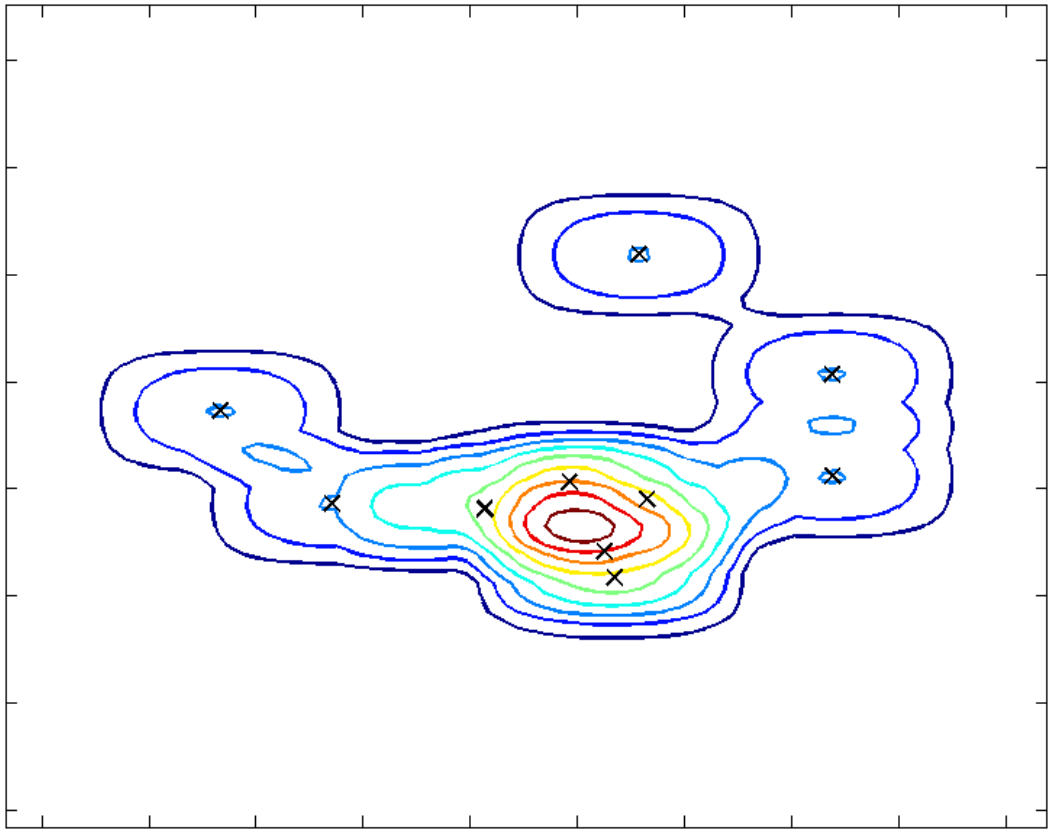
Data – Jádro – Hustota

vyčíslíme v každém bodě



Data – Jádro – Hustota

a získáme rekonstruovanou hustotu.

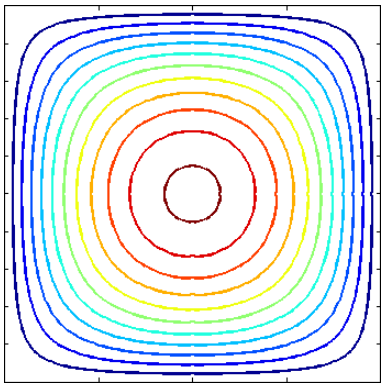


Jádrový odhad vícerozměrné hustoty

Typ jádra – z jednorozměrného jádra lze vytvořit dvě různá vícerozměrná jádra:

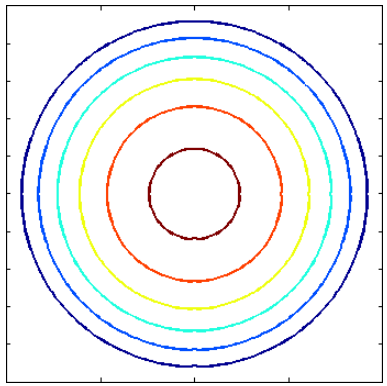
- součinové jádro

$$K^P(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{d} K(x_i)$$



- sféricky symetrické jádro

$$K^S(\mathbf{x}) = \frac{K((\mathbf{x}^T\mathbf{x})^{1/2})}{\int K((\mathbf{x}^T\mathbf{x})^{1/2})\,\mathrm{d}\mathbf{x}}$$



Výběr mnohorozměrného jádra

Vybrat si součinové jádro K^P nebo sféricky symetrické K^S?
Měřítkem optimality je funkcionál C_d [Wand & Jones, 1995]

$$C_d(K) = \left(V(K)^4 \beta_2(K)^{2d}\right)^{1/(d+4)} \to \min$$

Řešením této úlohy jsou *optimální jádra*.
Mezi součinovými jádry nejlépe vychází *Epanečnikovo* součinové jádro.

Matice vyhlazovacích parametrů H

- nejdůležitější složka při jádrovém vyhlazování
- má vliv na orientaci jádra a jeho „šířku“
- 3 třídy vyhlazovacích matic
  - $\mathcal{F}$: obecná třída symetrických pozitivně definitních matic s $\frac{1}{2}d(d+1)$ nezávislými prvky,
  - $\mathcal{D}$: diagonální matice tvaru $H = \mathrm{diag}(h_1^2, \ldots, h_d^2)$,
  - $\mathcal{S}$: třída nejjednodušších matic typu $H = h^2 \cdot I_d$

Pro třídy $\mathcal{D}$ a $\mathcal{S}$ lze psát odhad hustoty v jednodušším tvaru

$$\mathcal{D}: \quad \hat{f}(\mathbf{x}, H) = \frac{1}{n h_1 \cdots h_d} \sum_{i=1}^{n} K\Big(\frac{x_1 - X_1}{h_1}, \ldots, \frac{x_d - X_d}{h_d}\Big)$$

$$\mathcal{S}: \quad \hat{f}(\mathbf{x}, H) = \frac{1}{n h^d} \sum_{i=1}^{n} K\big((\mathbf{x} - \mathbf{X}_i)/h\big)$$

Obsah

1 Úvod

2 Metody pro odhad H – Metody založené na MISE

3 Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE

4 Jiné metody pro odhad H

5 Simulovaná data

6 Reálná data

7 Reference

MISE

Kvalitu odhadu $\hat{f}$ můžeme měřit např. pomocí střední integrální kvadratické chyby (MISE) [Wand & Jones, 1995]

$$\begin{aligned} MISE\hat{f}(\cdot, H) &= E \int \left(\hat{f}(\mathbf{x}, H) - f(\mathbf{x})\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x} \\ &= \int \operatorname{var} \hat{f}(\mathbf{x}, H)\, \mathrm{d}\mathbf{x} + \int \left(\operatorname{bias} \hat{f}(\mathbf{x}, H)\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x}, \end{aligned}$$

kde

$$\int \operatorname{var} \hat{f}(\mathbf{x}, H)\, \mathrm{d}\mathbf{x} = \frac{1}{n}\Big[\int K_H^2(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{y})\, \mathrm{d}\mathbf{y} - \Big(\int K_H(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{y})\Big)^2\Big]$$

$$\int \left(\operatorname{bias} \hat{f}(\mathbf{x}, H)\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x} = \int \Big(\int K_H(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{y}, H)\, \mathrm{d}\mathbf{y} - \hat{f}(\mathbf{x}, H)\Big)^2 \mathrm{d}\mathbf{x}.$$

LSCV

Nevychýlená metoda křížového ověřování odhaduje integrální kvadratickou chybu (ISE) [Sain et al, 1994]

$$ISE\hat{f}(\cdot, H) = \int \left(\hat{f}(\mathbf{x}, H) - f(\mathbf{x})\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x}$$

$$= \int [\hat{f}(\mathbf{x}, H)]^2 \,\mathrm{d}\mathbf{x} - 2\int \hat{f}(\mathbf{x}, H) \cdot f(\mathbf{x}) \,\mathrm{d}\mathbf{x} + \int f^2(\mathbf{x}) \,\mathrm{d}\mathbf{x}$$

$$LSCV(H) = \int [\hat{f}(\mathbf{x}, H)]^2 \,\mathrm{d}\mathbf{x} - \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n} \hat{f}_{-i}(\mathbf{X}_i, H),$$

kde $\hat{f}_{-i}(\mathbf{x}, H) = \frac{1}{(n-1)} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} K_H(\mathbf{x} - \mathbf{X}_j)$

$$LSCV(H) = n^{-2} \sum_{i,j=1}^{n} (K_H * K_H - 2K_H)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) + 2n^{-1} K_H(0)$$

Obsah

1 Úvod

2 Metody pro odhad H – Metody založené na MISE

3 Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE

4 Jiné metody pro odhad H

5 Simulovaná data

6 Reálná data

7 Reference

Od MISE k AMISE

$$MISE\hat{f}(\cdot, H) = E \int \left(\hat{f}(\mathbf{x}, H) - f(\mathbf{x})\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x}$$
$$= \int \operatorname{var} \hat{f}(\mathbf{x}, H)\, \mathrm{d}\mathbf{x} + \int \left(\operatorname{bias} \hat{f}(\mathbf{x}, H)\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x},$$

$\longrightarrow$

$$AMISE\hat{f}(\cdot, H) = \underbrace{\frac{1}{n}\Big[\int K_H^2(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{y})\, \mathrm{d}\mathbf{y}}_{AIVar}$$
$$+ \underbrace{\int \left(\int K_H(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{y}, H)\, \mathrm{d}\mathbf{y} - \hat{f}(\mathbf{x}, H)\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x}}_{AIBias^2}$$

AMISE

Předpoklady pro přechod od MISE k asymptotickému tvaru střední integrální kvadratické chyby (AMISE):

- K je ohraničená jádrová funkce s kompaktním nosičem, pro niž platí

$$\int K(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = 1, \quad \int \mathbf{x}K(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = 0, \quad \int \mathbf{x}\mathbf{x}^T K(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \beta_2(K) I_d,$$

  kde $\beta_2(K) = \int x_i^2 K(x)\,\mathrm{d}x$ nezávisí na i a I_d je jednotková matice řádu d.
- $H = H_n$ je posloupnost vyhlazovacích matic takových, že $n^{-1}|H|^{-1/2}$ a všechny prvky H se blíží k nule pro $n \to \infty$.
- Všechny prvky matice $\mathcal{D}_f^2$ druhých derivací hustoty f jsou po částech spojité a integrovatelné se čtvercem.

AMISE

Asymptotický tvar střední integrální kvadratické chyby [Wand & Jones, 1995]

$$AMISE(H) = AIVar + AIBias^2$$

Vychýlení (*Bias*) lze s užitím vícerozměrné Taylorovy věty rozepsat

$$\begin{aligned}(K_H * f)(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}) &= \int K_H(\mathbf{x}-\mathbf{y}) f(\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{y} - f(\mathbf{x}) \\ &= \int K(\mathbf{z}) f(\mathbf{x} - H^{1/2}\mathbf{z})\,\mathrm{d}\mathbf{z} - f(\mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x}) + \tfrac{1}{2}\beta_2(K)\,\mathrm{tr}\left[H\mathcal{D}_f^2(\mathbf{x})\right] + o(\mathrm{tr}\,H) - f(\mathbf{x})\end{aligned}$$

$$Bias \sim \tfrac{1}{2}\beta_2(K)\,\mathrm{tr}\left[H\mathcal{D}_f^2(\mathbf{x})\right]$$

AMISE

Podobně můžeme rozepsat i rozptyl (Var)

$$\begin{aligned}\operatorname{var}\hat{f}(\mathbf{x},H) &= \frac{1}{n}\Big[\int K_H^2(\mathbf{x}-\mathbf{y})f(\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{y} - \Big(\int K_H(\mathbf{x}-\mathbf{y})f(\mathbf{y})\Big)^2\Big] \\ &= \frac{1}{n}|H|^{-1/2}\int K^2(\mathbf{z})f(\mathbf{x}-H^{1/2}\mathbf{z})\,\mathrm{d}\mathbf{z} \\ &= \frac{1}{n}|H|^{-1/2}V(K)f(\mathbf{x}) + o(n^{-1}|H|^{-1/2})\end{aligned}$$

$Var \sim \frac{1}{n}|H|^{-1/2}V(K)f(\mathbf{x})$
Tedy

$$AMISE(H) = \frac{1}{n}|H|^{-1/2}V(K) + \tfrac{1}{2}\beta_2^2(K)\int \operatorname{tr}^2\left[H\mathcal{D}_f^2(\mathbf{x})\right]\mathrm{d}\mathbf{x}$$

AMISE

Dále ještě upravíme tvar vychýlení

$$\int \mathrm{tr}^2 \left[H \mathcal{D}_f^2(\mathbf{x}) \right] \mathrm{d}\mathbf{x} = (\mathrm{vech}\, H)^T \Psi_{\mathcal{F}}\, \mathrm{vech}\, H.$$

Operace vech (z angl. vector half):

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{vech}\, A = \begin{pmatrix} a \\ c \\ d \end{pmatrix}$$

Pro $d = 2$ je matice $\Psi_{\mathcal{F}}$ tvaru

$$\begin{pmatrix} \psi_{4,0} & 2\psi_{3,1} & \psi_{2,2} \\ 2\psi_{3,1} & 4\psi_{2,2} & 2\psi_{1,3} \\ \psi_{2,2} & 2\psi_{1,3} & \psi_{0,4} \end{pmatrix}$$

kde

$$\psi_{k,\ell} = \int \frac{\partial^{k+\ell} f(\mathbf{x})}{\partial x_i^k \partial x_j^\ell} f(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x},$$

AMISE

$$AMISE(H) = \frac{1}{n}|H|^{-1/2}V(K) + \tfrac{1}{2}\beta_2^2(K)(\operatorname{vech} H)^T \Psi_{\mathcal{F}} \operatorname{vech} H$$

I přes tato zjednodušení nelze vyjádřit optimální H vzhledem k AMISE a musí se počítat numericky. [Wand & Jones, 1995]

$\mathcal{D}$: Je-li matice H diagonální, pak lze psát $H = \operatorname{diag}(h_1^2, \ldots, h_d^2) = \operatorname{diag}(\mathbf{h}^2)$ a AMISE můžeme psát ve tvaru

$$AMISE(H) = \frac{V(K)}{n h_1 \cdots h_d} + \tfrac{1}{4}\beta_2^2(K)(\mathbf{h}^2)^T \Psi_{\mathcal{D}}(\mathbf{h}^2)$$

kde $\Psi_{\mathcal{D}}$ obsahuje prvky $\psi_{2e_i+2e_j}$, e_i je jednotkový vektor s 1 na i-tém místě.

