Transformace dat a počítačově intenzivní metody

Jiří Militký Katedra textilních materiálů, Textilní fakulta, Technická universita v Liberci, Liberec, e- mail jiri.militky@vslib.cz
Milan Meloun, Katedra analytické chemie, Universita Pardubice, Pardubice

Abstrakt: *Cílem příspěvku je ukázat možnosti aplikace transformace dat pro zlepšení jejich rozdělení s ohledem na následnou statistickou analýzu. Je podrobněji pojednáno o mocninné transformaci dat a Box Coxově transformaci. Tyto transformace jsou použity pro konstrukci adaptivního postupu výběru odhadu střední hodnoty a tvorbu intervalu spolehlivosti střední hodnoty. Je ukázáno jak využít pro hlubší analýzu vlivu nedokonalosti výběru na výsledky transformace dat základní neparametrické varianty metody Bootstrap.*

1 Úvod

Důležitou součástí analýzy dat jsou metody k získávání relevantních informací z experimentů a pozorování. S nárůstem dostupnosti výkonných osobních počítačů dochází k decentralizaci a interaktivnosti při zpracování experimentálních dat a interpretaci výsledků. To klade větší nároky na pracovníky praxe, kteří již těžko obhájí jednoduché postupy vyhodnocování dat, založené mnohdy na zjednodušených nebo i nesprávných předpokladech. Nabídka a možnosti počítačově orientovaného statistického zpracování dat nutí experimentátora k hlubší analýze, což vede většinou k radikální změně pohledu na rutinně prováděnou výzkumnou práci. Úlohy vyhodnocení experimentálních dat v analytické praxi mají některé společné rysy:

(a) rozsahy zpracovávaných dat jsou buď malé nebo extrémně veliké,
(b) rozdělení dat jen zřídka odpovídá normálnímu běžně předpokládanému ve standardní statistické analýze,
(c) v datech se vyskytují vybočující měření a různé heterogenity,
(d) statistické modely se často tvoří na základě předběžných informací z dat (datově orientované přístupy),
(e) existuje jistá neurčitost při výběru modelu, popisujícího chování dat.

Pokud nemá být statistická analýza v analytické praxi pouhým numerickým počítáním bez hlubšího smyslu, je pochopitelně třeba, aby byly ověřeny všechny předpoklady, které vedly k návrhu daného postupu analýzy.
Při zpracování výsledků rutinních měření se běžně předpokládá aditivní model měření. O datech (x_i), i = 1, ...N se apriorně soudí, že jde o nezávislé stejně rozdělené veličiny, pocházející z normálního rozdělení. Tyto předpoklady jsou základem prakticky všech klasických metod analýzy experimentálních dat. V řadě případů, kde se opakovaně měří za stejných podmínek konstantní parametr se s tímto přístupem vystačí, pokud se zajistí dostatečný počet opakování. Pro menší výběry a nepřesná měření lze použít jednoduché robustní techniky, které fungují dobře , pokud je rozdělení dat symetrické.
Je třeba mít na paměti, že malé porušení předpokladu normality nemusí být katastrofické s ohledem na výsledek statistické analýzy. Na druhé straně je však špatné, když odhady i testy závisejí na spíše jiných faktorech než je chování většiny dat (na velikosti výběru, uspořádání výsledků nesledovaných proměnných atd.).
Při analýze speciálních typů dat, kde chyby měření jsou zanedbatelné ve srovnání s variabilitou měřeného materiálu resp. jednotlivé analyzované vzorky jsou silně odlišné co do koncentrace analyzované látky je rozdělení výsledků výrazně asymetrické (**zešikmené** obyčejně k vyšším hodnotám). Pak vede jak standardní tak i robustní analýza často k nesprávným závěrům resp. vylučování dat, která sice neodpovídají předpokladu symetrie, ale

jsou "přijatelná". V takových případech pak bez ohledu na kvalitu analytické metody rozhoduje o výsledku ***kvalita zpracování dat***.
Pokud data nesplňují předpoklad normality, je v řadě případů možné zlepšit jejich rozdělení vhodnou transformací.
V řadě případů se rozmezí analyzovaných látek pohybuje v několika řádech, což omezuje použití standardních statistických metod založených na předpokladu konstantního rozptylu resp. **aditivního modelu měření.** [1]. V práci [2] bylo diskutováno o možnostech použití transformace stabilizující rozptyl nebo **multiplikativního modelu měření**. To vede k logaritmické transformaci dat [1]. Nevýhodou této transformace je fakt, že při nízkých koncentracích je absolutní chyba měření velmi malá (blízká 0), což odporuje realitě. Byl navržen postup kombinující oba modely měření a odstraňující jejich nevýhody [2].
Multiplikativní model měření sice vede k použití asymetrického logaritmicko normálního rozdělení ale není zdaleka universální. Jedním z obecnějších postupů eliminace asymetrie je vhodná, obyčejně mocninná, transformace dat [1]. I zde však vznikají problémy zejména se zpětnou transformací a použitelností jen pro některé úlohy. Lze odvodit , že pro malé rozptyly σ^2 je odhad parametru mocninné transformace špatně identifikovatelný (viz [3]).
V tomto příspěvku je pozornost zaměřena transformace vedoucí ke zlepšení tvaru rozdělení výběru a jejich využití pro základní úlohy statistického zpracování dat
Jedním z problémů analýzy dat obecně je to, že se pracuje s jedním výběrem konečného rozsahu. To má za důsledek, že výsledky analýz jsou neurčité (s ohledem na opakování výběru) a výběry jsou omezeně informativní (s ohledem na velikost výběru). Podle přístupu k řešení tohoto problému existují dva základní přístupy:

- **Datově orientovaný přístup** (víra v data)
- **Modelově orientovaný přístup** (víra v model)

S výhodou lze pro analýzu vlivu nedokonalosti výběru na výsledky zpracování dat využít principů metod Bootstrap. **Datově orientovaný přístup** vyúsťuje ke generaci simulovaných výběrů na základě klasického neparametrického Bootstrapu. **Modelově orientovaný přístup** využívá parametrický Bootstrap. Zde je ukázáno použití neparametrického Bootstrapu pro zlepšení informativnosti klasické Box Coxovy transformace.

2. Standardní zpracování dat

Omezme se na nejfrekventovanější a *zdánlivě nejjednodušší* úlohu stanovení koncentrace analytu z výběru ($x_1, x_2,..x_N$) velikosti N. Jednotlivé prvky výběru přitom nejsou opakování měření ale měření na různých vzorcích. Účelem je odhad parametru polohy a stanovení jeho neurčitosti (intervalu spolehlivosti střední hodnoty).
Standardní model měření je **aditivní**, t.j.

$$x = \mu + \varepsilon \qquad (1)$$

kde μ je skutečná hodnota měřené veličiny (koncentrace analytu) a ε je náhodná chyba měření. Tento model celkem dobře vyhovuje pro případ opakování měření, ale pokud jde o různé vzorky často selhává. Standardní statistická analýza vychází z těchto předpokladů:

- střední hodnota chyb měření je nulová, t.j. $E(\varepsilon) = 0$,
- rozptyl chyb měření je konstantní, t.j. $D(\varepsilon) = \sigma^2$
- chyby jsou vzájemně nezávislé .t.j. $E(\varepsilon_i\ \varepsilon_j) = 0$