AMISE

$\mathcal{S}$: V případě $H = h^2 \cdot I_d$ dostaneme

$$AMISE(H) = \frac{V(K)}{nh^d} + \tfrac{1}{4}\beta_2^2(K)h^4 \underbrace{\int \Big[\sum_{i=1}^{d} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i^2}\Big]^2 \mathrm{d}\mathbf{x}}_{I(D^2)}$$

Jen v tomto případě lze vyjádřit optimální hodnotu vyhlazovacího parametru h

$$h_{AMISE} = \Big[d\frac{V(K)}{n\beta_2^2(K)I(D^2)}\Big]^{1/(d+4)}$$

AMISE – 2D

Zaměříme se na odhady dvourozměrné hustoty s diagonální vyhlazovací maticí H. Pak asymptotický tvar střední integrální kvadratické chyby (AMISE) lze jednoduše vyjádřit takto:

$$AMISE(H) = \frac{V(K)}{nh_1h_2} + \frac{1}{4}\beta_2(K)^2(h_1^4\psi_{4,0} + 2h_1^2h_2^2\psi_{2,2} + h_2^4\psi_{0,4}),$$

kde

- $V(K) = \int\int K^2(x_1, x_2)\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 < \infty$
- $\beta_2(K) = \int\int x_i^2 K(x_1, x_2)\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2,\ i = 1, 2$
- $\psi_{k,\ell} = \int\int \left(\frac{\partial^4 f(x_1,x_2)}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell}\right) f(x_1, x_2)\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2, \quad k, \ell = 0, 2, 4, \quad k + \ell = 4$

Lemma

Označme $H_{AMISE} = \arg\min_{H \in \mathcal{D}} AMISE(H)$. Pak pro vyhlazovací matici H_{AMISE} s prvky

$$h_{1,AMISE} = \left[\frac{\psi_{0,4}^{3/4} V(K)}{\beta_2(K)^2 \psi_{4,0}^{3/4} (\psi_{2,2} + \psi_{0,4}^{1/2} \psi_{4,0}^{1/2}) n} \right]^{1/6},$$

$$h_{2,AMISE} = \left[\frac{\psi_{4,0}^{3/4} V(K)}{\beta_2(K)^2 \psi_{0,4}^{3/4} (\psi_{2,2} + \psi_{0,4}^{1/2} \psi_{4,0}^{1/2}) n} \right]^{1/6},$$

platí

$$\iint \operatorname{var} \hat{f}(\mathbf{x}, H_{AMISE}) \, \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 = 2 \iint \left(\operatorname{bias} \hat{f}(\mathbf{x}, H_{AMISE}) \right)^2 \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2.$$

$\widehat{AMISE}$

Odhad AMISE

$$\widehat{AMISE}(H) = \int\int \widehat{\text{var}}\, \hat{f}(\mathbf{x}, H)\, \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 + \int\int \left(\widehat{\text{bias}}\, \hat{f}(\mathbf{x}, H)\right)^2 \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2,$$

kde

$$\int\int \widehat{\text{var}}\, \hat{f}(\mathbf{x}, H)\, \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 = \frac{1}{n} \int\int |H|^{-1/2} V(K) \hat{f}(\mathbf{x}, H)\, \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2,$$

$$\int\int \left(\widehat{\text{bias}}\, \hat{f}(\mathbf{x}, H)\right)^2 \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 = \int\int \left(\int\int K_H(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{f}(\mathbf{y}, H)\, \mathrm{d}y_1 \mathrm{d}y_2 - \hat{f}(\mathbf{x}, H) \right)^2 \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2.$$

$\widehat{AMISE}$ – optimální H

Úpravou předešlých rovnic získáme

$$\int\int \widehat{\text{var}}\, \hat{f}(\mathbf{x}; H)\, \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 = \frac{V(K)}{n h_1 h_2},$$

$$\int\int \left(\widehat{\text{bias}}\, \hat{f}(\mathbf{x}; H)\right)^2 \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2$$

$$= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} (K_H * K_H * K_H * K_H - 2K_H * K_H * K_H + K_H * K_H)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j),$$

kde $*$ značí operaci konvoluce.

$\widehat{AMISE}$ – optimální H

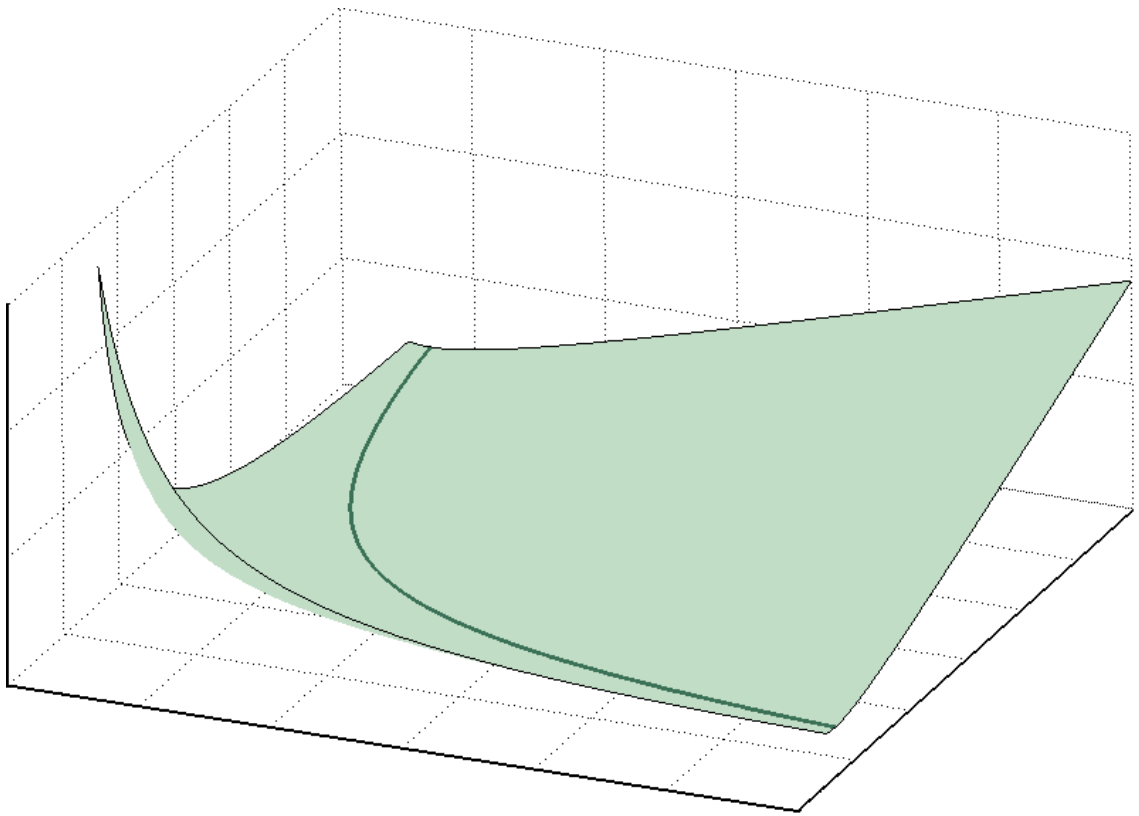
Označme

$$g(h_1, h_2) = \sum_{i,j=1}^{n} K_H * K_H * K_H * K_H - 2K_H * K_H * K_H + K_H * K_H)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)$$

Myšlenka této metody je založena na Lemmatu, tedy hledáme taková $\hat{h}_1$ a $\hat{h}_2$, aby platilo

$$IVar = 2 \cdot IBias^2$$
$$\frac{V(K)}{n\hat{h}_1\hat{h}_2} = 2 \cdot \frac{1}{n^2} g(\hat{h}_1, \hat{h}_2)$$
$$nV(K) = 2\hat{h}_1\hat{h}_2 g(\hat{h}_1, \hat{h}_2)$$

$\widehat{AMISE}$ – optimální H



Optimální $H \rightarrow$ M1

Jak najít další vztah mezi $\hat{h}_1$ a $\hat{h}_2$?

1. Scottovo pravidlo: $\hat{h}_i = \hat{\sigma}_i n^{-1/6}$, $(i = 1, 2)$ [Scott, 1992]

$$\hat{h}_2 = \hat{c}\, h_1, \qquad \hat{c} = \frac{\hat{\sigma}_2}{\hat{\sigma}_1}$$

$$M1 \begin{cases} 2\hat{h}_1 \hat{h}_2 g(\hat{h}_1, \hat{h}_2) = nV(K) \\ \hat{h}_2 = \hat{c}\hat{h}_1 \end{cases}$$

K odhadu $\hat{\sigma}_i$ můžeme použít výběrovou směrodatnou odchylku

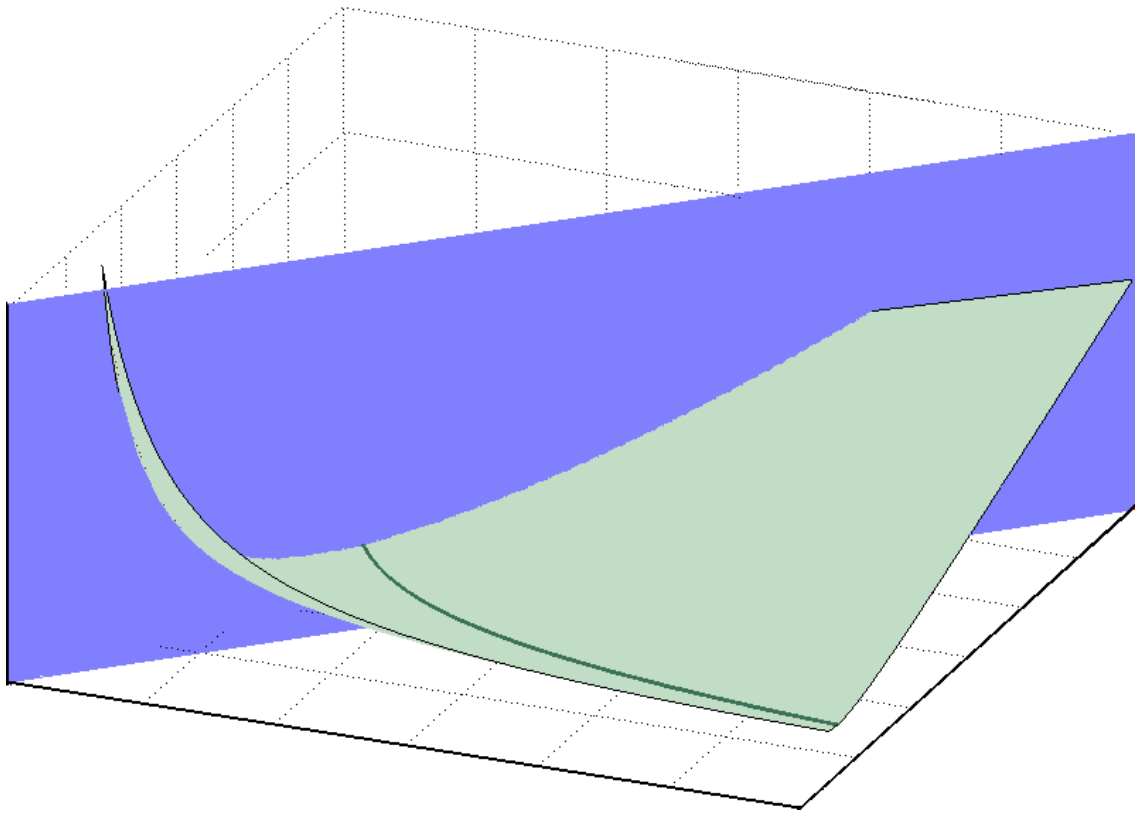
$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_{ij} - \bar{X}_i)^2, \quad i = 1, 2,$$

nebo robustnější odhad

$$\hat{\sigma}_{i,IQR} \approx \frac{X_{i[3n/4]} - X_{i[n/4]}}{1.349}, \quad i = 1, 2.$$

Doporučuje se použít menší z odhadů: $\min(\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_{i,IQR})$, $i = 1, 2$.

Řešení metody M1



Optimální $H \rightarrow$ M2

2. Podle vztahu pro optimálními hodnoty h_1 a h_2 (vzhledem k AMISE) platí

$$\frac{h_2}{h_1} = \left(\frac{\psi_{40}}{\psi_{04}}\right)^{1/4} \quad \Leftrightarrow \quad h_2^4 \psi_{04} = h_1^4 \psi_{40},$$

$$\psi_{04} = \int \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x} \approx n^{-2} \sum_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 K_H}{\partial x_2^2} * \frac{\partial^2 K_H}{\partial x_2^2}\right)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)$$

$$\psi_{40} = \int \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}\right)^2 \mathrm{d}\mathbf{x} \approx n^{-2} \sum_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 K_H}{\partial x_1^2} * \frac{\partial^2 K_H}{\partial x_1^2}\right)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)$$

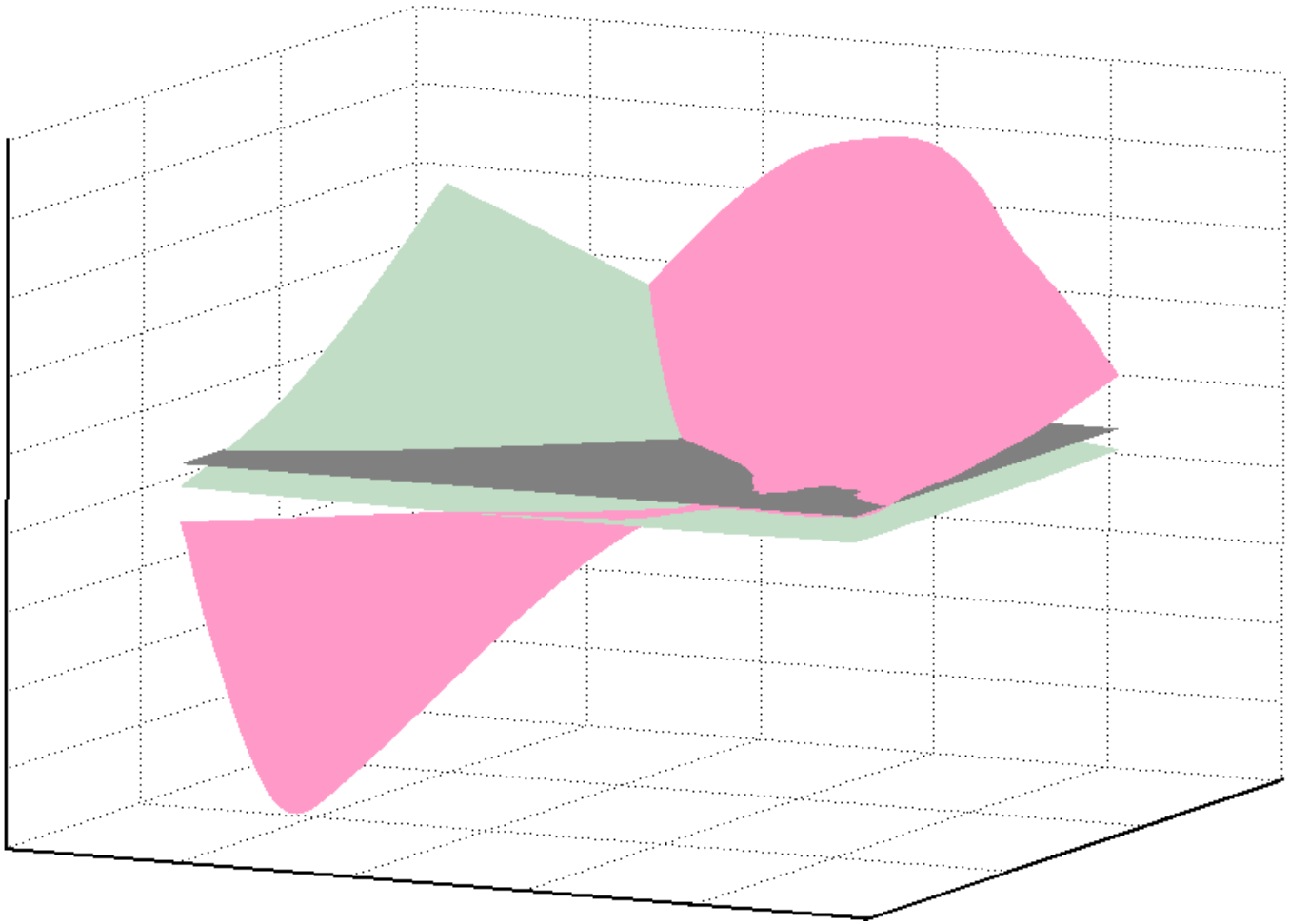
Optimální $H \rightarrow$ M2

Pak ze vztahu $h_2^4 \psi_{04} = h_1^4 \psi_{40}$ plyne

$$h_2^4 n^{-2} \sum_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 K_H}{\partial x_2^2} * \frac{\partial^2 K_H}{\partial x_2^2} \right)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) = h_1^4 n^{-2} \sum_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 K_H}{\partial x_1^2} * \frac{\partial^2 K_H}{\partial x_1^2} \right)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)$$

$$M2 \begin{cases} 2\hat{h}_1 \hat{h}_2 g(\hat{h}_1, \hat{h}_2) = nV(K) \\ \hat{h}_2^4 n^{-2} \sum_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 K_{\widehat{H}}}{\partial x_2^2} * \frac{\partial^2 K_{\widehat{H}}}{\partial x_2^2} \right)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) = \\ = \hat{h}_1^4 n^{-2} \sum_{i,j=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 K_{\widehat{H}}}{\partial x_1^2} * \frac{\partial^2 K_{\widehat{H}}}{\partial x_1^2} \right)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) \end{cases}$$

Řešení metody M2



BCV a Plug-in metoda

Cílem těchto metod je odhadnout funkci

$$\psi_{k,\ell} = \int \frac{\partial^{k+\ell} f(\mathbf{x})}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell} \cdot f(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x}, \quad k, \ell = 0, 2, 4, \quad k + \ell = 4.$$

- Vychýlená metoda křížového ověřování (BCV) – 2 typy,
- plug-in metoda.

BCV

1. $$\psi_{k,\ell} \approx \int \frac{\partial^{k+\ell} \hat{f}(\mathbf{x}, H)}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell} \cdot \hat{f}(\mathbf{x}, H)\, \mathrm{d}\mathbf{x} - \frac{1}{n} \int \frac{\partial^{k+\ell} K_H(\mathbf{x})}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell} \cdot K_H(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x}$$
$$\widehat{\psi}_{k,\ell} = n^{-2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \left(\frac{\partial^{k+\ell} K_H}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell} * K_H \right)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)$$

2. $$\psi_{k,\ell} = E\left(\frac{\partial^{k+\ell} f(\mathbf{x})}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell} \right) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^{k+\ell} \hat{f}_{-i}(\mathbf{X}_i, H)}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell}$$
$$\widetilde{\psi}_{k,\ell} = n^{-1}(n-1)^{-1} \sum_{i=1}^{n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{\partial^{k+\ell} K_H(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell}$$

kde $\hat{f}_{-i}(\mathbf{x}, H) = (n-1)^{-1} \sum_{j=1, j \neq i}^{n} K_H(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)$. [Duong & Hazelton, 2004]

Plug-in metoda

$$\psi_{k,\ell} = E\left(\frac{\partial^{k+\ell} f(\mathbf{x})}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell}\right) \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^{k+\ell} \hat{f}(\mathbf{X}_i, G)}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell}$$

$$\widehat{\psi}_{k,\ell}(G) = n^{-2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^{k+\ell} K_G(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell},$$

kde předpokládáme $G = g^2 I$

$$g_{AMSE} = \left[\frac{-2\frac{\partial^{k+\ell} K(0)}{\partial x_1^k \partial x_2^\ell}}{\beta_2(K)\{\psi_{k+2,\ell} + \psi_{k,\ell+2}\}n}\right]^{\frac{1}{4+k+\ell}}$$

[Wand & Jones, 1994]

Obsah

1 Úvod

2 Metody pro odhad H – Metody založené na MISE

3 Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE

4 Jiné metody pro odhad H

5 Simulovaná data

6 Reálná data

7 Reference

PLCV

Metoda křížového ověřování pomocí pseudověrohodnostní funkce [Cao, 1993]

$$L(H) = \prod_{i=1}^{n} \hat{f}_{-i}(\mathbf{X}_i, H) \quad \longrightarrow \quad \max$$

$$\begin{aligned} \ell(H) &= \ln L(H) \\ &= -n \ln(n-1) - \frac{n}{2} \ln \det(H) + \sum_{i=1}^{n} \ln \Big[\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} K\big(H^{-1/2}(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)\big) \Big] \end{aligned}$$

Metoda referenční hustoty

Za předpokladu, že f je d-rozměrná normální hustota, pak optimální hodnota matice vyhlazovacích parametrů je

$$H_{ref} = \left(\frac{4}{d+2}\right)^{2/(d+4)} \widehat{\Sigma} n^{-2/(d+4)},$$

$\widehat{\Sigma}$ je odhad kovarianční matice. [Wand & Jones, 1995]

Metoda maximálního vyhlazení

H_{MS} je řešením rovnice

$$H \cdot H^T = \left(\frac{(d+8)^{\frac{d+6}{2}} \pi^{d/2} V(K)}{16n\Gamma(\frac{d+8}{2})(d+2)} \right)^{\frac{2}{d+4}} \cdot \widehat{\Sigma},$$

pro $d = 2$

$$H \cdot H^T = \left(\frac{625\pi V(K)}{96n} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \widehat{\Sigma},$$

přičemž $\widehat{\Sigma}$ značí odhad kovarianční matice.
Pro $H = \text{diag}\{h_1, h_2\}$

$$h_i = \left(\frac{625\pi V(K)}{96n} \right)^{\frac{1}{6}} \cdot \hat{\sigma}_i, \qquad i = 1, 2$$

[Sain et al, 1994]

Obsah

1 Úvod

2 Metody pro odhad H – Metody založené na MISE

3 Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE

4 Jiné metody pro odhad H

5 Simulovaná data

6 Reálná data

7 Reference

Simulace

Aplikace na simulovaných datech – porovnání metod M1 a M2 s metodou LSCV.

- Epanečnikovo součinové jádro

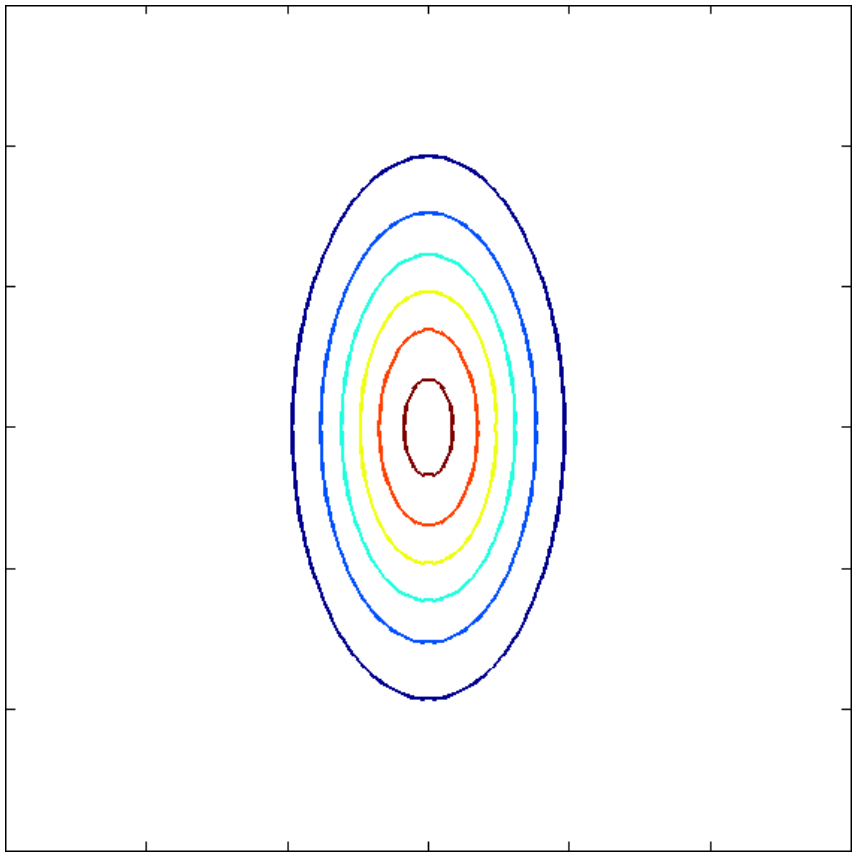
$$K(x_1, x_2) = \frac{9}{16}(1 - x_1^2)(1 - x_2^2), \quad x_1, x_2 \in [-1, 1],$$

- n – počet pozorování v náhodném výběru,
- R – počet opakování.