- chyby mají normální rozdělení t.j. $\varepsilon \approx N(0,\sigma^2)$

Diskuse o identifikaci a postupu při porušení prvních tří předpokladů je uvedena v práci [2]. Nejvíce omezující, je předpoklad, že chyby mají normální rozdělení. Tento předpoklad je potřebný pro konstrukci intervalů spolehlivosti (neurčitosti výsledků) resp. testování hypotéz. Pokud je k dispozici dostatek dat, lze odhadnout rozdělení chyb ε z rozdělení měření x, protože pro model (1) je tvar hustoty pravděpodobnosti totožný.
Normální rozdělení lze chápat jako jednoho z členů třídy eliptických symetrických rozdělení, pro které platí že se liší pouze délkou konců. V analytické praxi, kde jde běžně o měření na různých vzorcích, je častým jevem **asymetrické rozdělení dat zešikmené k vyšším hodnotám**. Toto rozdělení je běžné u dat, kde se ve vzorcích vyskytují řádové rozdíly koncentrací (např. u dat z oblasti životního prostředí). Pro odstranění asymetrie rozdělení dat se často používá vhodná transformace $h(x)$. Ta však v případě platnosti modelu (1) vede ke vzniku nekonstantního rozptylu

$$D(h(x)) = \left[\frac{dh(x)}{dx}\right]^2 * \sigma^2 \qquad (2)$$

Např. pro běžně doporučovanou logaritmickou transformaci $h(x)=ln(x)$ vyjde

$$D(h(x)) = \left(\frac{\sigma}{x}\right)^2 = \delta^2 \qquad (3)$$

To znamená, že místo konstantní absolutní chyby je v této transformaci konstantní relativní chyba (variační koeficient), což odporuje přijatému modelu měření. Korektní analýza zde vyžaduje přímé použití zešikmeného rozdělení a konstrukci nesymetrických intervalů spolehlivosti.
Multiplikativní model měření je založen na předpokladech konstantní relativní chyby a nezápornosti měření (jde o fyzikální veličiny související s hmotou). Výsledek měření je modelován vztahem

$$x = \mu * exp(\varepsilon) \qquad (4)$$

Zde ε má stejné vlastnosti jako u modelu aditivního (rov.(1)). Po korektní logaritmické transformaci přechází tento model na aditivní model v logaritmech, tedy

$$ln(x) = ln(\mu) + \varepsilon \qquad (5)$$

Nevýhodou multiplikativního modelu je především to, že pro velmi nízké koncentrace resp.malé μ vychází absolutní chyba měření příliš nízká [4].
Pokud se použije nesprávný předpoklad o rozdělení chyb dochází ke zkreslení parametrů a následně celé statistické analýzy. Nechť např. platí aditivní model (1) a na data se použije nesprávně logaritmická transformace. Pak vyjde

$$ln(x) = ln(\mu + \varepsilon) = ln\,\mu + ln(1 + \varepsilon/\mu) \qquad (6)$$

S využitím Taylorova rozvoje lze psát

$$ln(x) \approx ln(\mu + \varepsilon) = ln\,\mu + \varepsilon/\mu - 0.5*(\varepsilon/\mu)^2 + 0.33*(\varepsilon/\mu)^3 - \ldots (7)$$

Pro malé relativní chyby měření $\delta = \sigma/\mu$ lze pak s využitím tohoto vztahu nalézt výrazy pro střední hodnotu a rozptyl *ln(x)* ve tvaru

$$E(ln\,x) = ln\,\mu - 0.5*\delta^2 - 0.75*\delta^4 \qquad (8)$$

a

$$D(ln\,x) = \delta^2 + 2.5*\delta^4 + 4.66*\delta^6 \qquad (9)$$

Je tedy patrné, že použití nesprávného předpokladu ovlivní jak střední hodnotu tak i rozptyl. Pro μ větší než jedna vyjde **<u>střední hodnota podhodnocená a rozptyl nadhodnocený</u>**.

Pro případ, že se analyzují data z různých vzorků se běžně předpokládá, že chyby měření jsou zanedbatelné vzhledem k variabilitě vzorků (měřeného materiálu) Jako model se pak používá se používá představa, že (x_i), i =..N, jsou realizace náhodné veličiny s rozdělením charakterizovaným hustotou pravděpodobnosti *f(x)* resp. distribuční funkcí *F(x*). Formálně je tedy

$$x_i = F^{-1}(p_i) \qquad (10)$$

kde p_i je hodnota distribuční funkce v místě x_i . Pokud je *f(x)* hustota pravděpodobnosti normálního rozdělení odpovídá tento model modelu (1) s tím, že μ je střední hodnota. Odhadem **střední hodnoty** je pak aritmetický průměr $\bar{x}$ a odhadem **rozptýlení** je výběrový rozptyl s^2 . Přesnosti libovolných odhadů *o* se charakterizují pomocí jejich rozptylů *D(o)*. Pro případ normálního rozdělení dat $x_i \sim N(\mu, \sigma^2)$ jsou tyto rozptyly

$$D(\bar{x}) = \frac{\sigma^2}{N} \qquad \text{a} \qquad D(s^2) = \frac{2.\sigma^4}{N-1}$$

K výraznému zkreslení rozptylu výběrového průměru může dojít v případě, že data nejsou nezávislá. To může být situace, kdy se vzorky k analýze odebírají z různých míst , které spolu nějak souvisejí (prostorová nebo časová autokorelace). Pro případ nejjednodušší autokorelace prvního řádu vyjádřené autokorelačním koeficientem ρ dojde ke zvětšení rozptylu střední hodnoty

$$D(\bar{x}) = \frac{\sigma^2}{N(1-\rho^2)}$$

Pro komplikovanější situace (prostorová závislost dlouhého dosahu) může být zkreslení způsobené závislostí v polohách odběru neúměrně vysoké.

<u>Klasická statistická analýza</u> je založena na odhadech $\bar{x}$, s^2 a předpokladu normality rozdělení chyb v modelu (1) resp. normality F(x) v modelu (10). Základní roli při posuzování výsledků měření hraje *100 (1 - α) %* ní interval spolehlivosti střední hodnoty, pro který obecně platí,

$$P(x_D \le \mu \le x_H) = 1 - \alpha$$

kde α je hladina významnosti a x_D x_H jsou náhodné meze určené z dat. (Standardně se konstruuje 95 % ní interval spolehlivosti). Pro případ normálního rozdělení chyb resp. měření je tento interval ve tvaru

$$\bar{x} - t_{1-\alpha/2}(N-1)*\frac{s}{\sqrt{N}} \le \mu \le \bar{x} + t_{1-\alpha/2}(N-1)*\frac{s}{\sqrt{N}} \qquad (11)$$

kde $t_{1-\alpha/2}(N-1).$ je kvantil Studentova rozdělení s *N-1* stupni volnosti. Pro větší výběry se běžně tento kvantil nahrazuje kvantilem normovaného normálního rozdělení $u_{1-\alpha/2}$.
Pro jiná než normální rozdělení již nemají odhady $\bar{x}$, s^2 optimální statistické vlastnosti a interval spolehlivosti definovaný rov. (11) není rozumně použitelný. Pro asymetrická rozdělení dat je interval (11) nevhodný již proto, že je symetrický. Navíc již nebude platit , že je *100 (1 - α) %.*
Při nemožnosti použití výše uvedeného standardního postupu pro reálná data existují v zásadě tři cesty:

I. Nalezení vhodného rozdělení pro původní data a konstrukce speciálních intervalů spolehlivosti.
II. Zlepšení rozdělení původních dat tak aby bylo možno použít pro transformovaná data standardní analýzu
III. Využití počítačově orientovaných postupů, kdy se generují „umělé výběry“ se stejným statistickým chováním a pak se na základě centrální limitní věty pracuje s průměrem z těchto výběrů.

Jednotlivé cesty mají své výhody a nevýhody. Možné zlepšení rozdělení dat vhodnou transformací je logické použít zejména v případech, kdy je cílem pouze stanovení intervalu spolehlivosti parametru polohy a nikoliv konstrukce pravděpodobnostních modelů. Navíc se velmi snadno určí, zda je toto zlepšení statisticky významné či nikoliv. Na druhé straně však jedna transformace nemusí vyhovovat pro všechna data a vznikají problémy pokud je nutno realizovat zpětnou transformaci. S výhodou lze pro hlubší posouzení kvality transformace využít generace „umělých výběrů“ (Bootstrap).

3. Transformace zlepšující rozdělení dat

S transformací dat se při zpracování experimentů setkáváme velmi často. Podle příčin můžeme transformaci dělit do dvou základních skupin:

A. Transformace zlepšující rozdělení dat. Zde je transformace žádána a přispívá ke zlepšení rozdělení dat (zjednodušuje jejich zpracování).

B. Transformace jako důsledek matematických operací (obyčejně realizace funkcí) s měřenými veličinami. To je případ, kdy známe u komplikovaných systémů vstupní náhodné veličiny a zajímá nás výstupní náhodná veličina. Patří sem tedy všechny transformace, kdy na základě experimentálních výsledků počítáme jiné veličiny (např. z hodnot poloměru plochu kruhových elementů). Zde je vlastně transformace nežádaná, protože deformuje původní rozdělení dat.

V případě ad A) se hledá vhodná transformace. V případě ad B) se hledají vhodné postupy zpracování dat, které omezují vliv transformace. Tato dualita vede často ke stavu, kdy formálně shodné (matematicky správné) metody poskytují značně odlišné výsledky.

Z uvedeného je zřejmé, že transformace může být buď "užitečným nástrojem", nebo "základní překážkou" při statistické analýze dat.
Jak bylo ukázáno v kap. 2, je pro statistickou analýzu dat ideální, pokud jsou prvky výběru náhodné vzájemně nezávislé veličiny se stejným normálním rozdělením.
Reálné výběry se od tohoto stavu více či méně odlišují. V jednodušším případě mají delší konce (vyšší špičatost), než odpovídá normálnímu rozdělení. To je často důsledek přítomnosti vybočujících měření. Zde je při statistické analýze stále střed symetrie v místě módu, který je totožný s mediánem a střední hodnotou. Efektivní odhad polohy je medián (průměr x má přibližně dvojnásobný rozptyl). Běžné statistické testy jsou vůči vyšší špičatosti dat poměrně robustní (to se týká zejména t-testu významnosti). Také valná většina robustních metod odhadu parametrů polohy a rozptýlení vychází z představy symetrického rozdělení dat, kontaminovaného jistým podílem symetricky vybočujících dat.
Komplikovanější je případ, kdy je rozdělení výběru zešikmené (obyčejně k vyšším hodnotám). Pak již není módus totožný s mediánem ani střední hodnotou a vlastní interpretace parametru polohy je ztížena. Efektivní odhad parametru polohy je možný jen při znalosti zákona rozdělení pravděpodobnosti (který však při analýze dat není apriorně znám). Běžné statistické testy jsou vůči zešikmenému rozdělení dat obecně nerobustní. Také základní robustní metody odhadu parametrů polohy a rozptýlení zde nefungují dobře.
Je tedy zřejmé, že již symetrizační transformace bude pro analýzu dat velmi užitečná.
Průvodním zjevem u řady "nenormálně" rozdělených výběrů je nekonstantnost rozptylu (pouze pro normální rozdělení platí, že střední hodnota je nezávislá na rozptylu).
Transformace stabilizující rozptyl je tedy zároveň transformací vedoucí k normalitě. Otázky spojené s existencí transformace vedoucí k normalitě jsou teoreticky řešeny v práci [5].

4. Transformace stabilizující rozptyl

Nekonstantnost rozptylu je průvodním jevem u řady měření. Indikuje buď neplatnost aditivního modelu měření typu rov. (1) nebo nenormalitu rozdělení náhodné veličiny, ze které byl realizován výběr. Zde se omezíme na případ, kdy je rozptyl $D(x)$ jistou známou funkcí velikosti x, což můžeme formálně vyjádřit vztahem

$$D(x) = g(x) \qquad (12)$$

Při známém (předpokládaném) tvaru g(x) se pak hledá stabilizující transformace $h(x)$, pro kterou již bude rozptyl konstantní. Elementární vztah pro rozptyl funkce náhodné veličiny je definován rov. (2). Protože je požadavkem výběr takové funkce h(x), aby $D(h(x)) = konst.$ a $D(x) = g(x)$, lze z rovnice (12) snadno nalézt, že

$$h(x) \approx const. \int \frac{dx}{\sqrt{g\}x\}}} \qquad (13)$$

Řešením tohoto integrálu (konstanta const. není důležitá pro tvar transformace) můžeme pak snadno určit transformaci stabilizující rozptyl.
V řadě případů je měření realizováno za podmínky konstantnosti relativní chyby, tj. konstantnosti variačního koeficientu $CV = [\sigma_x/x]. 10^{2}$. Rozptyl σ_x^2 v místě x je pak zřejmě $\sigma_x^2 = [CV/10^2]^2 x^2$, funkce (12) je tedy $g(x) = x^2$ Po dosažení do rovnice (13) a analytické integraci pak dostáváme $h(x) = ln(x)$. Použitím logaritmické transformace zde tedy eliminujeme nekonstantnost rozptylu (obecně platí, že tato transformace je vždy výhodná, pokud se jednotlivé prvky výběru mění v rozmezí několika řádů).

Pro silně zešikmená data (jako χ^2 rozdělení) se doporučuje odmocninová transformace. Pro gama rozdělení je zase stabilizující transformace třetí odmocniny $Z(x) = x^{1/3}$

5. Mocninná transformace

Mocninná transformace je poměrně široce využitelná pro řešení celé řady problémů. Platí, že aditivní i multiplikativní model lze vyjádřit jako speciální případy mocninné třídy modelů měření, která je charakterizována tím, že transformací obou stran pomocí funkce *h(.)* vyjde aditivní model

$$h(x) = h(\mu) + \varepsilon \qquad (14)$$

U pravděpodobnostního modelu (10) lze vhodnou transformací dat **stabilizovat rozptyl**, **přiblížit šikmost rozdělení k nule** a tvar rozdělení k **normálnímu rozdělení**. Cílem je na základě znalostí o výběru x_i , $i = 1, ...N$ nalézt vhodnou mocninu, resp. vhodný člen (pokud se použije celá rodina transformací).

Nejjednodušší je prostá mocninná transformace

$$hp(x) = sign(x)*abs(x)^{\lambda} \text{ pro } \lambda \neq 0 \qquad (15)$$
$$hp(x) = ln\,(x) \text{ pro } \lambda = 0$$

kde *abs(x)* je absolutní hodnota a *sign(x)* je znaménková funkce

$$sign(x)=1 \text{ pro } x>0,\ \ sign(x)=-1 \text{ pro } x<0,\ \ sign(x)=0 \text{ pro } x=0$$

Tato transformace nezachovává měřítko a ani není vzhledem k všude spojitá. Zachovává však pořadí dat ve výběru (jako všechny mocninné transformace).