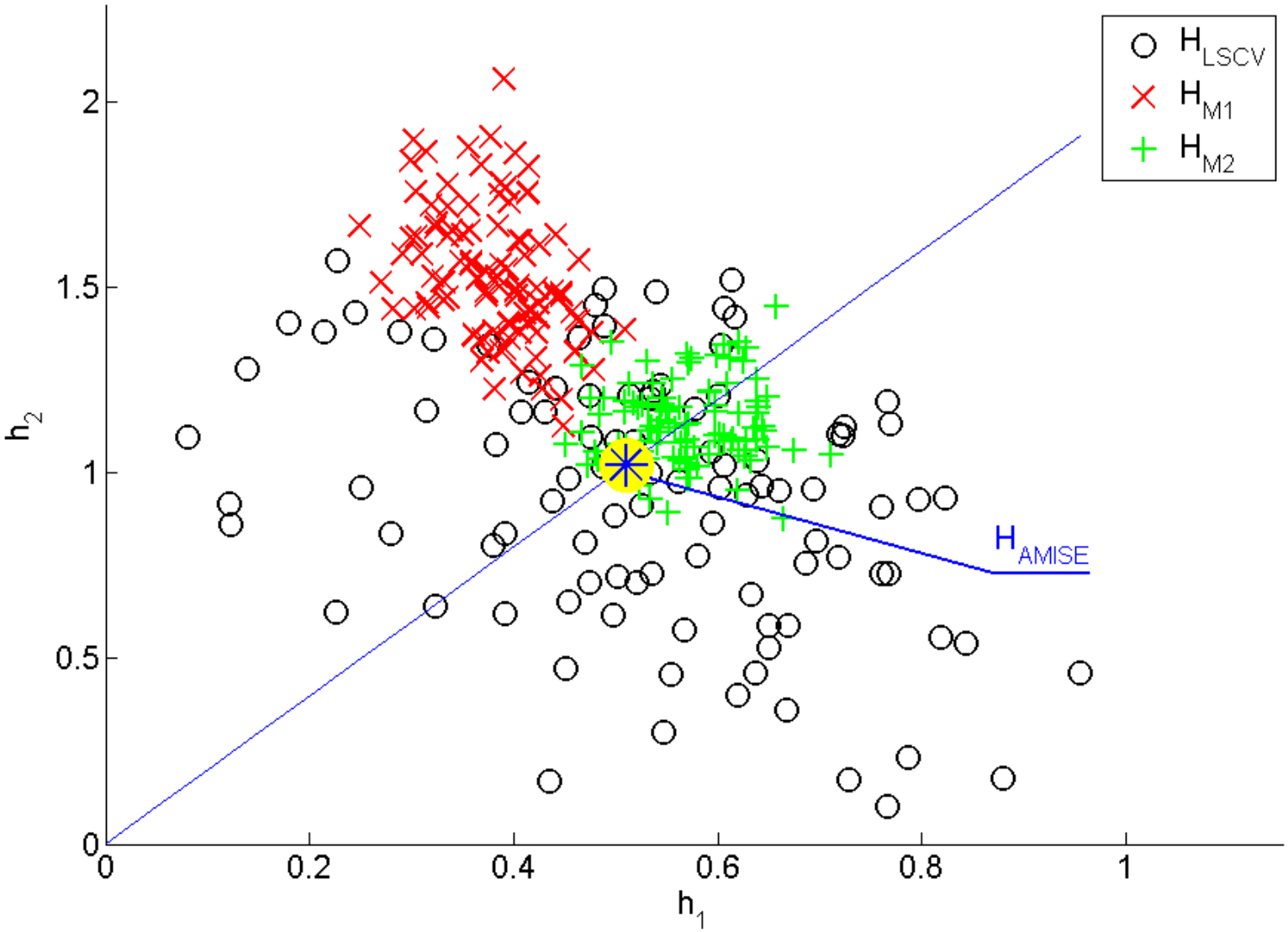
Normální hustota I

$n = 100$, $R = 100$

$$\mathbf{X} \sim N_2(0, 0; \frac{1}{4}, 1, 0)$$

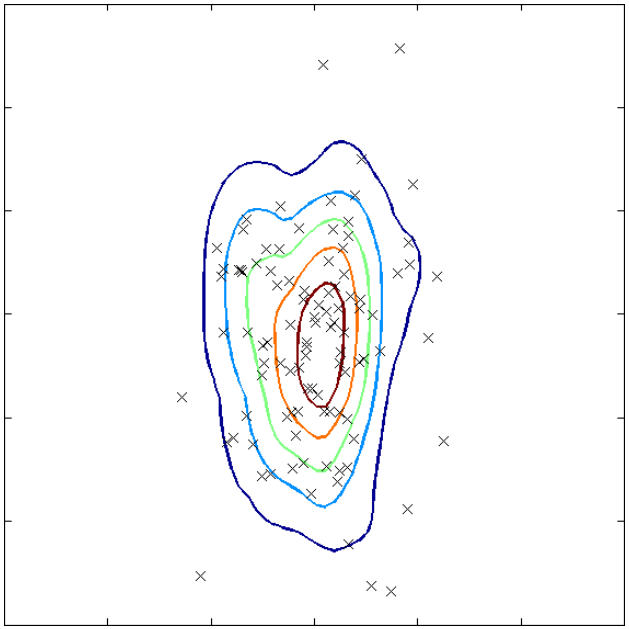


Normální hustota I – *H*

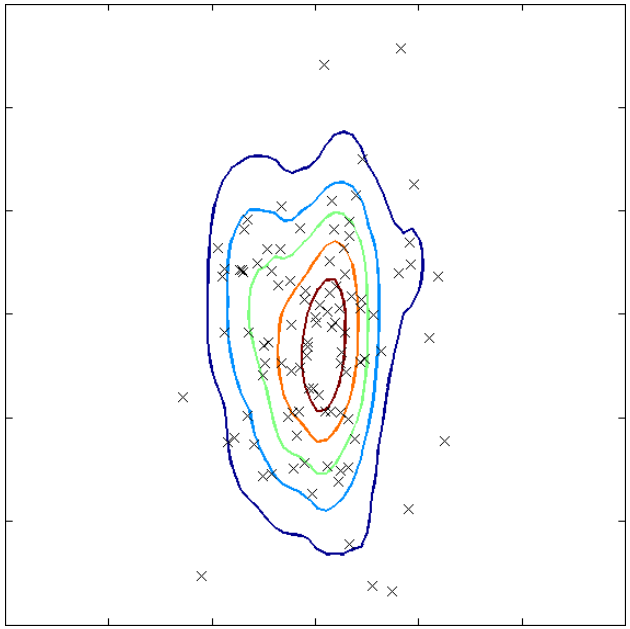


Normální hustota I – rekonstrukce

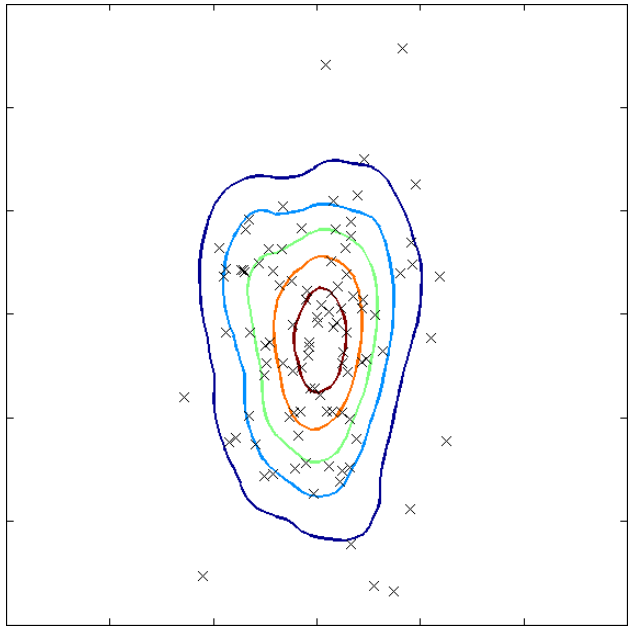
LSCV (○)



M1 (×)



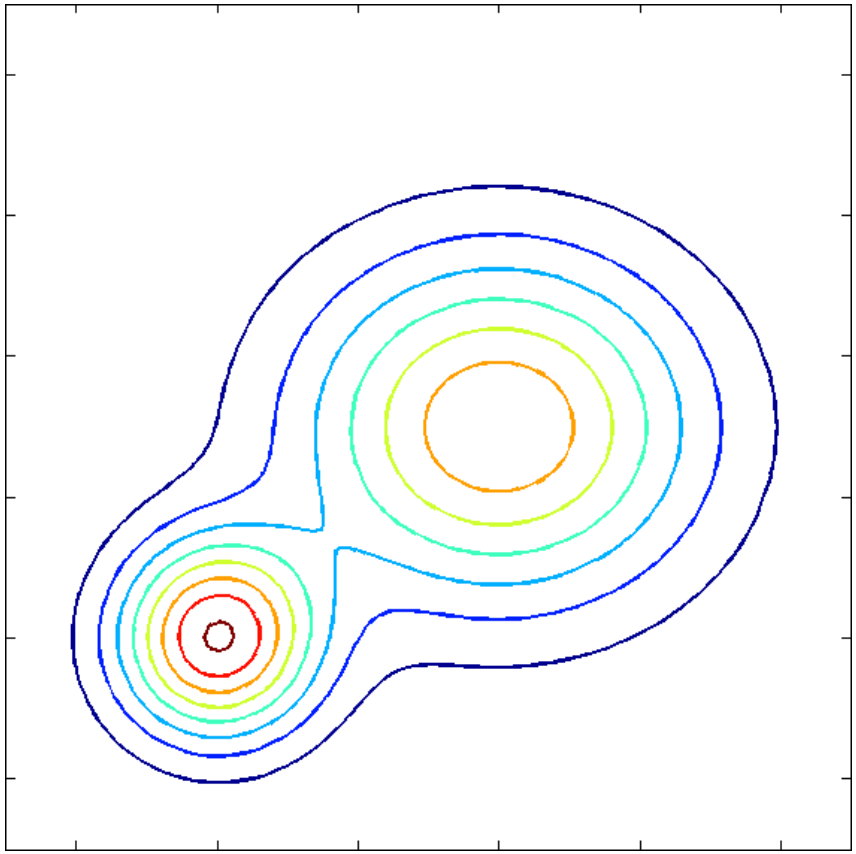
M2 (+)



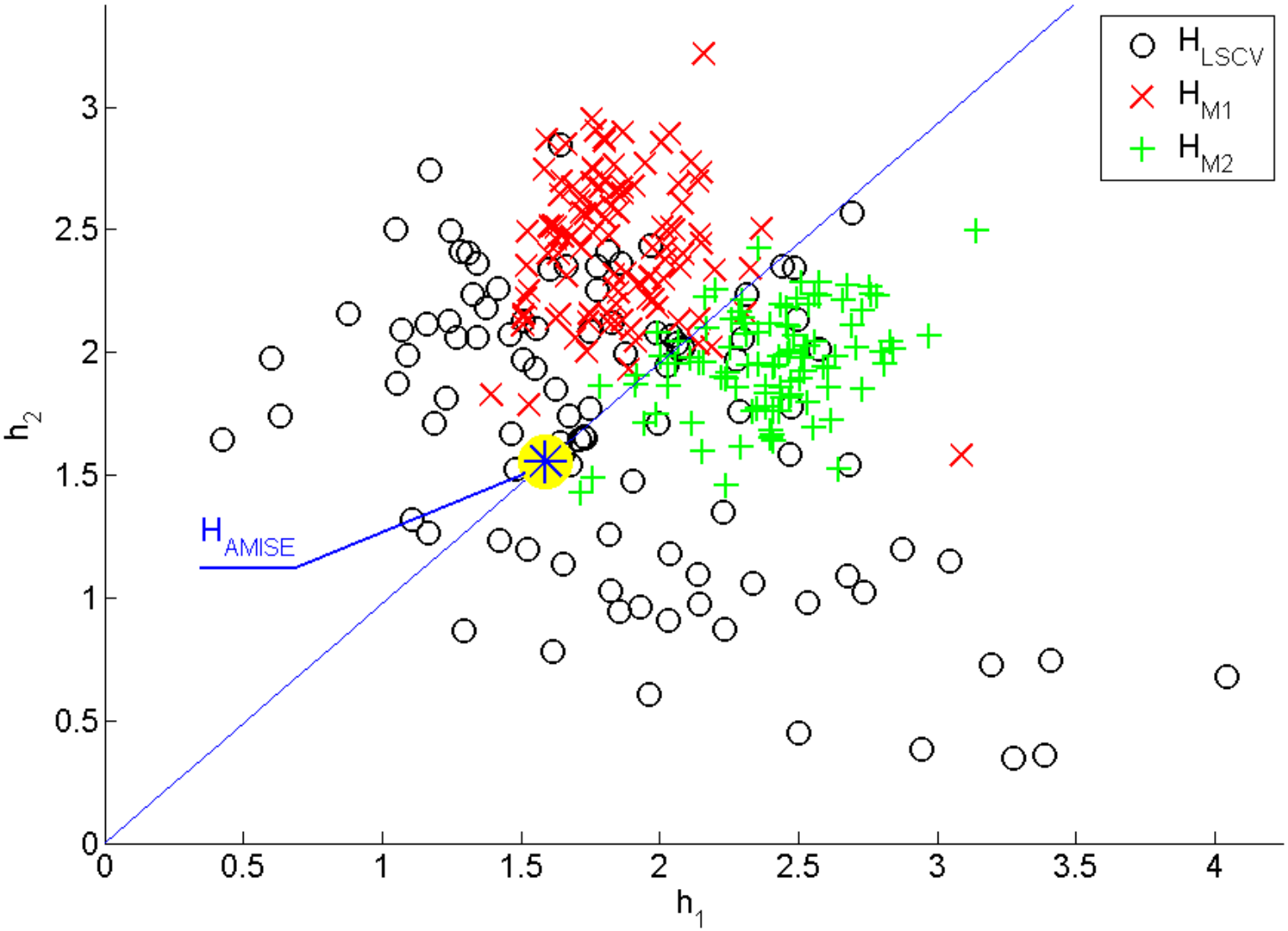
Normální hustota II

$n = 100$, $R = 100$

$$\begin{aligned}\mathbf{X} \sim & 0.25 N_2(0, 0; 1, 1, 0) \\ & + 0.75 N_2(4, 3; 4, 3, 0)\end{aligned}$$

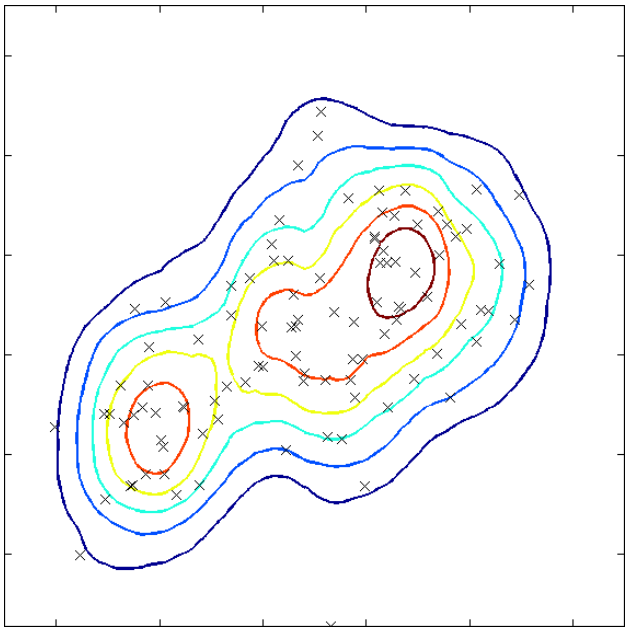


Normální hustota II – *H*

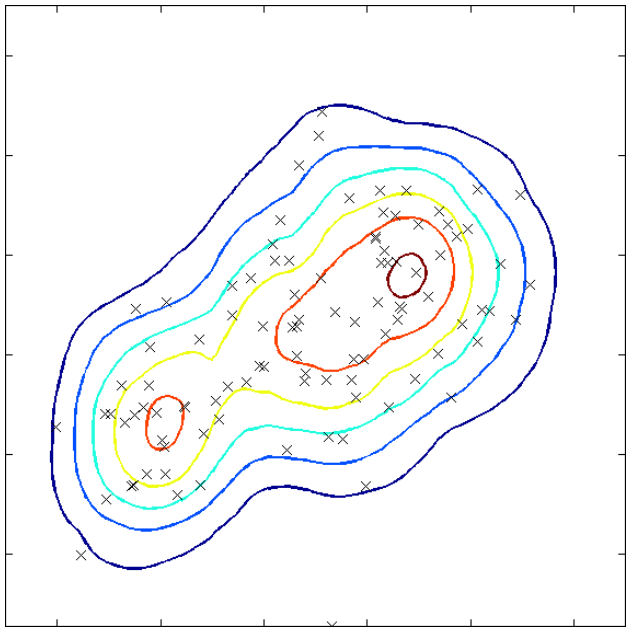


Normální hustota II – rekonstrukce

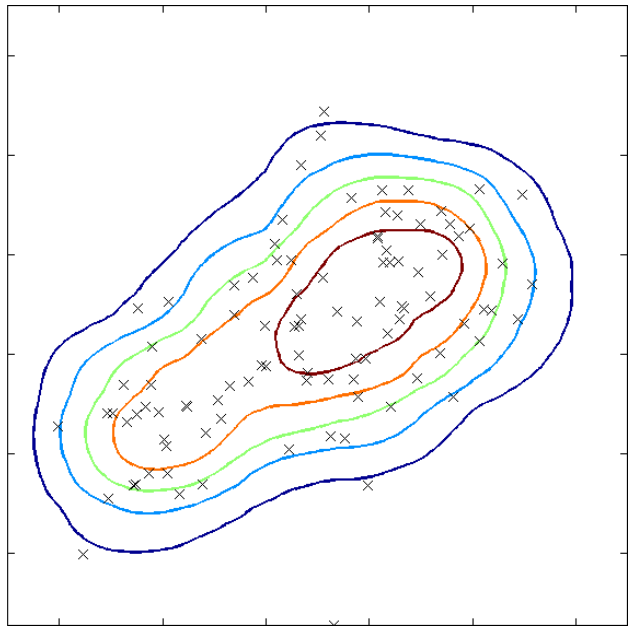
LSCV (○)



M1 (×)



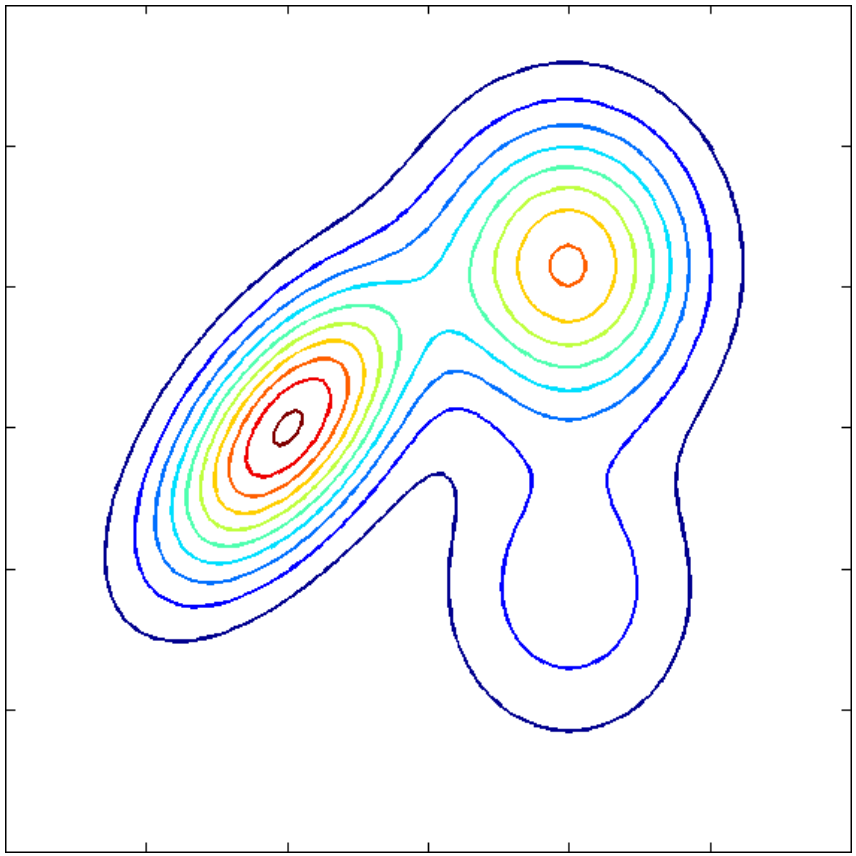
M2 (+)



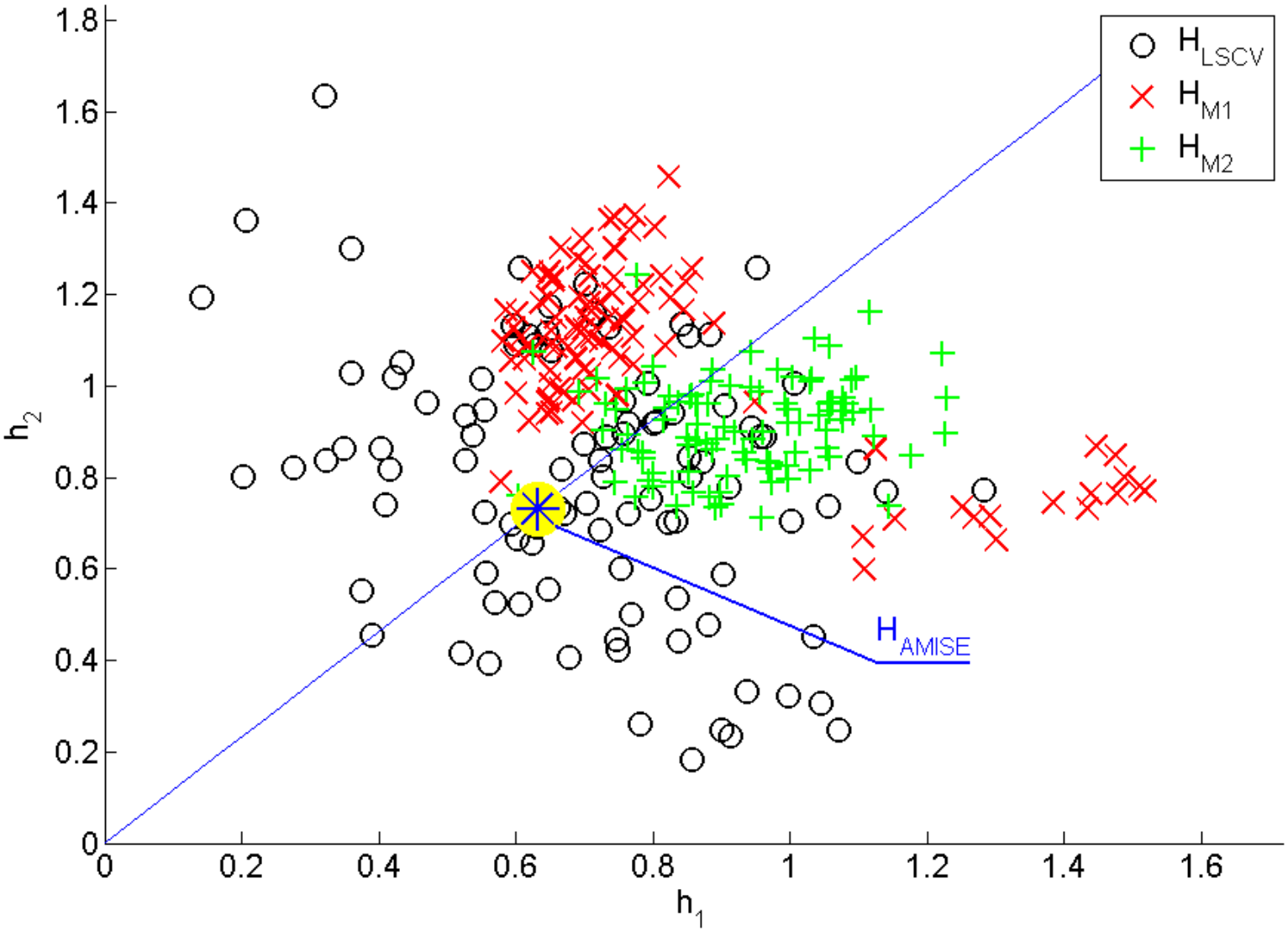
Normální hustota III

$n = 100$, $R = 100$

$$\mathbf{X} \sim \frac{3}{7} N_2(-1, 0; \frac{9}{25}, \frac{49}{100}, \frac{63}{250}) + \frac{3}{7} N_2(1, \frac{2}{\sqrt{3}}; \frac{9}{25}, \frac{49}{100}, 0) + \frac{1}{7} N_2(1, -\frac{2}{\sqrt{3}}; \frac{9}{25}, \frac{49}{100}, 0)$$

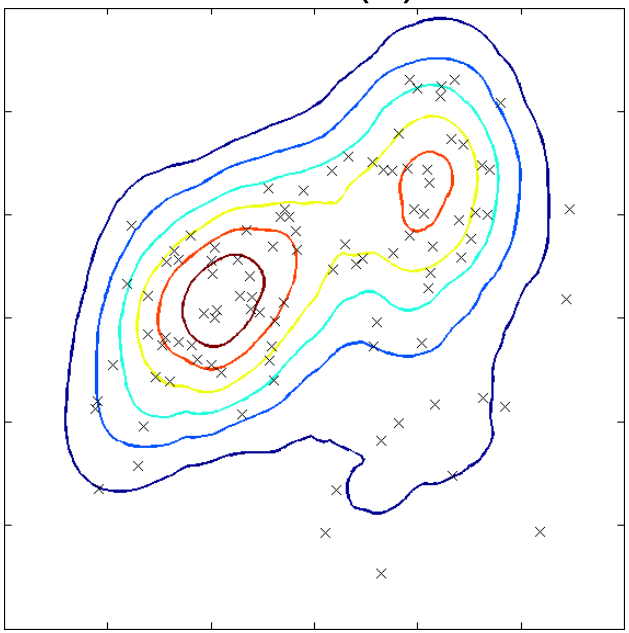


Normální hustota III – *H*

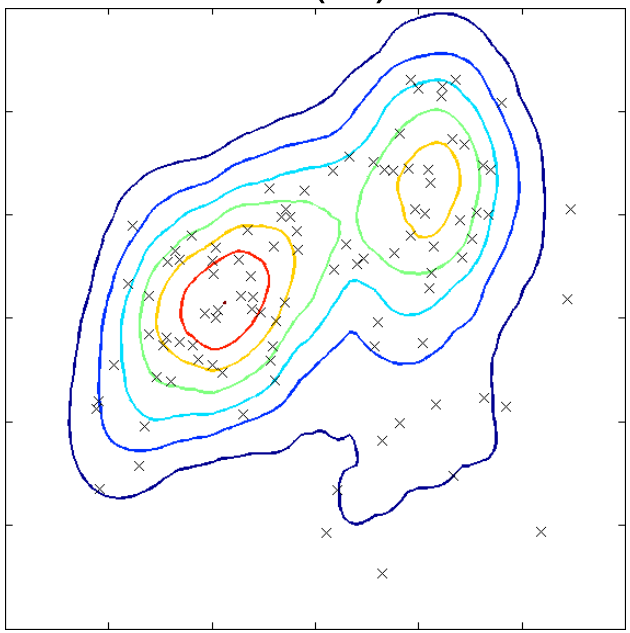


Normální hustota III – rekonstrukce

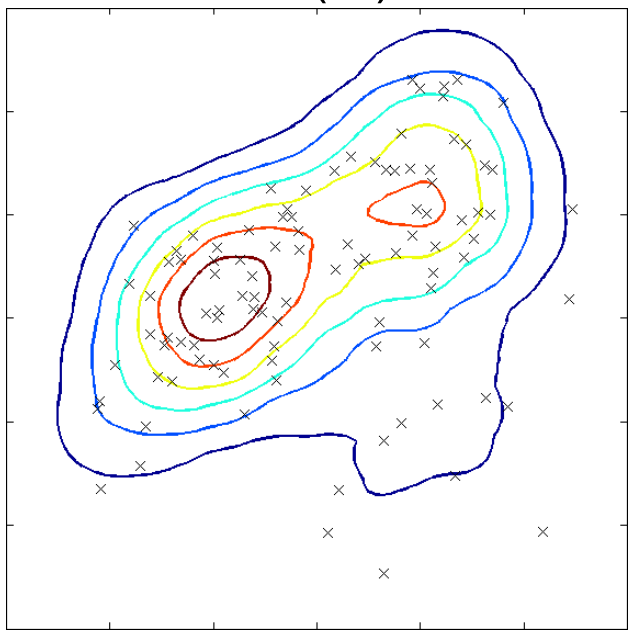
LSCV (○)