Používá se jako jednoduchá symetrizující transformace a proto se hledá optimální mocnina λ tak, aby byly minimalizovány vhodné míry symetrie výběru. Je možno použít přímo výběrovou šikmost $g_1(y)$, nebo její robustní verzi $g_{R1}(y)$ viz. [1]. Stejně jednoduché je sledovat rozdíl mezi průměrem a mediánem v transformaci.

Pro posouzení kvality transformace, resp. nalezení optimálního λ je také možno použít grafu rozptýlení s kvantily (GRK), resp. kvantilových grafů (Q -Q grafů), jejichž konstrukce je popsána v [1].

Nevýhody prosté mocninné transformace (zejména nespojitost v okolí nuly a nesrovnatelnost měřítek v transformaci) odstraňuje rodina Box-Coxových transformací h(x), která je lineární transformací prosté mocninné transformace *hp(x)*. Box Coxova třída polynomických transformací má tvar

$$h(x) = \frac{x^{\lambda} - 1}{\lambda} \quad \lambda \neq 0 \qquad (16)$$
$$h(x) = ln(x) \qquad \lambda = 0$$

kde λ je parametr transformace. Pro $\lambda = 1$ resultuje aditivní model měření a pro $\lambda = 0$ model multiplikativní. S využitím Taylorova rozvoje lze odvodit, že v tomto případě je

$$x \approx \mu + \varepsilon / \mu^{1-\lambda} \qquad (17)$$

Pro případ, že rozptyl $D(\varepsilon)=\sigma^2$ je malý jde o aditivní model s nekonstantními chybami, pro který lze použít jako odhad μ vážený aritmetický průměr s vahami úměrnými $\mu^{-(1-\lambda)/2}$.
Lze ukázat, že vhodným odhadem parametru μ (neznámá koncentrace) je výběrový medián, který je invariantní vůči monotónní´transformaci.
Pokud *h(x)* je lineární transformací *hp(x)* platí pro re-transformované střední hodnoty

$$h^{-1}[E(h(x))] = hp^{-1}[E(hp(x))] \qquad (18)$$

Pro obě transformace je pak odhadem re-transformované střední hodnoty **zobecněný průměr**

$$M = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i^{\lambda} \right)^{1/\lambda} \quad \text{pro } \lambda \neq 0 \qquad (19)$$

resp.

$$M = \left(\prod_{i=1}^{N} x_i \right)^{1/N} \quad \text{pro } \lambda = 0 \qquad (20)$$

Pokud se použije mocninná transformace na **<u>aditivní model</u>** měření vyjde $h(x)=h(\mu+\varepsilon)$.
Z Taylorova rozvoje pak resultuje odhad vychýlení vlivem této nekorektnosti

$$B = E(h(x)) - h(\mu) \approx \frac{\sigma^2}{2!} \frac{d^2 h(x)}{dx^2} \downarrow (x=\mu) \qquad (21)$$

Tak např. pro logaritmickou transformaci vyjde $B = -0.5\ CV^2$, kde *CV* je variační koeficient. To odpovídá druhému členu v rov. (8).
Prostá mocninná transformace je invariantní vůči změně měřítka a Box Coxova transformace není invariantní vůči změně měřítka. Detaily lze nalézt v práci [6]. Pro eliminaci této nevýhody lze použít modifikované transformace

$$h(x,p) = \frac{x^{\lambda} - p^{\lambda}}{\lambda} \qquad \lambda \neq 0$$

$$h(x,p) = \ln(x/p) \qquad \lambda = 0$$

kde parametr p se volí jako aritmetický průměr, geometrický průměr resp. medián původních dat. Z uvedeného také přímo plyne, že obě transformace jsou závislé na posunu. Tedy mocninná transformace (x+a) poskytne jiné výsledky než mocninná transformace *x*.
Lze se snadno přesvědčit, že:

- rodina transformací definovaných rovnicí (16) je vzhledem k mocnině λ spojitá. V okolí λ blízkého nule platí $lim\ (x^{\lambda} - 1) / \lambda = lim\ x^{\lambda}\ ln(x) = ln(x)$
- všechny transformační závislosti *h(x)* procházejí jedním bodem o souřadnicích y = 0, x = 1 a mají v tomto bodě společnou směrnici (jsou zde, co do průběhu, <u>shodné)</u>
- Mocninné transformace s exponenty -2, -3/2, -1, -0,5, 0, 0,5, 1, 3/2, 2 jsou co do křivosti rovnoměrně rozmístěné.
- Vlivem transformace (16) se však obecně mění charakteristiky polohy a rozptýlení, což komplikuje porovnání různě transformovaných výběrů (nevadí pochopitelně pro přiblížení k normalitě, resp., zesymetričtění výběru).

Pro zajištění toho, aby měla transformovaná data přibližně stejnou polohu a rozptýlení jako data netransformovaná, je možné použít dostatečné lineární transformace (viz [2]).
Z hlediska analýzy dat je transformace vždy žádoucí, pokud $x_{(N)} / x_{(1)} > 20$ (předpokládají se kladná data). Rov. (16) je použitelná pouze pro kladná data. Pokud je znám jiný počátek x_0, pod kterým se data nemohou vyskytovat, volí se zobecněná mocninná transformace

$$h(x) = \frac{(x+c)^{\lambda} - 1}{\lambda} \qquad \lambda \neq 0 \tag{22}$$

$$h(x) = \ln(x+c) \qquad \lambda = 0$$

Zde $c >= x_0$. Obecně se hledají u této transformace dva parametry. S ohledem na to, že dosavadní transformace platí pro zdola omezené rozdělení dat, není zřejmě možné, aby jejich rozdělení bylo striktně normální. Pro odstranění této (prakticky nepříliš důležité) nevýhody doporučují Bickel a Doksum rozšířenou Box-Coxovu transformaci (pro parametr $\lambda > 0$), která pokrývá celou reálnou osu

$$h(x) = \frac{sign(x) * abs(x)^{\lambda} - 1}{\lambda} \qquad \lambda \neq 0 \tag{23}$$

Nevýhodou je, že tato transformace neobsahuje logaritmickou transformaci. Tato transformace je již nezávislá na měřítku.
Pro odhady parametrů v těchto rodinách transformací lze opět použít různých charakteristik šikmosti a špičatosti.
V případě **jednoparametrických rodin transformací** se lze zaměřit pouze na jednu charakteristiku tvaru (obyčejně šikmost). Výhodnější je použití testů normality dat po mocninné transformaci. Známý Shapiro-Wilkův test je úměrný testu významnosti směrnice v Q-Q grafu, takže lze také posuzovat linearitu v Q-Q grafech.
S ohledem na požadavek, aby se rozdělení výběru v transformaci co nejvíce blížilo normálnímu rozdělení, lze pro odhad optimálního použít metodu maximální věrohodnosti.
Pokud platí předpoklady aditivního modelu měření (normalita a nezávislost) má logaritmus věrohodnostní funkce tvar

$$ln\, L(\lambda) = \sum (\lambda - 1) * ln(x_i) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum \left[h(x_i) - h(\mu) \right]^2 \tag{24}$$

Pro pevné λ lze určit maximálně věrohodný odhad rozptylu ve tvaru

$$\sigma_c^2 = \frac{1}{N} \sum \left[h(x_i) - h(\mu) \right]^2 \tag{25}$$

kde se za $h(\mu)$ dosazuje aritmetický průměr transformovaných dat

$$h(\mu) \approx \frac{1}{N} \sum h(x_i) \tag{26}$$

Po dosazení do věrohodnostní funkce resultuje vztah

$$ln L^*(\lambda) = \sum(\lambda - 1) * ln(x_i) - \frac{N * ln\,\sigma_c^2}{2} \qquad (27)$$

Maximalizací $ln L^*(\lambda)$ podle λ (viz.[1]) lze pak snadno určit maximálně věrohodný odhad $\hat{\lambda}$ parametru transformace λ. Je patrné, že je tato úloha ekvivalentní minimalizaci rozptylu v transformovaných proměnných σ_c^2. Na základě Taylorova rozvoje funkce *h(x)* pro pevné λ vyjde přibližný výraz

$$D(\frac{x^\lambda - 1}{\lambda}) = \frac{1}{\lambda^2} D(x^\lambda) \approx E(x)^{2\lambda-2} D(x) = E(x)^{2\lambda} \delta^2$$

kde δ je variační koeficient. Je zřejmé, že pro pevné λ bude rozptyl v transformaci tím vyšší, čím bude větší rozptýlení dat. To umožní identifikaci extrému (minima). Pro málo rozptýlená data bude rozptyl v transformaci malý a identifikace extrému bude obtížnější. V práci [3] bylo ukázáno, že pro D(x) $\rightarrow$ 0 je rozptyl D($\hat{\lambda}$)$\rightarrow \infty$ a podobně i rozptyl zobecněného průměru roste nade všechny meze.Pro snadnou identifikovatelnost transformace je tedy výhodné mít větší rozptýlení dat jak je např. běžné u výběrů s asymetrických rozdělení.
Formálně lze úlohu maximalizace rov (27) vyjádřit ve tvaru

$$\frac{d\,ln(L)}{d\lambda} = \sum_i ln(x_i) - \frac{1}{\sigma^2} \sum_i \left(h(x_i) - \frac{1}{N} \sum_i h(x_i) \right) * \frac{dh(x_i)}{d\lambda} = 0 \qquad (28)$$

kde $\frac{dh(x_i)}{d\lambda} = \frac{(1 + \lambda * x_i) ln(1 + \lambda * x_i) - \lambda * x_i}{\lambda^2}$

Z druhé derivace věrohodnostní funkce lze určit rozptyl maximálně věrohodného odhadu mocninné transformace[7]. Po úpravách vyjde : $D(\hat{\lambda}) = 2(1-0.333*g_1^2 + 0.388\, g_2)/(3Nw)$, kde $w = \sigma^2 (1+\lambda)$. Zde σ^2 , g_1 a g_2 jsou rozptyl, šikmost a špičatost původních dat. Je patrné, že pro $\sigma^2 \rightarrow 0$ roste rozptyl odhadu mocninné transformace nade všechny meze.
Na základě asymptotického $(1-\alpha)$ % ního intervalu spolehlivosti parametru mocninné transformace lze sestavit nerovnost

$$ln L(\lambda) \geq ln L(\hat{\lambda}) - 0.5 * \chi^2_{1-\alpha}(1) \qquad (29)$$

Všechna λ splňující tuto nerovnost leží v intervalu spolehlivosti a jsou tedy přijatelná. Toho lze snadno využít pro rozlišení mezi aditivním a multiplikativním modelem měření. V rovnici (29) označuje $\chi^2_{1-\alpha}(1)$ kvantil χ^2 rozdělení s 1 stupněm volnosti.
Platí, že:

- pokud obsahuje 95% ní interval spolehlivosti také jedničku, volí se aditivní model.
- pokud obsahuje 95% ní interval spolehlivosti nulu a nikoliv jedničku, volí se multiplikativní model.
- v ostatních případech je možné zvolit pravděpodobnostní model (10) a použít pro další analýzu postup navržený v [1].

S výhodou lze využít grafického záznamu ln L(λ) na se zakresleným (obyčejně 95 %ním) intervalem spolehlivosti. Z tohoto grafu lze již snadno odhadnout jak kvalitu transformace, tak i posoudit, v jakých mezích se může hodnota λ pohybovat. (Platí, že čím jsou tyto meze užší, je kvalita transformace vyšší, pokud v nich neleží $\lambda = 1$).

Parametr mocninné transformace zřejmě souvisí s šikmostí rozdělení dat. Pro kvantifikaci tohoto vztahu lze dosadit do podmínky (28) místo h(x) jeho rozvoj do Taylorovy řady a určit maximálně věrohodný odhad analyticky. V práci [8] je toto odvození provedeno. Výsledek lze zapsat ve tvaru

$$\lambda \approx 1 - \frac{E(x) * \sigma * \beta_1}{6} \qquad (30)$$

kde β_1 je šikmost původních dat. Je patrné, že pro data zešikmená k vyšším hodnotám vyjde parametr transformace podstatně menší než jedna.
Pomocí vztahu (30) můžeme např. snadno posoudit vliv posunu dat na parametr mocninné transformace. Např. pro případ, že data posuneme o konstantu a tj. $y = a*x$ vyjde, že

$$\lambda_y = \lambda_x - (a * \sigma * \beta_1) / 6$$

Jak je patrné, je třeba při použití postupu mocninné transformace brát v úvahu také případné lineární transformace dat a jejich rozmezí.
Speciálně pro účely průzkumové analýzy dat (viz. [1]) byl navržen postup, který umožňuje grafické posouzení vhodnosti mocninné transformace. Je použito jednoduché třídy transformací typu

$$h(x) = a * x^{\lambda} + b \quad \lambda \neq 0 \qquad (31)$$
$$h(x) = c * \ln(x) + d \qquad \lambda = 0$$

Parametry a, b, c, d volí Emerson a Stotto [9] tak, aby byla zachována přibližná linearita transformace v okolí mediánu, tj.

$$med(x^{\lambda}) \approx med(x) \qquad \frac{d}{dx}(med(x^{\lambda}) \approx 1$$

Pro určení vhodné transformace se vychází z výběrových kvantilů x_p a mediánu $x_{0,5}$.
Vynesením $y^* = (x_p + x_{1-p})/2$ na $x^* = [(x_{1-p} - x_{0,5})^2 + (x_{0,5} - x_p)^2]/ (4\, x_{0,5})$ rezultuje v případě možnosti symetrizační transformace lineární závislost, procházející počátkem typu
$y^* = (1-\lambda)\, x^*$. Ze směrnice této závislosti tedy můžeme přímo nalézt odhad parametru transformace λ. Při praktické aplikaci tohoto postupu se volí jednotlivé písmenové hodnoty (viz [1]), pro které je $P_i = 2^{-(i+1)}$, i = 1, ... Pro robustní odhad směrnice $(1-\lambda)$ se doporučuje počítat pro všechny body směrnice $k_i = y_i^*/x_i^*$ a jako optimální vzít pak medián ze všech k_i.
Uvedený postup je vhodný pro málo a středně zešikmená rozdělení. Cameron [10] ukázal, že pro silně zešikmená rozdělení a kvantily x_p vzdálené od mediánu vzniká na grafu y^* vs , x^* systematická křivost. Pak je vhodné provádět iterativní hledání optimálního , kdy se výsledek z prvého určení směrnice (y^* vs. x^*) dosadí do transformace (31) a v dalších vyneseních se místo kvantilů proměnné *x* používají transformované kvantily *h(x)* (určené z předchozího

grafu). Také je výhodné v prvních fázích brát spíše směrnice určené z kvantilů ($P_1 = 0{,}25$). Z toho plyne, že Emerson-Stottův postup není zcela automatický a vyžaduje často iterativní hledání vhodného λ, kde v každé iteraci se konstruuje graf typu y^* na x^*. Na druhé straně je tento postup velmi jednoduchý a umožňuje posouzení vlivu případných vlivných bodů na výsledek transformace.
Lze se snadno přesvědčit, že všechny uváděné typy transformace jsou členy obecné Johnsonovy rodiny transformací J(x). Lze ukázat, že pouze pro tři funkce h(.) pokrývá transformace J(x) celé rozmezí šikmosti a špičatosti.