M1 (×)



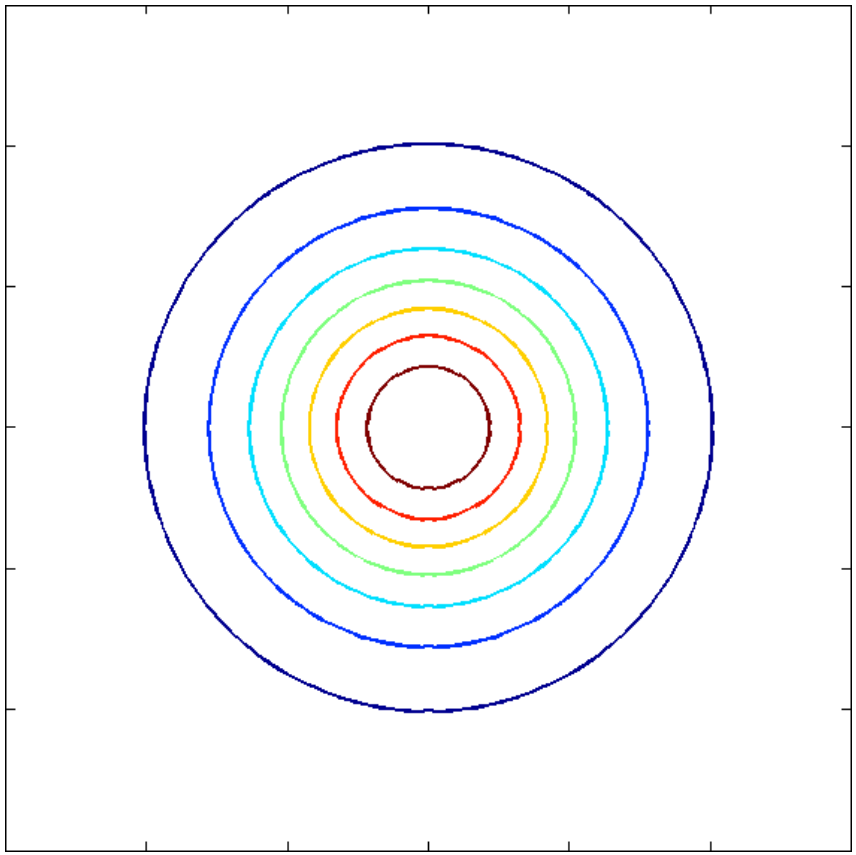
M2 (+)



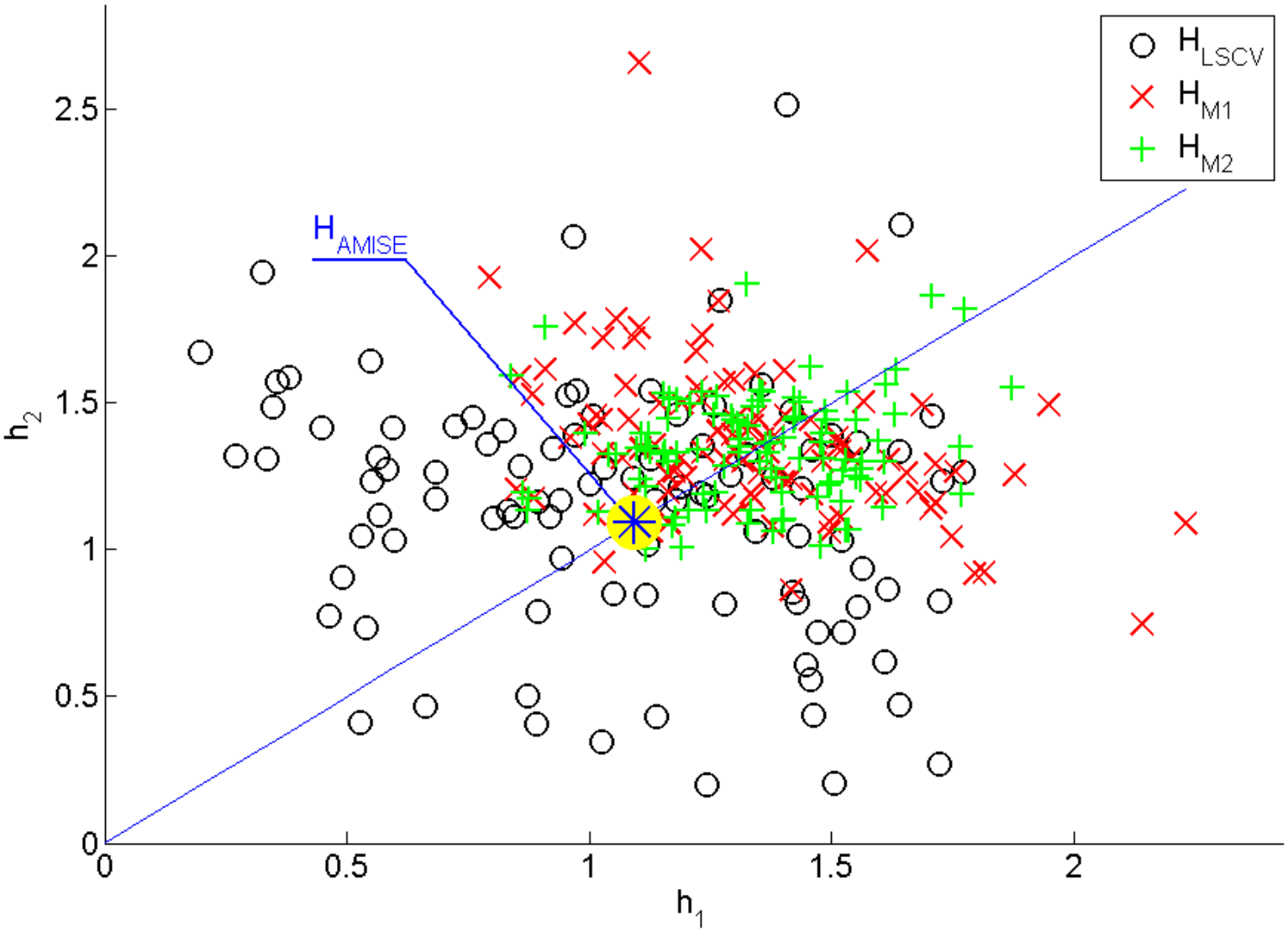
Studentovo rozdělení

$n = 60$, $R = 100$

$$\mathbf{X} \sim t(5) \cdot t(5)$$

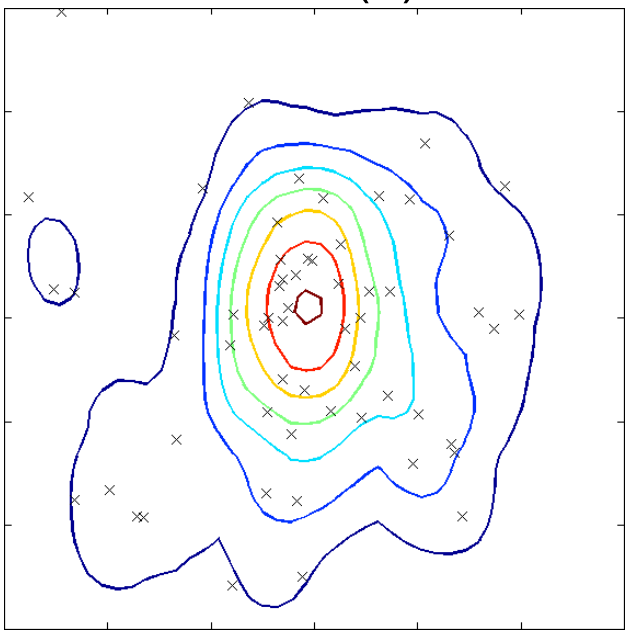


Studentovo rozdělení – *H*

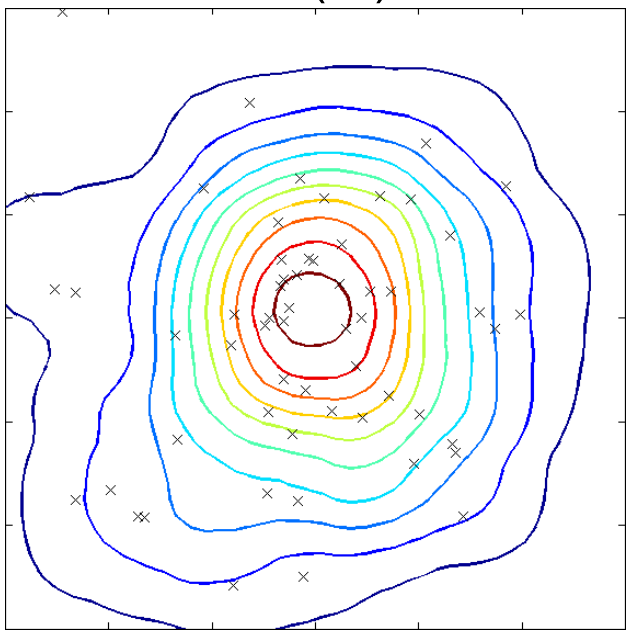


Studentovo rozdělení – rekonstrukce

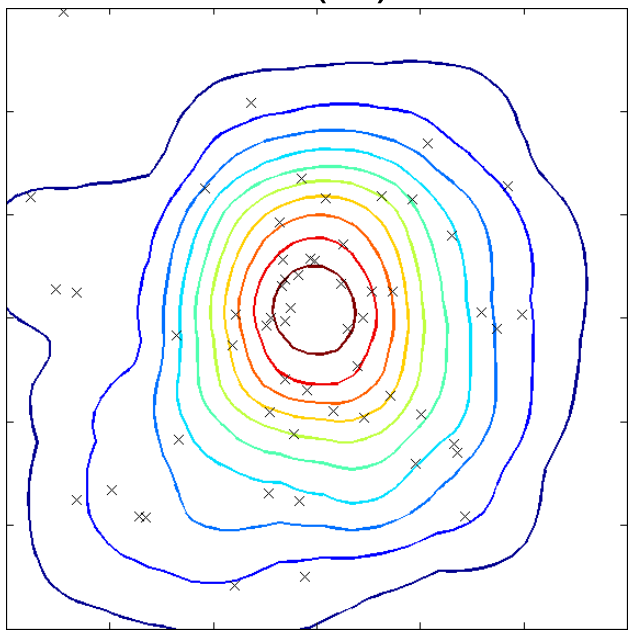
LSCV (○)



M1 (×)



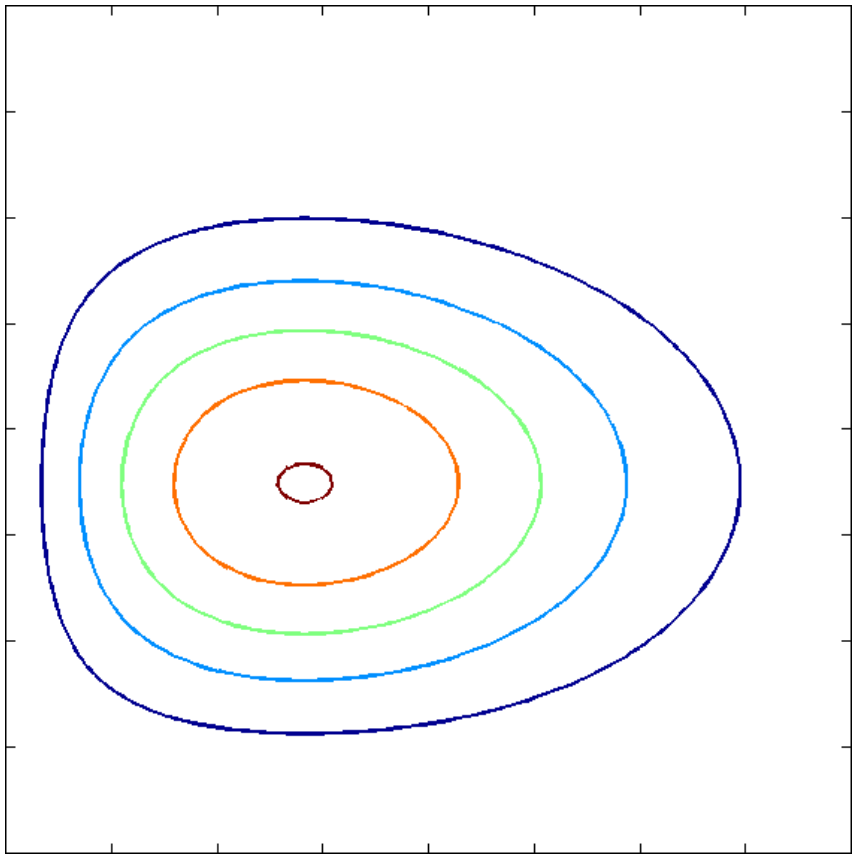
M2 (+)