6. Metody BOOTSTRAP

Je známo, že pro konstrukci intervalu spolehlivosti populačního parametru p_s je třeba znát rozdělení $g(p)$ jeho odhadu p. Pro některá rozdělení (např. normální) a parametry (střední hodnota, rozptyl) jsou rozdělení odhadů nebo jejich funkcí známy a intervaly spolehlivosti je možné konstruovat relativně snadno.
Pro neznámé rozdělení výběru $\boldsymbol{x} = (x_1..x_N)$ a libovolný parametr ps lze s výhodou použít techniku Bootstrap, která umožňuje jak nalezení rozdělení výběrové statistiky p, tak i konstrukci intervalu spolehlivosti. Základní myšlenka metody Bootstrap je jednoduchá[16, 17]. Spočívá v generaci M-tice simulovaných výběrů $\boldsymbol{v}_1..\boldsymbol{v}_M$ označovaných jako Bootstrap výběry. Jejich rozdělení odpovídá rozdělení původního výběru $\boldsymbol{x}$, charakterizovaného hustotou pravděpodobnosti $g(x)$. Z těchto výběrů se určí M-tice odhadů $p_i = p(\boldsymbol{x})$ hledaného parametru ps. Z této M-tice hodnot lze počítat intervaly spolehlivosti pomocí celé řady metod.

A. Odhad z asymptotické normality

Jde o nejjednodušší postup založený na představě, že M je dostatečně veliké a p_i $i = 1..N$ lze zpracovat jako výběr z normálního rozdělení. Pro tzv. Bootstrap odhad střední hodnoty parametru ps platí

$$p_B = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} p_i \qquad (32)$$

a odpovídající rozptyl má tvar

$$s_B^2 = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} (p_i - p_B)^2 \qquad (33)$$

Pro $100(1-\alpha)$ %ní interval spolehlivosti parametru ps se pak použije známý vztah

$$p_B - u_{1-\alpha/2}\, s_B \le ps \le p_B + u_{1-\alpha/2}\, s_B \qquad (34)$$

kde $u_{1-\alpha/2}$ je kvantil normovaného normálního rozdělení.

B. Percentilový odhad

Tento postup je založen na neparametrickém odhadu mezí intervalu spolehlivosti vycházejícím z pořádkových statistik $p_{(i)}$,kde $p_{(i)} <= p_{(i+1)}$ jsou pořádkové statistiky, pro které platí, že jsou d %ním kvantilem rozdělení odhadu p pro

$$d = \frac{i}{M+1}$$

Dolní mez $100(1-\alpha)$ %ní intervalu spolehlivosti je pak

$$LC = p_{(k1)} \text{ kde } k1 = int[\alpha * (M+1)/2] \qquad (35)$$

a pro horní mez platí

$$UC = p_{(k2)} \text{ kde } k2 = int[(1-\alpha/2)*(M+1)] \quad (36)$$

Zde *int (x)* je celá část čísla *x*.

C. Studentizovaný odhad

Tento odhad vychází z jednoduché transformace vedoucí na Studentizovanou náhodnou veličinu t_i

$$t_i = \frac{p_i - p_B}{s_{Bi}}$$

kde s_{Bi} je výběrová směrodatná odchylka počítaná pro *i* - tý Bootstrap výběr v_i. Pro *100(1-α)* %ní interval spolehlivosti pak platí

$$p_B - t_D * s_B \le ps \le p_B + t_D * s_B \quad (37)$$

kde pořádková statistika $t_D = t_{(int[\alpha*(M+1)/2])}$ a pořádková statistika $t_H = t_{(int[(1-\alpha/2)*(M+1)])}$

D. Vyhlazený odhad

Obecně lze na základě hodnot p_i sestavit odhad hustoty pravděpodobnosti jejich rozdělení *fe(p)* např. s využitím histogramu nebo jádrového odhadu. Při znalosti funkce *fe(p)* se snadno konstruuje interval spolehlivosti přímo z definice. Pro meze tohoto intervalu pak platí, že

$$\alpha/2 = \int_{-\infty}^{LC} fe(p)dp$$

a

$$\alpha/2 = \int_{UC}^{\infty} fe(p)dp$$

Podle typu odhadu *fe* může jít o úlohu numerické nebo analytické integrace.

Základním předpokladem úspěšnosti celého postupu je **generace Bootstrap výběrů**. Pro tento účel je třeba buď znát nebo volit rozdělení *g(x)*. Standardní technika **neparametrického Bootstrap** vychází z neparametrického odhadu *g(x)* ve tvaru

$$g(x) = \frac{1}{N}\delta(x - x_i) \quad (38)$$

kde Diracova funkce $\delta(x - x_i) = 1$ pro $(x = x_i)$ a všude jinde je. $\delta(x - x_i) = 0$. Toto rozdělení pokládá pravděpodobnost *1/N* v každém bodě. Simulované výběry se pak realizují jako náhodné výběry složené z prvků původního výběru ***x*** s vracením (tj. jeden prvek původního výběru se může v simulovaném výběru vyskytovat i opakovaně**).**

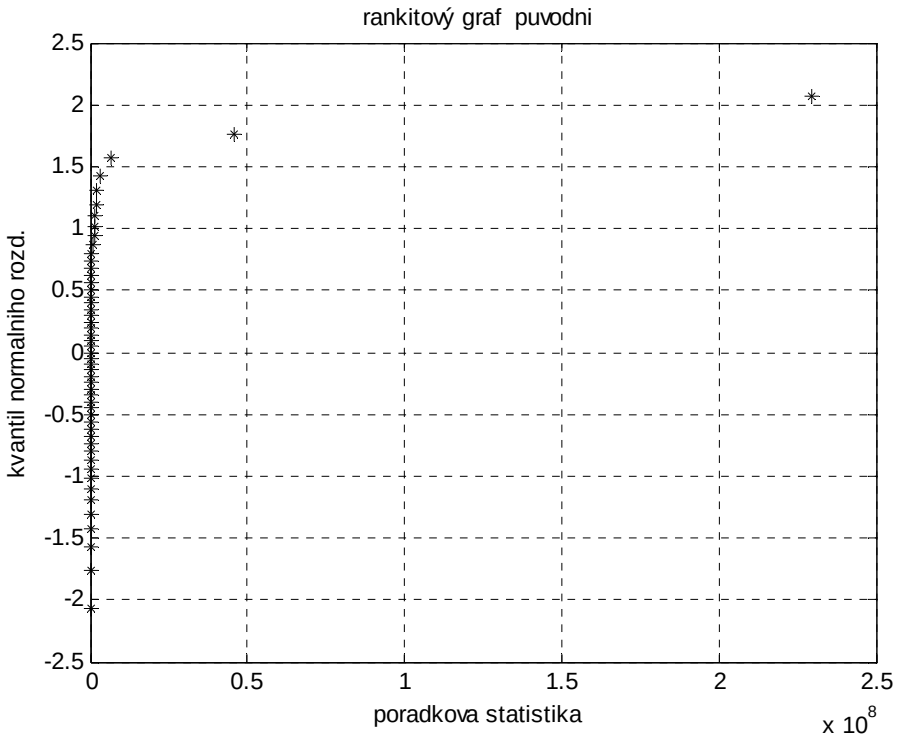
Další možností je konstruovat vhodný **parametrický model** *g(x)*, odhadnout jeho parametry a generovat simulované výběry standardními postupy. Tento přístup naráží na celou řadu problémů souvisejících s možnou nehomogenitou, vybočujícími body, heteroskedasticitou a autokorelací.

Bootstrap metody obecně poskytují informace jak o bodových odhadech, tak i intervalech spolehlivosti.

Uvažujme standardní neparametrický Bootstrap (v_i jsou výběry s vracením) pro $ps = \mu$, tj. jde o střední hodnotu a její interval spolehlivosti střední hodnoty. Lze snadno určit, že v tomto případě je Bootstrap průměr totožný s aritmetickým průměrem původních dat a Bootstrap rozptyl je M-krát menší než rozptyl původních dat. Liší se však intervaly spolehlivosti zejména tam, kde se rozdělení dat výrazně odchyluje od normálního rozdělení.
Kromě standardního Bootstrap lze použít také dvojitý Bootstrap (Bootstrap aplikovaný na výběry v_i), blokový Bootstrap (realizace výběru s vracením na bloky homogenních dat a sestavení celkového Bootstrap výběru spojením výsledků) [17] .
Pro účely detailnějšího posouzení kvality Box Coxovy transformace je možné určit výše uvedeným postupem (kap.5) pro všechny Bootstrap výběry parametr λ a posoudit jejich rozdělení. Jako vhodný odhad λ lze pak určit průměr z rov. (32) a meze intervalu spolehlivosti pro λ z percentilových odhadů definovaných rov. (35) a (36). Tento postup je využit v programu **bootcox** v jazyce MATLAB:

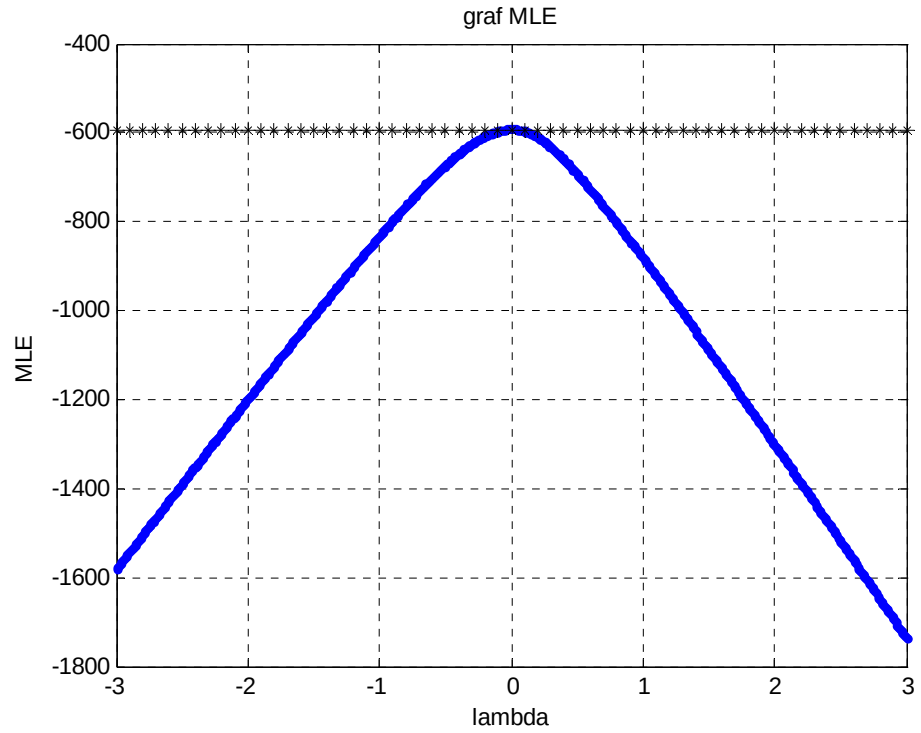
7. Příklad

Jednou možností programu **bootcox** je možnost generace náhodných výběrů z normálního rozdělení. Tento příklad je zvolen s cílem ukázat, že pro silně zešikmená data lze jen obtížně identifikovat vliv vybočujícího měření na výsledek Box Coxovy transformace. Bylo generováno 50 dat z normálního rozdělení se střední hodnotou 10 a směrodatnou odchylkou 3.5. Data byla převedena na zešikmené rozdělení exponenciální transformací exp(x). K těmto upraveným datům bylo přidáno vybočující měření s hodnotou 4x vyšší než maximální prvek transformovaného výběru. Je zřejmé, že k normalitě zde vede logaritmická transformace ln(x). Pro tato data je znázorněn rankitový graf pro původní data na obr 1.



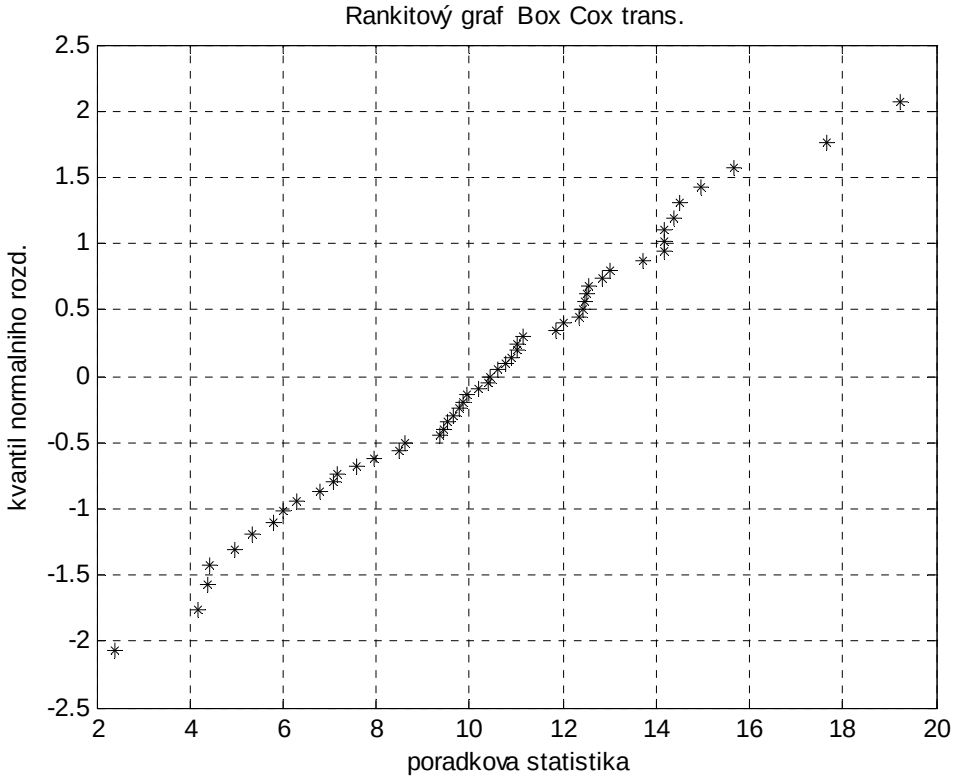
Obr 1. Rankitový graf pro původní data.