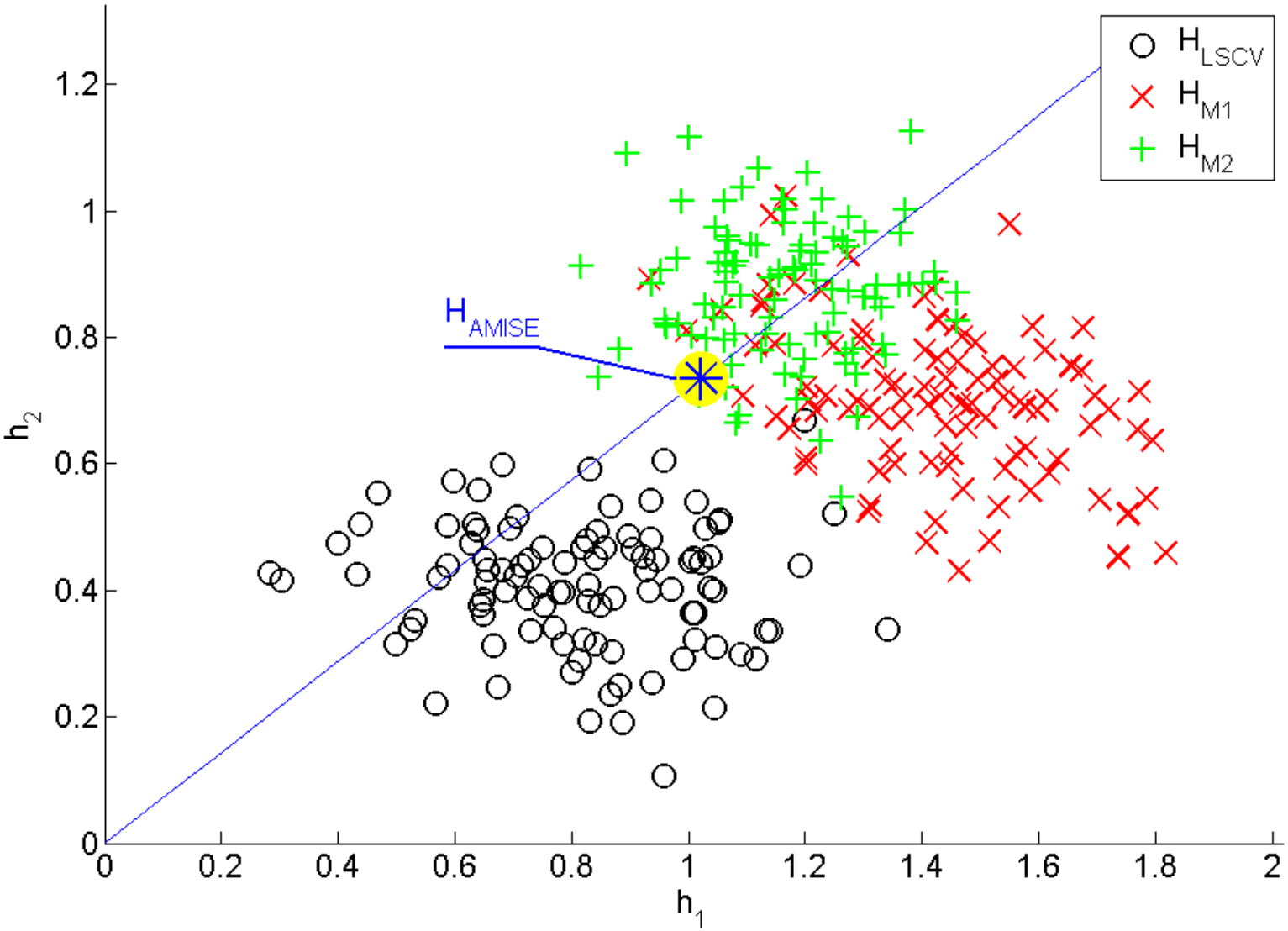
Weibullovo rozdělení

$n = 60$, $R = 100$

$$\mathbf{X} \sim Wb(2,2) \cdot Wb(2,3)$$

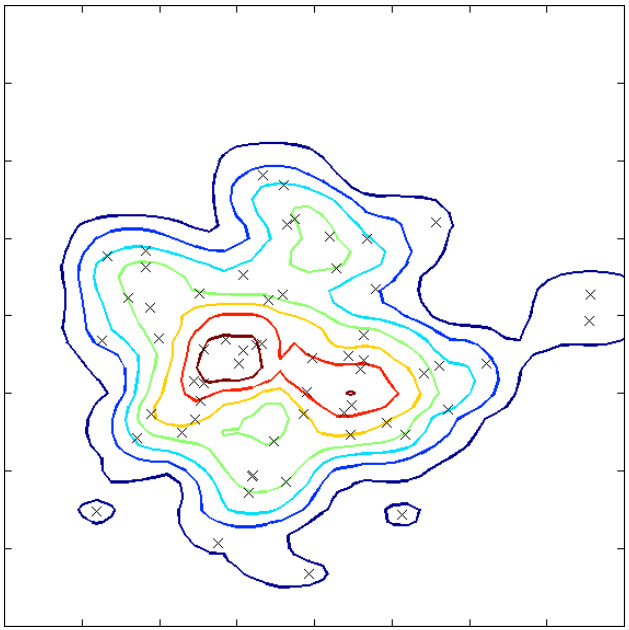


Weibullovo rozdělení – *H*

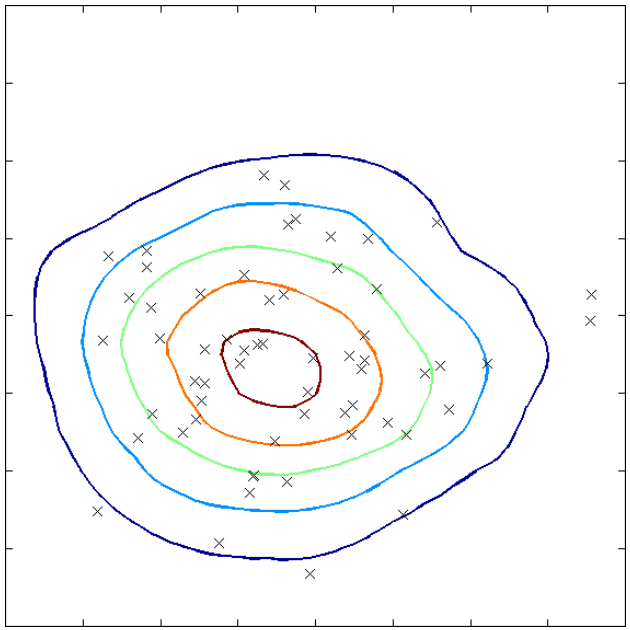


Weibullovo rozdělení – rekonstrukce

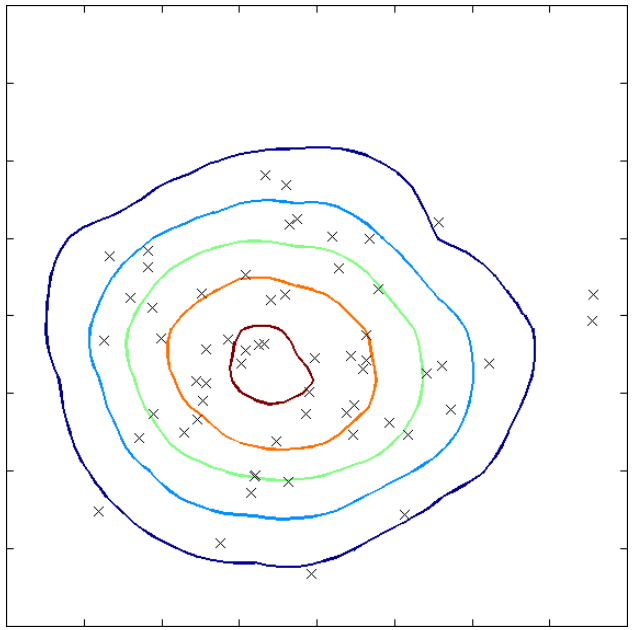
LSCV (○)



M1 (×)



M2 (+)



Průměr relativních chyb AMISE

Relativní chyba AMISE

$$\frac{|AMISE(H_{metoda}) - AMISE(H_{AMISE})|}{AMISE(H_{AMISE})}.$$

data	LSCV	M1	M2
Norm I	0.5046	0.4486	0.0841
Norm II	0.5392	0.7227	0.7200
Norm III	0.4548	0.9232	0.6392
Student	0.5407	0.4052	0.3063
Weibull	0.8424	0.2987	0.1619

Průměry IAE

Integrální absolutní chyba (IAE)

$$IAE(H) = \int \left| \hat{f}(\mathbf{x}, H) - f(\mathbf{x}) \right| \mathrm{d}\mathbf{x}$$

data	LSCV	M1	M2
Norm I	0.3213	0.3016	0.2687
Norm II	0.3619	0.3468	0.3313
Norm III	0.4041	0.3828	0.3700
Student	0.4098	0.3378	0.3313
Weibull	0.3895	0.2942	0.2920

Obsah

1 Úvod

2 Metody pro odhad H – Metody založené na MISE

3 Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE

4 Jiné metody pro odhad H

5 Simulovaná data

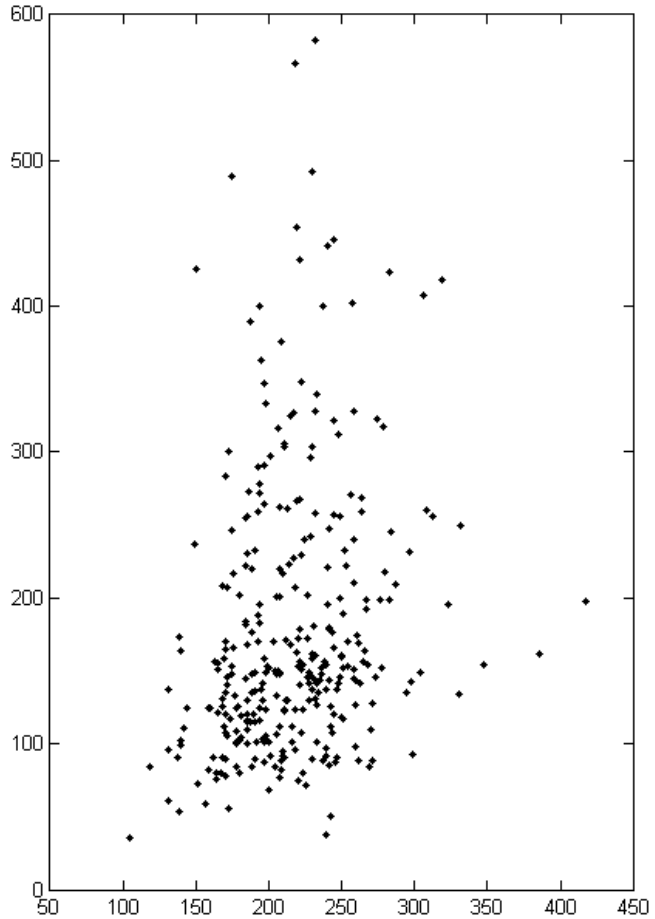
6 Reálná data

7 Reference

Lipidy v krvi

Koncentrace lipidů v krevní plazmě pacientů.

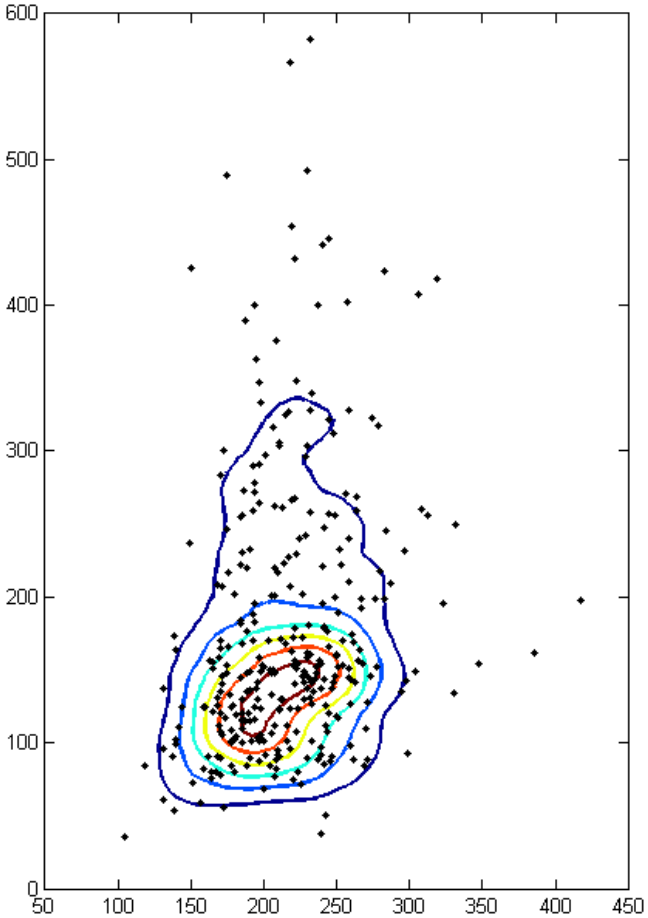
- 320 pacientů, u kterých bylo zjištěno zúžení cév,
- X_1 – cholesterol [mg/100 ml],
- X_2 – triglycerid [mg/100 ml].