Je patné výrazné zešikmení a jeden silně vybočující bod. Průběh věrohodnostní funkce je na obr. 2. Optimální λ vyšlo 0.001 a meze 95 % ního intervalu spolehlivosti jsou -0.06 a 0.07.



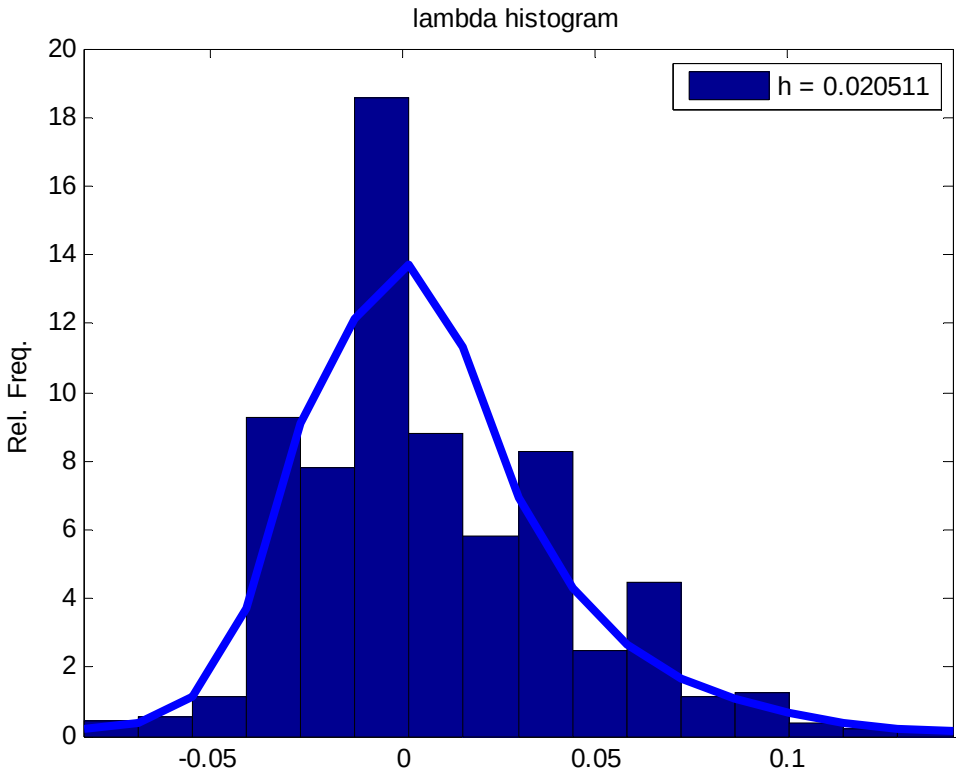
Obr 2. Graf věrohodnostní funkce.

Rankitový graf pro transformovaná data je na obr 3.



Obr 3. Rankitový graf pro transforovaná data (Box Cox)

Při použití neparametrické Bootstrap metody vyšlo λ jako průměr z 1000 Bootstrap výběrů rovno 0.00743 a meze 95 % ního intervalu spolehlivosti (percentilové odhady) jsou -0.05 a 0.09. Je patrné, že rozdíly jsou prakticky zanedbatelné. Histogram a neparametrický odhad hustoty pro λ počítané ze všech 1000 Bootstrap výběrů jsou na obr. 4.



Obr 4. Histogram a neparametrický odhad hustoty parametrů λ z Bootstrap výběrů

Je patrné, že rozdělení parametru λ je zešikmené k vyšším hodnotám (šikmost = 0.70) a poměrné ploché, což indikuje výrazné odchylky od normality a svědčí o heterogenitě dat. Je také zřejmé, že extrémně vysoké hodnoty v datech (viz. obr. 1) se logaritmickou transformací stanou prakticky nerozeznatelnými od ostatních (viz. obr. 2). Mocninná transformace zde tedy obecně potlačuje vybočující měření. .Protože interval spolehlivosti parametru λ obsahuje nulu lze provádět další analýzu v logaritmické transformaci resp. volit multiplikativní model měření.

8. Závěr

Je patrné, že statistické zpracování dat v analytické praxi má celou řadu specifických zvláštností, které je třeba brát v úvahu. Je vždy výhodné začít průzkumovou analýzou a porovnáním resp. selekcí modelů měření a až poté zvolit další cestu. Ve shodě s koncepcí „***satistical methods mining***“ [11] je často nezbytné kombinovat různé přístupy jako je transformace, robustní metody a počítačově intenzivní metody k dosažení rozumných výsledků.

Speciálně při transformaci dat je třeba mít na paměti, že jde o datově orientovaný přístup a pro dva různé výběry z téhož rozdělení lze získat různé odhady parametru transformace. Vodítkem může být kvalita transformace vyjádřená intervalem spolehlivosti parametru λ resp. rozdělení tohoto parametru z Bootstrap výběrů. Také vztah k šikmosti dat vyjádřený rov.

(30) indikuje často vhodnost transformace s ohledem na možné vybočující hodnoty (lze počítat šikmost ze všech dat a bez vybočujících bodů a porovnat odhady λ).
Běžně využívaná mocninná transformace potlačuje výrazně vybočující hodnoty. Je zřejmé, že přizpůsobení dat potřebám statistické analýzy (symetrizace) bez hlubšího rozboru příčin potřeby transformace může vést ke zkresleným závěrům.

Poděkování:
Tato práce vznikla s podporou výzkumného centra Textil, projekt č. 1M4674788501

9. Literatura
[1] Meloun M., Militký J.*: Zpracování experimentálních dat*, East Publishing Praha 1998
[2] Militký J., Meloun M.: Konference *Mikroelementy "99* ,Řež u Prahy , listopad 1999
[3] Bickel P.J., Doksum K.A.: *J. Amer. Stat Assoc.* **76**, 296 (1981)
[4] Massart D.L. a kol. : *Chemometrics a textbook*, Elsevier Amsterdam 1988
[5] Efron B.: *Annals of Statist***. 10**, 323 (1982)
[6] Schlesselman J.: *J. Roy Stat. Soc*. **B33**, 307 (1971)
[7] Draper N.R., Cox D. R.: *J. Roy Stat. Soc*. **B31**, 472 (1969)
[8] Box G. E. P., Cox D. R.: *J. Roy Stat. Soc*. **B26**, 211 (1964)
[9] Emerson J.D., Stotto M.A: *J.Amer.Stat.Assoc*. **77**, 103 (1982)
[10] Cameron M.: *J.Amer. Statist. Assoc*. **79**, 107 (1984)
[11] Parzen E.: Proc *Ninth Int. conf. on quantitative methods for environmental science*, July 1988, Melbourne
[12] Doksum K., Wong Ch.W.: *J.Amer.Statist. Assoc*. **78**, 411 (1983)
[13] Hinkley D.V., Runger G.*: J.Amer.Statist.Assoc***. 79**, 302 (1984)
[14] Berger G., Cassela. R.: *Amer. Statist* **46**, 279 (1992)
[15] Gaudard M., Karson M.: *Commun. Statist. Simula* . **29**, 559 (2000)
[16] Wekrens, R. a kol.: Chem.Int. Lab. Systems **54**, 35-52 (2000)
[17] Davidson, A., Hinkley, D.V.,: Bootstrap Methods and Their Applications, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997