Lipidy v krvi – rekonstrukce

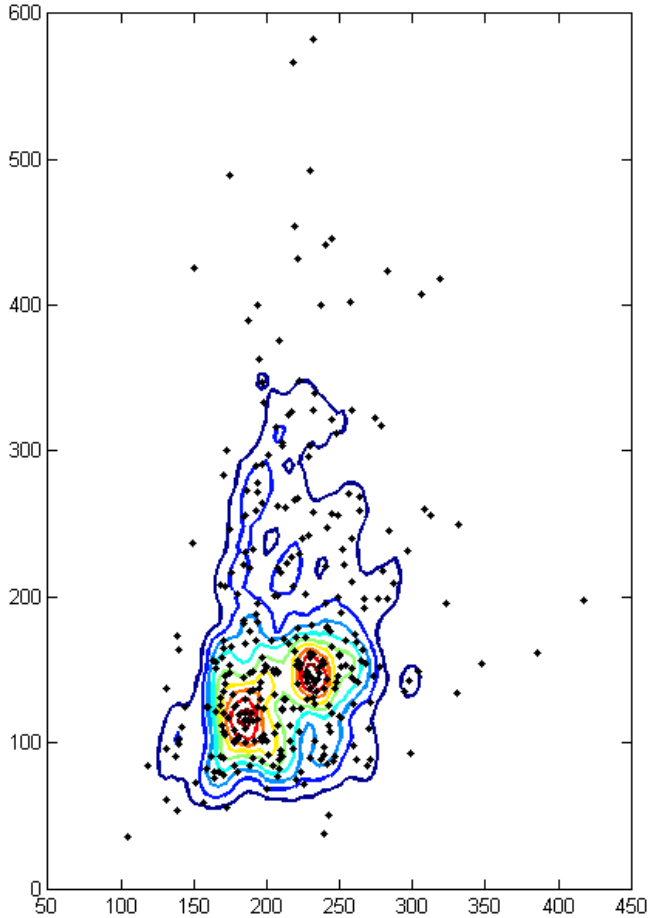
LSCV (○)

$h_1 = 42.31$, $h_2 = 31.86$



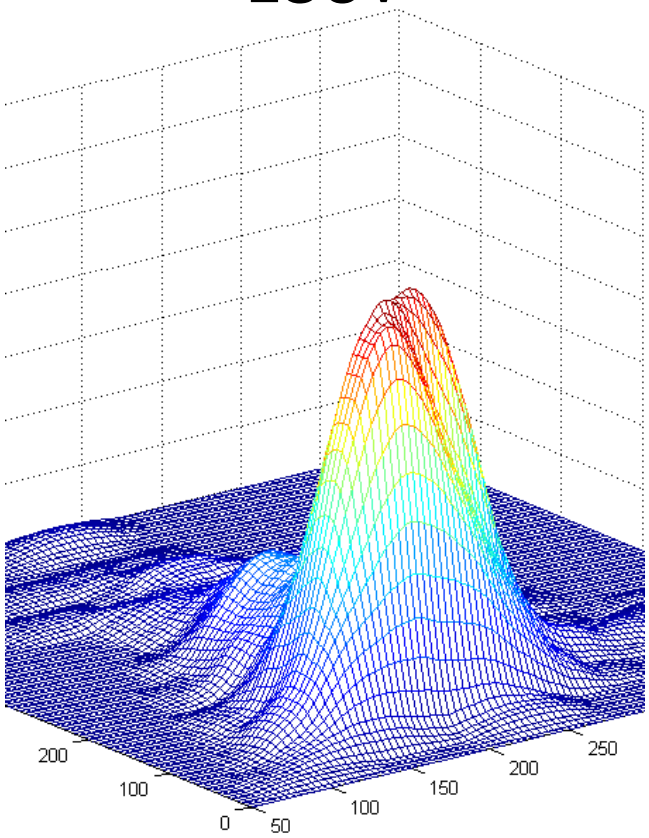
M2 (+)

$h_1 = 14.99$, $h_2 = 25.58$

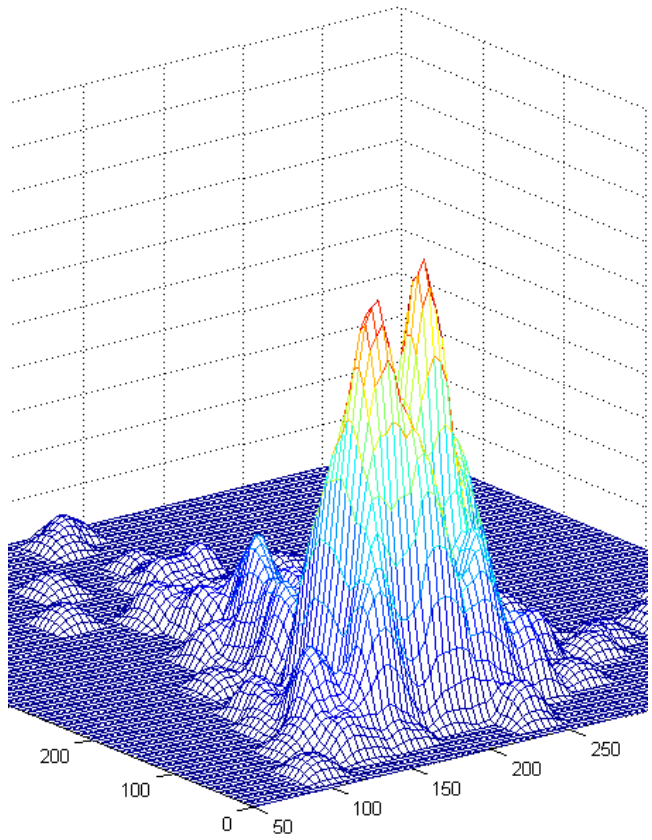


Lipidy v krvi – rekonstrukce

LSCV



M2



Obsah

1 Úvod

2 Metody pro odhad H – Metody založené na MISE

3 Metody pro odhad H – Metody založené na AMISE

4 Jiné metody pro odhad H

5 Simulovaná data

6 Reálná data

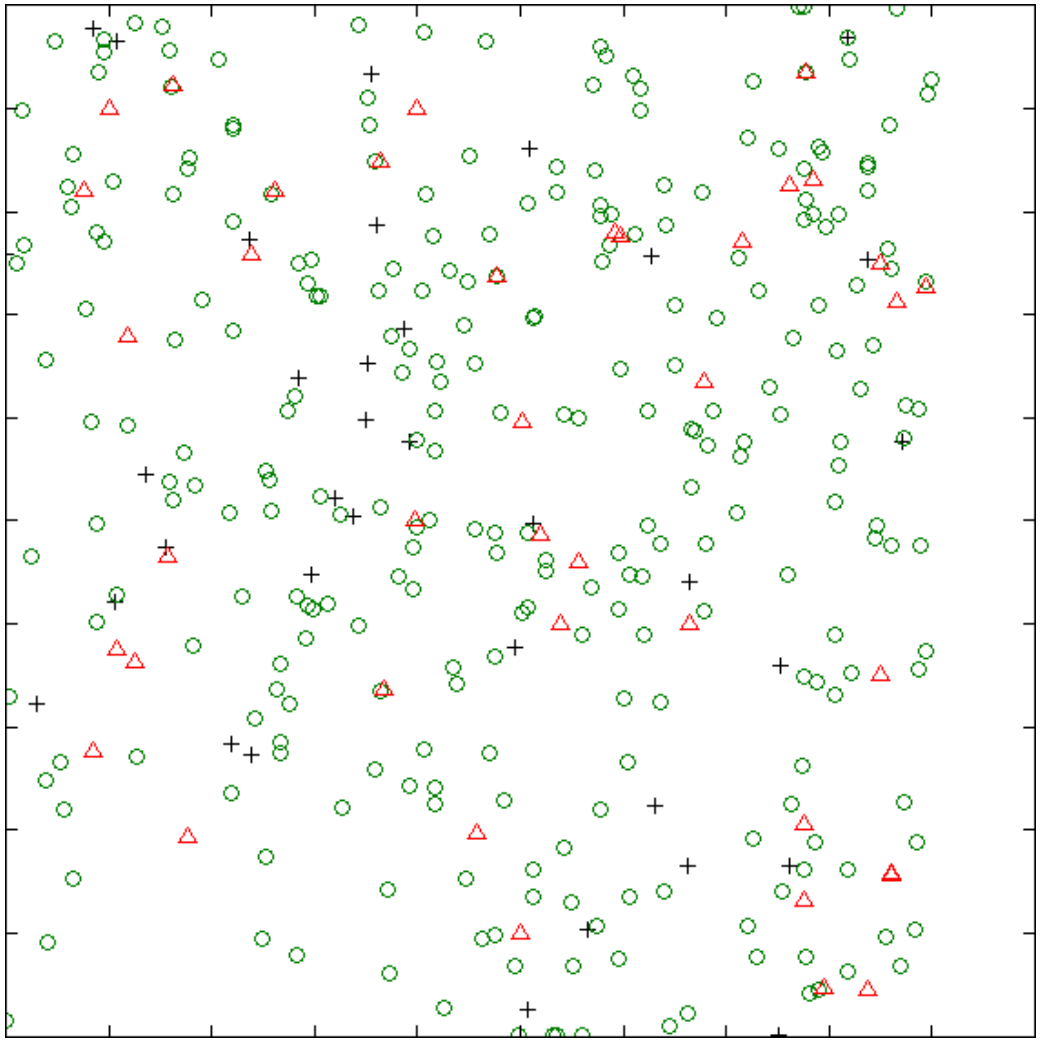
7 Reference

Reference

- Cao R., Cuevas A., González Manteiga W. A comparative study of several smoothing methods on density estimation *Comput. Statist. Data Anal.* 17, 1994.
- Duong T., Hazelton M.L. Convergence rates for unconstrained bandwidth matrix selectors in multivariate kernel density estimation. *J. Multivariate Anal.* 93, 2005.
- Duong T., Hazelton M.L. Cross-validation Bandwidth matrices for Multivariate Kernel Density Estimation. *Scand. J. Statist.* 31, 2004.
- Horová I. *et al*. Bandwidth choice for kernel density estimates. *Proceedings IASC*. Yokohama: IASC, 2008.
- Sain S.R., Baggerly K.A. and Scott D.W. Cross-Validation of Multivariate Densities. *J. Amer. Statist. Assoc. 89*, 807–817, 1994.
- Scott D.W. Multivariate Density Estimation: Theory, Practice, and Visualization New York: John Wiley & Sons, 1992.
- Wand M.P., Jones M.C. Multivariate Plug-in Bandwidth Selection. *Comput. Statist.* 9, 1994.
- Wand, M.P. and Jones, M.C. *Kernel Smoothing.* London: Chapman and Hall, 1995.

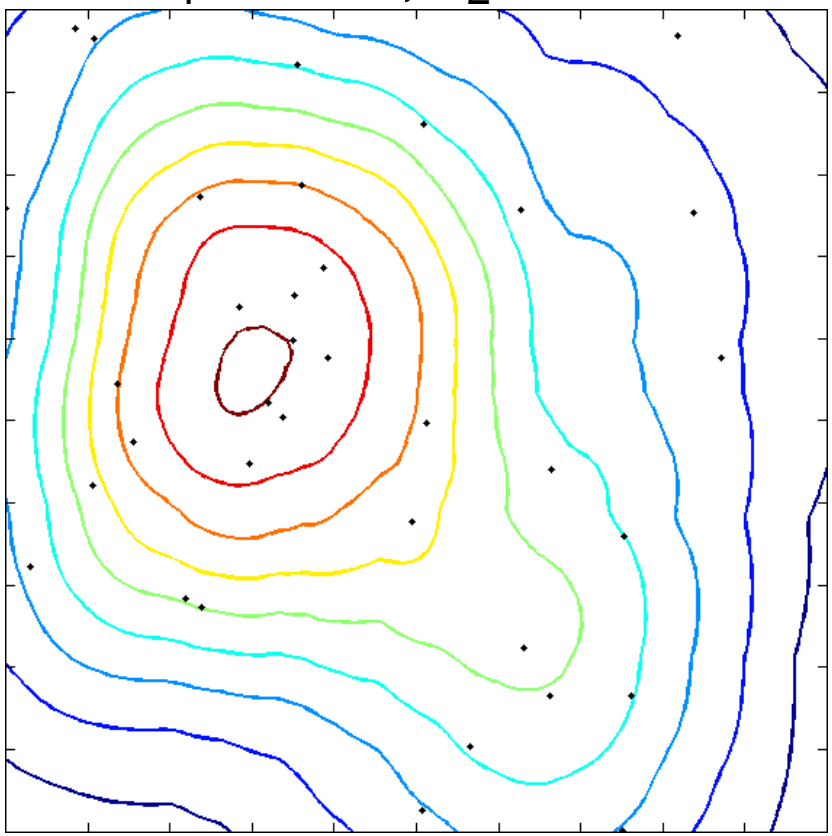
Pouštní rostliny

Měření dlouhověkosti u rostlin vybrané lokality Mohavské pouště.



Pouštní rostliny – dead

LSCV (○)
$h_1 = 6.01$, $h_2 = 7.38$



M2 (+)
$h_1 = 7.36$, $h_2 = 7.96$